Éléments de théorie spectrale : le Laplacien sur un ouvert borné

Mathieu LEWIN

CNRS & CEREMADE, Université Paris-Dauphine, PSL Research University
Mathieu.Lewin@math.cnrs.fr

(version révisée du 6 mars 2018)

Résumé

Dans ces notes de cours nous fournissons les éléments de base concernant la théorie spectrale des opérateurs auto-adjoints en dimension infinie, avec un accent sur les opérateurs à résolvante compacte. En particulier, nous étudions en détails l'opérateur Laplacien sur un ouvert borné et discutons les divers conditions au bord (Dirichlet, Neumann, Robin, périodique, Born-von Karman).

© 2017 Mathieu Lewin.

Table des matières

1 Motivation **3**

2 Opérateurs auto-adjoints en dimension infinie **5**

3 L'exemple du Laplacien sur $]0,1[$ **13**

4 Laplaciens périodique et de Born-von Karman **18**

5 Laplaciens de Dirichet, Neumann et Robin : auto-adjonction **22**

6 Diagonalisation dans une base orthonormée **26**
6.1 Diagonalisation dans une base orthonormée 26
6.2 Opérateurs auto-adjoints compacts 29
6.3 Opérateurs auto-adjoints à résolvante compacte 32

7 Laplaciens de Dirichet, Neumann et Robin : diagonalisation **33**

8 Formes quadratiques **33**
8.1 Théorème de Lax-Milgram 33
8.2 Formule de Courant-Fischer et ses variantes 37

9 Formes quadratiques du Laplacien et applications **42**
9.1 Laplaciens périodique et de Born-von Karman 42
9.2 Laplaciens de Dirichlet, Neumann et Robin 44

10 La première fonction propre du Laplacien de Robin **50**

11 Un peu de régularité **54**

12 Auto-adjonction des opérateurs de Schrödinger **57**

13 Opérateurs périodiques et théorie de Floquet-Bloch **62**
13.1 Théorie de Floquet-Bloch 62
13.2 Diagonalisation des opérateurs de Schrödinger périodiques 65

14 Introduction aux méthodes numériques **71**
14.1 Discrétisation et estimation d'erreur 71
14.1.1 Problème avec second membre 72
14.1.2 Problème aux valeurs propres 74
14.2 Laplacien de Dirichlet dans une base d'éléments finis de Lagrange 79
14.3 Opérateurs de Schrödinger périodiques dans une base d'ondes planes 83

A Rappels sur les espaces de Sobolev **85**
A.1 Définition 85
A.2 Espace de Sobolev sur l'intervalle $]0,1[$ 86
A.3 Espace de Sobolev sur $\mathbb{R}^d$ 88
A.4 Trace, relèvement, prolongement 88
A.5 Injections de Sobolev et compacité de Rellich 91

Ce document est consacré à l'étude théorique et numérique de problèmes aux valeurs propres, c'est-à-dire sous la forme générale

$$Av = \lambda v,$$

où v est un vecteur d'un espace de Hilbert (par exemple $\mathbb{C}^d$ mais ici plutôt un espace de dimension infinie comme $L^2(\Omega)$ où Ω est un ouvert de $\mathbb{R}^d$), et où A est une application linéaire, généralement supposée auto-adjointe. Nous étudierons également les problèmes avec second membre sous la forme

$$Av = w,$$

où w est donné dans un espace de Hilbert, et v est inconnu, une question qui revient à définir proprement l'opérateur A^{-1}.

Le lecteur habitué à l'étude des matrices hermitiennes en dimension finie sera peut-être surpris des difficultés apparaissant en dimension infinie. Dans ce document nous n'exposerons pas la théorie spectrale des opérateurs auto-adjoints de façon très détaillée ; elle peut être lue ailleurs, par exemple dans l'excellent ouvrage [9]. Nous allons plutôt introduire quelques concepts clés et expliquer leur utilité et leur importance sur des exemples phares intervenant dans la modélisation des solides. Nous étudierons en détails le cas du Laplacien

$$(Av)(x_1, ..., x_d) = -\Delta v(x_1, ..., x_d) = -\sum_{j=1}^{d} \frac{\partial^2 v}{\partial x_j^2}(x_1, ..., x_d), \tag{1}$$

où v est maintenant une fonction de $L^2(\Omega)$ et Ω est un ouvert de $\mathbb{R}^d$, souvent supposé borné. Nous discuterons longuement de la nécessité et de la pertinence d'un choix de conditions au bord de Ω. Enfin, nous étudierons dans un second temps la façon de discrétiser le problème afin de le résoudre de façon approchée sur un ordinateur.

1 Motivation

De nombreux problèmes pratiques se ramènent à la résolution d'une équation aux valeurs propres, en particulier avec le Laplacien (1). Un exemple célèbre est l'équation de la chaleur

$$\frac{\partial}{\partial t} u(t, x) - \Delta u(t, x) = 0, \tag{2}$$

qui décrit l'évolution de la température dans un solide homogène, représenté par un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ (ici le Laplacien agit uniquement sur la variable spatiale $x \in \Omega$). Lorsque Ω n'est pas tout l'espace, il faut ajouter des conditions au bord qui déterminent la température imposée à sa frontière. En 1822, Fourier a résolu cette équation dans le cas d'un segment $\Omega =]a, b[$, en utilisant les valeurs et fonctions propres du Laplacien (ce qui revient à utiliser les séries qui portent maintenant son nom), puis en ayant recours à une séparation des variables temporelles et spatiales. Sans entrer dans les détails techniques, ceci consiste à chercher des solutions particulières de (2) sous la forme $u(t, x) = g(t)f(x)$, ce qui mène à deux équations aux valeurs propres :

$$\begin{cases} g'(t) = -\lambda g(t), \\ -\Delta f(x) = \lambda f(x). \end{cases}$$

La première est une équation différentielle ordinaire dont la solution est $g(t) = Ae^{-\lambda t}$, qui décrit un amortissement en temps long (lorsque $\lambda \geq 0$). La seconde est elle une équation aux dérivées partielles sous la forme que nous allons étudier dans ce cours ; elle n'admet que des solutions avec $\lambda \geq 0$ lorsque la température est imposée au bord.

La même équation aux valeurs propres intervient lorsqu'on étudie les fréquences de vibration d'une corde ou d'un tambour. Le terme "spectre" a d'ailleurs été introduit par Hilbert à la fin du dix-neuvième siècle en référence aux fréquences de vibration des objets. Ce n'est qu'au début du vingtième siècle, avec l'invention de la mécanique quantique, qu'on s'est aperçu que la même équation pouvait décrire le spectre de raies des atomes et des molécules, observé dans les expériences de spectroscopie. Les petites vibrations d'une corde ou d'un tambour sont décrites par l'équation des ondes

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u(t,x) - \Delta u(t,x) = 0,$$

dont la seule différence avec (2) est la présence d'une dérivée seconde en temps au lieu d'une dérivée première. Cette fois u est une fonction qui décrit le déplacement vertical de l'objet en vibration, au point $x \in \Omega$ et à l'instant t. L'ensemble Ω est l'intervalle $]a, b[$ pour une corde, et un disque dans $\mathbb{R}^2$ pour un tambour circulaire. En cherchant une fois de plus des solutions sous la forme $u(t,x) = g(t)f(x)$, on trouve cette fois $g(t) = A\cos(\sqrt{\lambda}t + B)$ dont les oscillations décrivent bien l'aspect vibratoire du phénomène et, comme précédemment, l'équation aux valeurs propres $-\Delta f = \lambda f$ pour la variable spatiale. Cette solution particulière de l'équation des ondes est une fonction $u(t,x) = A\cos(\sqrt{\lambda}t + B)\, f(x)$ qui oscille périodiquement entre $-A|f(x)|$ et $A|f(x)|$ en chaque point $x \in \Omega$. Le modèle simplifié ne tient pas compte ici de l'amortissement qui fait que l'objet cesse de vibrer au bout d'un moment.

Les points où f s'annule sont les seuls qui restent immobiles pour tout temps. Cette propriété peut être utilisée pour "voir" l'ensemble des zéros de la fonction f, appelé *ensemble nodal* dans ce contexte. En effet, si on fait vibrer un tambour à la fréquence appropriée $1/\sqrt{\lambda}$ (fréquence de résonance), et que l'on jette des grains de sables sur le tambour, l'oscillation permanente de ce dernier va faire tomber les grains sur l'ensemble des zéros de f. On obtient ainsi de très belles figures qui ont fortement étonné les expérimentateurs avant que la théorie de l'équation des ondes ne soit développée.

Au début du dix-neuvième siècle, le physicien allemand Ernst Chladni a parcouru l'Europe pour montrer une expérience similaire avec une plaque métallique (qui est plutôt décrite par l'équation $\Delta^2 u = \lambda u$), et on parle maintenant de *figures acoustiques de Chladni*. L'expérience ayant fortement intéressé Napoléon, ce dernier a offert 3 000 francs à celle ou celui qui en fournirait l'explication scientifique. C'est la mathématicienne Sophie Germain qui reçut le prix en 1816, même si son argument était incomplet [21]. Aujourd'hui, de nombreuses vidéos disponibles sur internet permettent de voir les grains de sable former des figures élaborées en fonction de la fréquence à laquelle la plaque est mise en vibration.

Cet exemple historique nous rappelle que des objets de la vie courante peuvent avoir un comportement très complexe, mais qui est remarquablement bien expliqué par des mathématiques aujourd'hui considérées comme très standards. L'explication des figures sonores de Chladni passe par la théorie spectrale

du Laplacien dans un domaine borné Ω, que nous allons exposer en détails dans ce cours.

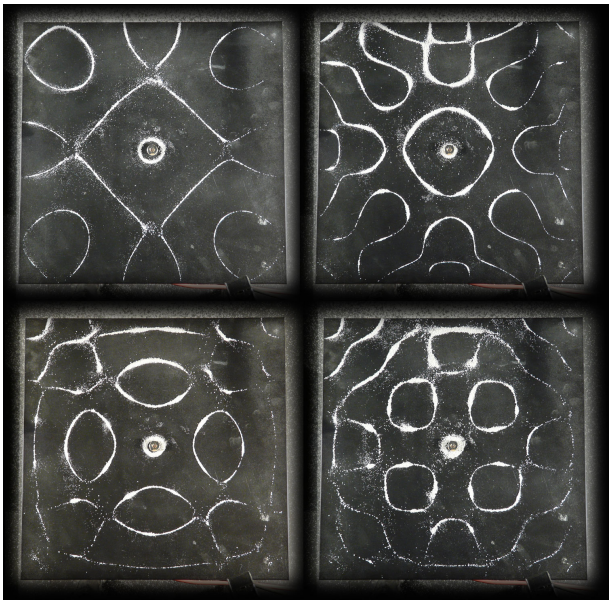


FIGURE 1 – Figure de Chladni obtenue par le laboratoire de Physique du Massachussets Institute of Technology (USA) en faisant vibrer une plaque métallique fixée au centre et recouverte de grains de sable, à différentes fréquences de résonance. Les grains de sable se placent sur les zéros de la fonction v solution de l'équation aux valeurs propres $\Delta^2 v = \lambda v$ pour plusieurs valeurs de λ. Ici λ est relié à la fréquence de vibration imposée à la plaque.

Ce cours contient un résumé très incomplet de la théorie spectrale des opérateurs auto-adjoint en dimension infinie, dans le but d'étudier plus en détails le Laplacien sur un domaine Ω, souvent supposé borné pour simplifier.

2 Opérateurs auto-adjoints en dimension infinie

Rappelons qu'une matrice carrée A de taille d à coefficients complexes est dite *auto-adjointe* ou *hermitienne* lorsque $A^* = A$ où A^* est par définition la matrice obtenue en appliquant la transposée et en prenant la conjugaison complexe de tous les coefficients. La propriété $A^* = A$ est équivalente à $\langle v, Aw\rangle_{\mathbb{C}^d} = \langle Av, w\rangle_{\mathbb{C}^d}$ où $\langle v, w\rangle_{\mathbb{C}^d} = v^* w$ est le produit scalaire de $\mathbb{C}^d$. Les matrices auto-adjointes sont toutes diagonalisables dans une base orthonormée et leurs valeurs propres sont réelles.

La généralisation en dimension infinie est bien plus laborieuse. Soit $\mathfrak{H}$ un espace de Hilbert séparable quelconque. Il est souvent nécessaire de considérer des applications linéaires A qui ne sont définies que sur un sous-espace $D(A)$ de $\mathfrak{H}$, appelé *domaine de* A.

Définition 1 (Opérateurs en dimension infinie)**.** *Un* opérateur sur $\mathfrak{H}$ *est la donnée d'un sous-espace dense* $D(A) \subset \mathfrak{H}$ *et d'une application linéaire* $A : D(A) \to \mathfrak{H}$.

En dimension infinie, il est donc absolument nécessaire de toujours spécifier le domaine $D(A)$ sur lequel on travaille. Comme nous allons le voir sur des exemples, la résolution de l'équation aux valeurs propres $Av = \lambda v$ dépend fortement du domaine considéré.

L'exemple le plus simple d'un opérateur A est celui d'une application linéaire définie sur tout l'espace $D(A) = \mathfrak{H}$, mais nous verrons plusieurs exemples d'opérateurs dont le domaine est un sous-espace strict de $\mathfrak{H}$. Nous pensons particulièrement à la dérivation $f \mapsto f'$ qui est bien linéaire mais qui n'est pas définie sur tout $\mathfrak{H} = L^2(]0,1[)$ (on peut la définir sur L^2 mais son image est alors une distribution qui n'appartient pas nécessairement à L^2). Cette dernière est par contre bien définie sur l'espace de Sobolev $D(A) = H^1(]0,1[) \subset L^2(]0,1[)$ et prend alors bien ses valeurs dans $L^2(]0,1[)$.

On appelle spectre d'une matrice carrée l'ensemble des nombres complexes λ tels que $\det(A-\lambda) = 0$, c'est-à-dire tels que $A - \lambda$ ne soit pas inversible. L'inversibilité est ici équivalente à la non injectivité ou à la non surjectivité de $A - \lambda$. Par ailleurs, l'inverse $(A-\lambda)^{-1}$ est toujours une application continue car linéaire. En dimension infinie la situation est plus complexe car une application linéaire peut être injective sans être surjective, et réciproquement. De plus, l'inverse peut exister sans être borné. La définition du spectre est la suivante.

Définition 2 (Spectre)**.** *Soit A un opérateur défini sur $D(A) \subset \mathfrak{H}$. On appelle* ensemble résolvant de A *le sous-ensemble de $\mathbb{C}$*

$$\rho(A) := \{\lambda \in \mathbb{C} \text{ tels que } A - \lambda : D(A) \to \mathfrak{H} \\ \text{est inversible d'inverse } (A-\lambda)^{-1} : \mathfrak{H} \to D(A) \subset \mathfrak{H} \text{ borné}\}.$$

Le spectre de A *est par définition l'ensemble $\sigma(A) = \mathbb{C} \setminus \rho(A)$.*

L'hypothèse que $(A-\lambda)^{-1}$ est borné signifie qu'il existe une constante C telle que $\|(A-\lambda)^{-1}v\|_{\mathfrak{H}} \leq C\|v\|_{\mathfrak{H}}$ pour tout $v \in \mathfrak{H}$ ou, dit autrement, que $(A-\lambda)^{-1}$ définit une application continue sur $\mathfrak{H}$ (mais qui prend ses valeurs dans $D(A)$).

Nous voyons qu'un nombre complexe λ peut appartenir au spectre de A pour plusieurs raisons différentes. Par exemple $A - \lambda$ pourrait ne pas être injectif, et il existe alors un $v \neq 0$ tel que $Av = \lambda v$. Dans ce cas, λ est appelée une *valeur propre de A* et v est un *vecteur propre associé*. La *multiplicité* de λ est par définition la dimension de $\ker(A-\lambda)$ et elle peut être finie ou infinie. Mais il est également possible que $A - \lambda$ soit injectif sans être surjectif, ou même qu'il soit inversible mais que son inverse ne soit pas borné sur $\mathfrak{H}$.

Exemple 3. *Sur $\mathfrak{H} = \ell^2(\mathbb{N})$ on introduit le décalage à droite S défini par $S(\mathbf{x}) = (0, x_1, x_2, ...)$ pour $\mathbf{x} = (x_1, x_2, ...) \in \ell^2(\mathbb{N})$. Alors S est injectif mais pas surjectif. Donc $0 \in \sigma(S)$ mais 0 n'est pas une valeur propre.*

Avant d'aller plus loin nous commençons par prouver que le spectre d'un opérateur est toujours un ensemble fermé.

Lemme 4 ($\sigma(A)$ est fermé)**.** *Soit A un opérateur défini sur son domaine $D(A)$ et $z \in \rho(A)$. Alors la boule ouverte de centre z et de rayon*

$$\frac{1}{\|(A-z)^{-1}\|}$$

est incluse dans $\rho(A)$. En particulier, $\sigma(A)$ est fermé.

Démonstration. On peut écrire

$$A - z - \eta = \Big(1 - \eta(A-z)^{-1}\Big)(A-z)$$

où l'opérateur $A-z$ à droite est une bijection de $D(A)$ dans $\mathfrak{H}$ puisque $z \in \rho(A)$ par hypothèse, et l'opérateur $1-\eta(A-z)^{-1}$ est borné sur $\mathfrak{H}$. Or on sait que pour tout opérateur borné B de norme $\|B\| < 1$, l'opérateur $1-B$ est inversible avec

$$(1-B)^{-1} = \sum_{n\geq 0} B^n.$$

Ainsi, l'opérateur $1-\eta(A-z)^{-1}$ est inversible pour $\eta\|(A-z)^{-1}\| < 1$. Comme composition d'opérateurs inversibles, on conclut alors que $A-z-\eta$ est inversible de $D(A)$ dans $\mathfrak{H}$ d'inverse borné, égal à

$$(A-z-\eta)^{-1} = (A-z)^{-1} \sum_{n\geq 0} \eta^n (A-z)^{-n},$$

ceci pour tout $\eta\|(A-z)^{-1}\| < 1$. □

Après avoir introduit le concept d'opérateur (qui généralise donc celui de matrice en dimension finie), nous pouvons maintenant parler d'auto-adjonction. Il faut alors distinguer la propriété de symétrie (déjà rencontrée pour les matrices) et les problèmes liés au domaine $D(A)$, qui sont eux typiques de la dimension infinie.

Définition 5 (Symétrie)**.** *On dit qu'un opérateur A défini sur le domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$ est* symétrique *lorsque $\langle v, Aw\rangle = \langle Av, w\rangle$ pour tous $v, w \in D(A)$.*

En dimension infinie, un opérateur symétrique n'a pas nécessairement un spectre réel car, comme nous l'avons vu, il y a de multiples raisons non équivalentes pour lesquelles on peut avoir $\lambda \in \sigma(A)$. Par contre il est possible de montrer, en suivant la preuve de la dimension finie, que les valeurs propres sont toujours réelles.

Lemme 6 (Valeurs propres des opérateurs symétriques)**.** *Un opérateur symétrique a toutes ses valeurs propres réelles.*

Démonstration. Si $Av = \lambda v$ pour un $v \in D(A)$ non nul, alors on a $\lambda\|v\|^2_{\mathfrak{H}} = \langle v, Av\rangle_{\mathfrak{H}} = \langle Av, v\rangle_{\mathfrak{H}} = \overline{\lambda}\|v\|^2_{\mathfrak{H}}$. □

L'équation $\langle v, Aw\rangle = \langle Av, w\rangle$ peut être réécrite sous la forme

$$\big\langle (v, Av), (Aw, -w)\big\rangle_{\mathfrak{H}\times\mathfrak{H}} = 0, \tag{3}$$

pour tous $v, w \in D(A)$, où le produit scalaire de $\mathfrak{H} \times \mathfrak{H}$ est bien sûr défini par

$$\big\langle (u_1, u_2), (v_1, v_2)\big\rangle_{\mathfrak{H}\times\mathfrak{H}} := \langle u_1, v_1\rangle_{\mathfrak{H}} + \langle u_2, v_2\rangle_{\mathfrak{H}}.$$

La relation (3) signifie donc que le graphe de A est inclus dans l'orthogonal du graphe tourné :

$$\big\{(v, Av) \in D(A) \times \mathfrak{H}\big\} \subset \big\{(Aw, -w) \in \mathfrak{H} \times D(A)\big\}^{\perp}. \tag{4}$$

Dans toute la suite nous noterons

$$G(A) = \big\{(v, Av) \in D(A) \times \mathfrak{H}\big\} \quad \text{et} \quad T(A) = \big\{(Aw, -w) \in \mathfrak{H} \times D(A)\big\}$$

le graphe et le graphe tourné d'un opérateur A, de sorte que A est symétrique si et seulement si $G(A) \subset T(A)^\perp$. Évidemment, $T(A)$ s'obtient à partir de $G(A)$ par une simple rotation et les deux espaces sont isomorphes.

Lorsque l'espace de Hilbert ambiant $\mathfrak{H}$ est de dimension finie d, le graphe et le graphe tourné sont des sous-espaces de dimension d de $\mathfrak{H} \times \mathfrak{H}$. Comme $\dim(\mathfrak{H} \times \mathfrak{H}) = 2d$, l'orthogonal à droite est aussi de dimension d. Ainsi, en dimension finie les deux ensembles de (4) sont nécessairement égaux pour une matrice symétrique.

Il semble donc naturel d'imposer la même propriété en dimension infinie, ce qui nous amène à la définition suivante.

Définition 7 (Auto-adjonction)**.** *On dit qu'un opérateur A, défini sur $D(A) \subset \mathfrak{H}$, est* auto-adjoint *lorsqu'on a égalité dans* (4) *:*

$$\big\{(v, Av) \in D(A) \times \mathfrak{H}\big\} = \big\{(Aw, -w) \in \mathfrak{H} \times D(A)\big\}^\perp. \tag{5}$$

Rappelons que l'inclusion $\subset$ dans (5) signifie que A est symétrique. C'est l'autre inclusion $\supset$ qui est nouvelle ici.

Nous voyons que si A est auto-adjoint sur un domaine $D(A)$ alors il ne peut l'être sur un domaine strictement plus petit. En effet, le graphe diminue strictement et l'orthogonal du graphe tourné augmente. Dans la pratique on pourrait préférer choisir $D(A)$ très petit de sorte que tout soit aisément défini (par exemple on peut définir la dérivation $A : f \mapsto f'$ sur $D(A) = C_c^\infty(]0, 1[)$). Mais ce choix n'est pas judicieux car le graphe $G(A)$ sera très petit et l'orthogonal du graphe tourné sera lui très gros, de sorte que les deux ensembles de (5) seront très différents. Une bonne pratique est au contraire de choisir le domaine $D(A)$ le plus gros possible de sorte à avoir égalité dans (4).

Notons aussi que, comme l'orthogonal d'un sous-espace est toujours fermé, un opérateur auto-adjoint a donc son graphe qui est fermé. Par le théorème du graphe fermé, ceci est équivalent au fait que A est un opérateur borné de $D(A)$, muni de la norme du graphe $\|v\|_{G(A)} := \|v\|_{\mathfrak{H}} + \|Av\|_{\mathfrak{H}}$, dans $\mathfrak{H}$. C'est une propriété importante qui sera utile dans la suite.

Il est d'usage d'introduire un opérateur A^* appelé adjoint de A et de définir l'auto-adjonction comme l'égalité de A et A^* (ce qui comprend l'égalité des domaines), mais nous avons ici évité cette définition.

Exercice 8 (Adjoint de A)**.** *Montrer qu'un sous-espace vectoriel $G \subset \mathfrak{H} \times \mathfrak{H}$ est le graphe d'un opérateur B si et seulement si $(0, y) \in G$ implique $y = 0$, et la projection $D = \{x \in \mathfrak{H} \ : \ \exists y \in \mathfrak{H},\ (x, y) \in G\}$ est dense. En utilisant la propriété que $D(A)$ est dense dans $\mathfrak{H}$, montrer que $T(A)^\perp$ est le graphe d'un opérateur A^* défini sur un domaine dense $D(A^*)$, et que l'on a $\langle v, Aw\rangle = \langle A^*v, w\rangle$ pour tous $v \in D(A^*)$ et $w \in D(A)$. L'opérateur A^* s'appelle l'adjoint de A. Vérifier alors que A est auto-adjoint si et seulement si $A = A^*$, ce qui contient la condition que $D(A) = D(A^*)$.*

La définition 7 peut sembler très abstraite, à juste titre. Pourtant, comme nous le verrons sur des exemples plus loin, la vérification pratique de l'égalité dans (5) n'est parfois pas trop difficile. Le premier cas facile est celui d'un opérateur symétrique défini sur tout $\mathfrak{H}$, qui est automatiquement auto-adjoint.

Proposition 9 (Opérateurs auto-adjoints bornés)**.** *Si A est défini sur tout $D(A) = \mathfrak{H}$ et est symétrique, alors A est auto-adjoint et borné.*

Démonstration. Soit $(v, z) \in T(A)^\perp$. Alors on a par définition $\langle v, Aw\rangle = \langle z, w\rangle$ pour tout $w \in D(A) = \mathfrak{H}$. Comme A est défini sur tout $\mathfrak{H}$, on peut utiliser l'hypothèse de symétrie pour en déduire que $\langle Av, w\rangle = \langle z, w\rangle$ ou, de façon équivalente, $\langle Av - z, w\rangle = 0$ pour tout $w \in D(A) = \mathfrak{H}$. En prenant maintenant $w = Av - z \in \mathfrak{H} = D(A)$, on conclut que $Av = z$, c'est-à-dire que (v, z) appartient au graphe de A. Comme nous venons de montrer l'égalité (5), le graphe de A est nécessairement fermé et, par le théorème du graphe fermé, cela signifie que A est continu, donc borné. □

Pour des opérateurs définis sur un domaine strict $D(A)$ de $\mathfrak{H}$, la notion d'auto-adjonction introduite précédemment est totalement justifiée par le théorème suivant.

Théorème 10 (Caractérisation des opérateurs auto-adjoints)**.** *Soit A un opérateur symétrique défini sur le domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$. Les assertions suivantes sont équivalentes :*

1. *A est auto-adjoint, c'est-à-dire vérifie* (5) *;*
2. *le spectre de A est réel : $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$;*
3. *il existe $\lambda \in \mathbb{C}$ tel que $A - \lambda$ et $A - \overline{\lambda}$ sont tous les deux surjectifs, de $D(A)$ dans $\mathfrak{H}$.*

L'énoncé nous apprend qu'il est nécessaire et suffisant que l'égalité ait lieu dans (4) si on désire que le spectre d'un opérateur symétrique soit réel, comme en dimension finie. En plus d'imiter le cas de la dimension finie, avoir un spectre réel est extrêmement important d'un point de vue pratique car c'est ce qui autorisera l'emploi de techniques variationnelles, permettant ensuite de discrétiser le problème au valeurs propres convenablement. Par ailleurs nous verrons sur des exemples que l'on a très fréquemment $\sigma(A) = \mathbb{C}$ lorsque A est symétrique non auto-adjoint.

Si l'assertion *2* du théorème est très réconfortante du point de vue de la théorie, l'assertion *3* est elle très utile d'un point de vue pratique et sera fréquemment utilisée dans la suite du cours. Elle est en effet beaucoup plus faible que *2* puisque si $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ alors $A - a - ib$ et $A - a + ib$ sont surjectifs pour tous $a \in \mathbb{R}$ et tous $b \in \mathbb{R}^*$. Montrer l'assertion *3* requiert donc beaucoup moins de travail que *2*.

La preuve du théorème 10 n'est pas difficile et nous allons la fournir dans tous ses détails, mais le lecteur pressé pourra la sauter dans un premier temps. La démonstration repose sur le lemme fondamental suivant.

Lemme 11. *Soit A un opérateur auto-adjoint de domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$. Alors* $\ker(A - \lambda) = \mathrm{Im}(A - \overline{\lambda})^\perp$*, pour tout $\lambda \in \mathbb{C}$.*

Démonstration. Si A est symétrique, et $v \in \ker(A-\lambda)$, on a $0 = \langle w, (A - \lambda)v\rangle_{\mathfrak{H}} = \big\langle (A - \overline{\lambda})w, v\big\rangle_{\mathfrak{H}}$ pour tout $w \in D(A)$, ce qui montre l'inclusion $\subset$. Pour des matrices l'inclusion réciproque suit immédiatement du théorème du rang, mais en dimension infinie l'auto-adjonction de A est requise. En effet, soit maintenant $w \in \mathrm{Im}(A - \overline{\lambda})^\perp$, ce qui signifie que $\big\langle w, (A - \overline{\lambda})v\big\rangle = 0$ pour tout $v \in D(A)$. On peut écrire cette relation sous la forme $\langle (w, \lambda w), (Av, -v)\rangle_{\mathfrak{H}\times\mathfrak{H}} = 0$ pour

tout $v \in D(A)$. Comme on a égalité dans (5), cela signifie précisément que $(w, \lambda w)$ doit appartenir au graphe de A ou, dit autrement, que $w \in D(A)$ et que $Aw = \lambda w$. Ceci prouve bien l'inclusion réciproque. □

Avec le lemme à notre disposition, il est possible d'écrire la preuve du théorème 10.

Preuve du théorème 10. Nous commençons par remarquer que si A est un opérateur symétrique, on a pour $\lambda = a + ib$ avec $a, b \in \mathbb{R}$ et $v \in D(A)$

$$\|(A - \lambda)v\|_{\mathfrak{H}}^2 = \|(A - a)v\|_{\mathfrak{H}}^2 + b^2 \|v\|_{\mathfrak{H}}^2 \tag{6}$$

(il suffit de développer le carré et de vérifier que le terme croisé s'annule).

Supposons maintenant que A est auto-adjoint et montrons l'assertion *2*, c'est-à-dire que $A - \lambda : D(A) \to \mathfrak{H}$ est inversible d'inverse borné, pour tout $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$. Soit donc $\lambda = a + ib$ avec $b \neq 0$. D'après le lemme 6, on sait déjà que $\ker(A - \lambda) = \{0\}$ donc que $A - \lambda$ est injectif.

On montre ensuite la surjectivité. D'un côté, on a $\mathrm{Im}(A - \lambda)^\perp = \ker(A - \overline{\lambda})$ d'après le lemme 11 (avec b remplacé par $-b$), et $\ker(A - \overline{\lambda}) = \{0\}$ puisque les valeurs propres sont toutes réelles d'après le lemme 6. On en déduit donc que $\mathrm{Im}(A - \lambda)$ est dense dans $\mathfrak{H}$. D'un autre côté, il se trouve que $\mathrm{Im}(A - \lambda)$ est également fermé. En effet, si $(A - \lambda)v_n \to w$ alors (v_n) est une suite de Cauchy puisque

$$\|v_n - v_p\|_{\mathfrak{H}}^2 \leq b^{-2} \|(A - \lambda)(v_n - v_p)\|_{\mathfrak{H}}^2$$

d'après (6), donc $v_n \to v$. Comme $v_n \to v$ et $Av_n \to w + \lambda v$, le graphe de A étant fermé on conclut que $v \in D(A)$ et que $(A - \lambda)v = w$, ce qui montre bien que $\mathrm{Im}(A - \lambda)$ est fermé. En conclusion, $\mathrm{Im}(A - \lambda)$ est dense et fermé, donc égal à tout $\mathfrak{H}$. Nous avons donc montré que l'opérateur $A - \lambda$ est inversible. Il reste à voir que son inverse est borné, ce qui suit immédiatement de (6) qui fournit $\|(A - \lambda)^{-1} w\|_{\mathfrak{H}} \leq b^{-1} \|w\|_{\mathfrak{H}}$. Ainsi, λ n'est pas dans le spectre de A et on a $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$.

Comme l'assertion *2* implique évidemment *3*, il reste à prouver que *3* implique *1*. On suppose maintenant que $A - \lambda$ et $A - \overline{\lambda}$ sont surjectifs pour un $\lambda \in \mathbb{C}$ (réel ou pas) et on désire montrer que A est auto-adjoint, c'est-à-dire l'inclusion $\supset$ dans (5). Soit $(v, w) \in T(A)^\perp = \{(Az, -z),\ z \in D(A)\}^\perp$, c'est-à-dire tel que $\langle v, Az \rangle = \langle w, z \rangle$ pour tout $z \in D(A)$. Comme $A - \overline{\lambda}$ est surjectif par hypothèse, il existe $y \in D(A)$ tel que $w - \overline{\lambda} v = (A - \overline{\lambda})y$ et on obtient

$$\langle v, (A - \lambda)z \rangle = \big\langle w - \overline{\lambda} v, z \big\rangle = \big\langle (A - \overline{\lambda})y, z \big\rangle = \langle y, (A - \lambda)z \rangle,$$

puisque $z \in D(A)$ et que A est symétrique. Par ailleurs $A - \lambda$ est aussi surjectif, donc on peut trouver $z \in D(A)$ tel que $(A - \lambda)z = y - v$. On en déduit alors que $y = v$ et donc que $v \in D(A)$ et $w = Av$. □

Voici maintenant un résultat qui permet de donner une caractérisation assez pratique du spectre des opérateurs auto-adjoints.

Théorème 12 (Spectre des opérateurs auto-adjoints)**.** *Soit A un opérateur auto-adjoint sur le domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$, et $\lambda \in \mathbb{R}$. Les assertions suivantes sont équivalentes :*

1. *$\lambda \in \sigma(A)$;*

2. $\inf_{\substack{v\in D(A)\\ \|v\|=1}} \|(A-\lambda)v\|_{\mathfrak{H}} = 0$ *;*

3. il existe une suite $(v_n) \subset D(A)$ *telle que* $\|v_n\|_{\mathfrak{H}} = 1$ *et* $\|(A-\lambda)v_n\|_{\mathfrak{H}} \to 0$.

Ce résultat nous donne une interprétation du spectre très utile en dimension infinie. La troisième assertion nous dit ainsi que les éléments du spectre sont tous des quasi-valeurs propres au sens où on peut résoudre l'équation $Av = \lambda v$ de manière approchée avec une suite v_n, sans nécessairement pouvoir passer à la limite et trouver réellement une solution. En dimension finie, comme la sphère unité est compacte et A est continue, on peut bien sûr toujours passer à la limite et il n'y a que des valeurs propres. Un résultat similaire au théorème 12 mais plus précis sera prouvé plus loin (voir le théorème 37).

Démonstration. L'équivalence de *2.* et *3.* suit de la définition de l'infimum. Si *2.* est vraie, il est clair que l'inverse de $A-\lambda$, s'il existe, ne peut être borné, puisque ceci impliquerait $\|(A-\lambda)^{-1}w\|_{\mathfrak{H}} \leq C\|w\|_{\mathfrak{H}}$ et donc $1 = \|v\|_{\mathfrak{H}} \leq C\|(A-\lambda)v\|_{\mathfrak{H}}$ en prenant $w = (A-\lambda)v$ avec $\|v\|_{\mathfrak{H}} = 1$, qui contredirait le fait que l'infimum dans *2.* vaut 0. Donc λ est nécessairement dans le spectre.

Réciproquement, si l'infimum dans *2.* vaut $\varepsilon > 0$, alors $\|(A-\lambda)v\|_{\mathfrak{H}} \geq \varepsilon\|v\|_{\mathfrak{H}}$ pour tout $v \in D(A)$. Ceci implique évidemment que $\ker(A-\lambda) = \{0\}$ et donc, par le lemme 11, que $A-\lambda$ est d'image dense. Mais avec le même argument qu'à la fin de la preuve du théorème 10, on conclut que l'image est fermée et que l'inverse est borné par $1/\varepsilon$. Ceci montre donc que $\lambda \notin \sigma(A)$. □

Exercice 13. *En utilisant le théorème 12, retrouver le fait que* $\sigma(A)$ *est un fermé, comme nous l'avons déjà démontré au lemme 4 (sans utiliser l'hypothèse d'auto-adjonction).*

Nous donnons maintenant plusieurs conséquences intéressantes de ce résultat, et traitons des exemples.

Corollaire 14 (Localisation du spectre)**.** *Soit* A *un opérateur auto-adjoint sur le domaine* $D(A) \subset \mathfrak{H}$ *et* $a \in \mathbb{R}$*. Si* $\langle v, Av\rangle_{\mathfrak{H}} \geq a\|v\|_{\mathfrak{H}}^2$ *pour tout* $v \in D(A)$*, alors* $\sigma(A) \subset [a, +\infty[$.

La réciproque est également vraie, ce que nous verrons plus tard au corollaire 35.

Démonstration. Soit $\lambda \in \sigma(A)$ et (v_n) une suite comme au théorème 12. Comme $Av_n - \lambda v_n \to 0$ et que $\|v_n\|_{\mathfrak{H}} = 1$, on en déduit par l'inégalité de Cauchy-Schwarz que $\langle v_n, Av_n - \lambda v_n\rangle_{\mathfrak{H}} = \langle v_n, Av_n\rangle_{\mathfrak{H}} - \lambda \to 0$. Comme $\langle v_n, Av_n\rangle_{\mathfrak{H}} \geq a\|v_n\|_{\mathfrak{H}}^2 = a$ par hypothèse, on conclut bien que $\lambda \geq a$. □

Voici un premier exemple très important d'opérateurs auto-adjoints.

Corollaire 15 (Laplacien sur $\mathbb{R}^d$)**.** *L'opérateur* $A = -\Delta$ *défini sur* $D(A) = H^2(\mathbb{R}^d) \subset \mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$ *est auto-adjoint et son spectre est* $\sigma(-\Delta) = [0, +\infty)$.

Démonstration. Il est classique que l'opérateur $-\Delta$ est symétrique sur $H^2(\mathbb{R}^d)$. En effet, on a après une intégration par parties

$$-\int_{\mathbb{R}^d} \overline{g(x)}\,\Delta f(x)\,dx = -\int_{\mathbb{R}^d} \overline{\Delta g(x)}\,f(x)\,dx,$$

pour tous $f, g \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ et l'égalité suit alors dans $H^2(\mathbb{R}^d)$, en utilisant que $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ est dense dans cet espace.

D'après le théorème 10 avec $\lambda = -1 = \overline{\lambda}$, il suffit alors de montrer que pour tout $g \in L^2(\mathbb{R}^d)$ il existe une fonction $f \in H^2(\mathbb{R}^d)$ telle que $(1-\Delta)f = g$. En passant à la transformée de Fourier, on trouve que

$$(1+|k|^2)\widehat{f}(k) = \widehat{g}(k),$$

donc la fonction

$$f = \mathcal{F}^{-1}\left(\frac{\widehat{g}(k)}{1+|k|^2}\right)$$

convient. Elle est bien dans $H^2(\mathbb{R}^d)$ par la caractérisation de cet espace rappelée à l'appendice A, puisque $(1+|k|^2)\widehat{f}(k) = \widehat{g}(k) \in L^2(\mathbb{R}^d)$.

En fait, nous avons choisi $\lambda = -1$ par soucis de simplicité, mais l'argument précédent montre aisément que $(-\Delta - \lambda)$ est inversible d'inverse borné pour tout $\lambda < 0$, donc que $\sigma(A) \subset \mathbb{R}^+$. Montrons maintenant l'inclusion réciproque. Pour tout $k_0 \in \mathbb{R}^d$ et toute fonction $f \in H^2(\mathbb{R}^d)$ normalisée dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, considérons la suite de fonctions

$$f_n(x) = n^{-d/2} f\left(\frac{x}{n}\right) e^{ix\cdot k_0},$$

dont la transformée de Fourier [1] vaut

$$\widehat{f_n}(k) = n^{d/2}\widehat{f}\big(n(k-k_0)\big).$$

Nous avons défini f_n pour que $|\widehat{f_n}|^2 \rightharpoonup \delta_{k_0}$ au sens des mesures. On a alors

$$\begin{aligned}
\big\|(-\Delta - |k_0|^2)f_n\big\|^2_{L^2(\mathbb{R}^d)} &= \int_{\mathbb{R}^d} (|k|^2 - |k_0|^2)^2 |\widehat{f_n}(k)|^2\, dk \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} \left(\left|k_0 + \frac{p}{n}\right|^2 - |k_0|^2\right)^2 |\widehat{f}(p)|^2\, dp \\
&= \frac{1}{n}\int_{\mathbb{R}^d} \left(2p\cdot k_0 + \frac{|p|^2}{n}\right)^2 |\widehat{f}(p)|^2\, dp,
\end{aligned}$$

qui tend vers 0 quand $n \to \infty$ et montre, d'après le théorème 12, que $|k_0|^2$ appartient à $\sigma(-\Delta)$ pour tout $k_0 \in \mathbb{R}^d$. Comme $|k_0|^2$ parcourt tout $\mathbb{R}^+$, nous avons bien démontré que $\sigma(-\Delta) = \mathbb{R}^+$. Le spectre ne contient aucune valeur propre car si on a $(-\Delta - \lambda)f = 0$ pour un $f \in H^2(\mathbb{R}^d)$, alors on déduit de

$$\|(-\Delta - \lambda)f\|^2_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \int_{\mathbb{R}^d} (|k|^2 - \lambda)^2 |\widehat{f}(k)|^2\, dk$$

que la transformée de Fourier $\widehat{f}$ est supportée dans la sphère de rayon $\sqrt{\lambda}$. Comme cette dernière est de mesure nulle, il suit que $f \equiv 0$. □

1. Dans tout le document, nous utilisons la normalisation suivante pour la transformée de Fourier d'une fonction (et par extension d'une distribution) :

$$\widehat{f}(k) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} f(x) e^{-ik\cdot x}\, dx.$$

Exercice 16 (Opérateurs de multiplication)**.** *Soit* $V \in L^1_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$ *et* M_V *l'opérateur défini par* $(M_V f)(x) = V(x)f(x)$ *sur le domaine*

$$D(M_V) = \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}^d) \ : \ Vf \in L^2(\mathbb{R}^d) \right\}.$$

Montrer que $D(M_V)$ *est dense dans* $L^2(\mathbb{R}^d)$*. Montrer ensuite que* M_V *est symétrique si et seulement si* V *est à valeurs réelles et que dans ce cas il est auto-adjoint, de spectre*

$$\sigma(M_V) = \mathrm{Imess}(V).$$

Ici $\mathrm{Imess}(V)$ *est l'image essentielle de la fonction* V *définie presque partout, c'est-à-dire l'ensemble des* $\lambda \in \mathbb{R}$ *tels que* $V^{-1}(]\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon[)$ *soit de mesure non nulle pour tout* $\varepsilon > 0$*. À quelle condition* λ *est-il une valeur propre de* M_V *? Quelle est sa multiplicité ?*

Exercice 17 (Dérivation)**.** *Montrer que l'opérateur* $P = -i(d/dx)$ *est auto-adjoint sur* $H^1(\mathbb{R}) \subset L^2(\mathbb{R})$ *et que* $\sigma(P) = \mathbb{R}$*.*

À ce stade nous avons présenté la définition des opérateurs auto-adjoints en dimension infinie, et nous sommes donc au tout début de la théorie qui consiste à étudier leur spectre. Dans la section suivante nous allons discuter de l'exemple du Laplacien sur un intervalle borné, qui réunit déjà tous les éléments essentiels de ce que nous avons présenté ici. Ensuite, nous nous concentrons sur le cas particulier des opérateurs compacts et à résolvante compacte, avant de considérer le Laplacien sur un domaine borné, en dimension quelconque.

3 L'exemple du Laplacien sur $]0, 1[$

Dans cette section, nous étudions en détail le cas de l'opérateur $A = -d^2/dx^2$ sur $L^2(]0, 1[)$ qui est très instructif et illustre bien les notions introduites à la section précédente. Nous discutons tout particulièrement du choix du domaine $D(A)$ menant à un opérateur auto-adjoint, avec le message principal qu'un tel choix équivaut à des conditions au bord de l'intervalle $]0, 1[$. L'étude du spectre de l'opérateur obtenu sera développée plus tard.

Nous définissons donc l'opérateur A par $(Af)(x) = -f''(x)$, sur un sous-espace $D(A) \subset H^2(]0, 1[)$ dense dans $L^2(]0, 1[)$, à déterminer. Ici $H^2(]0, 1[)$ est l'espace de Sobolev dont la théorie est rappelée à l'appendice A et qui consiste à demander que les fonctions f, f' et f'' sont toutes dans $L^2(]0, 1[)$. L'hypothèse que $D(A)$ est inclus dans l'espace de Sobolev $H^2(]0, 1[)$ sert donc à assurer que Af soit toujours une fonction de $L^2(]0, 1[)$. Rappelons que les fonctions de $H^2(]0, 1[)$ sont toutes continues et dérivables jusqu'au deux points du bord de l'intervalle, d'après le lemme 108. L'application

$$f \in H^2(]0, 1[) \mapsto (f(0), f'(0), f(1), f'(1)) \in \mathbb{C}^4 \tag{7}$$

est donc continue. En fait cette application est même surjective puisqu'on peut toujours trouver une fonction $f \in H^2(]0, 1[)$ (par exemple un polynôme de degré 3) qui a des valeurs imposées au bord, ainsi que sa dérivée.

Une intégration par partie montre que pour toutes fonctions $f, g \in H^2(]0, 1[)$, on a

$$\begin{aligned} -\int_0^1 \overline{g(t)} f''(t)\, dt = &-\int_0^1 \overline{g''(t)} f(t)\, dt \\ &+ \overline{g'(1)} f(1) - \overline{g(1)} f'(1) + \overline{g(0)} f'(0) - \overline{g'(0)} f(0). \end{aligned} \tag{8}$$

Ainsi, A est symétrique sur $D(A)$ si et seulement si on a

$$\overline{g'(1)}f(1) - \overline{g(1)}f'(1) + \overline{g(0)}f'(0) - \overline{g'(0)}f(0) = 0$$

pour toutes les fonctions $f, g \in D(A)$. Cette condition peut encore s'écrire sous forme matricielle

$$\left\langle \begin{pmatrix} g(0) \\ g'(0) \\ g(1) \\ g'(1) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(0) \\ f'(0) \\ f(1) \\ f'(1) \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbb{C}^4} = 0$$

et signifie que $V := \{(f(0), f'(0), f(1), f'(1)) \in \mathbb{C}^4 \ : \ f \in D(A)\}$ est un sous-espace isotrope de la forme quadratique associée à la matrice 4×4

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Rappelons qu'un espace isotrope de M est par définition un sous-espace de $\mathbb{C}^4$ tel que $\langle v, Mv\rangle_{\mathbb{C}^4} = 0$ pour tout $v \in V$ qui, par polarisation, est équivalent à $\langle w, Mv\rangle_{\mathbb{C}^4} = 0$ pour tout $v, w \in V$. Réciproquement, tout sous espace isotrope V fournit un domaine

$$D_V := \left\{ f \in H^2(]0,1[) \ : \ (f(0), f'(0), f(1), f'(1)) \in V \right\}$$

sur lequel l'opérateur A est symétrique. Ainsi, choisir un domaine de symétrie pour A correspond exactement à choisir des conditions qui annulent les termes de bord dans l'intégration par partie, et ceci revient à choisir un sous-espace V dans $\mathbb{C}^4$ qui est isotrope pour la matrice M. Afin de bien distinguer les différents opérateurs symétriques obtenus, nous noterons par A_V l'opérateur $A = -d^2/dx^2$ défini sur le domaine D_V.

Reste maintenant à déterminer les sous-espaces isotropes de M pour lesquels A_V est auto-adjoint. Pour cela, on commence par remarquer que M est inversible. Ainsi, $\langle w, Mv\rangle_{\mathbb{C}^4} = 0$ pour tous $v, w \in V$ signifie que $V \subset (MV)^\perp$. Comme $\dim(MV)^\perp = 4 - \dim(MV) = 4 - \dim(V)$, on conclut que $\dim(V) \leq 2$. Les sous-espaces isotropes sont tous de dimension au plus 2. Par exemple, pour $V = \{0\}$ on trouve les conditions au bord $f(0) = f'(0) = f(1) = f'(1) = 0$ et on a alors $D_V = H_0^2(]0,1[)$, la fermeture de $C_0^\infty(]0,1[)$ pour la norme de H^2. Le tableau 1 recense quelques exemples célèbres de conditions au bord avec V de dimension deux.

Dirichlet	$f(0) = f(1) = 0$	$V = \mathrm{Vect}(e_2, e_4)$
Neumann	$f'(0) = f'(1) = 0$	$V = \mathrm{Vect}(e_1, e_3)$
Périodique	$f(0) = f(1)$ et $f'(0) = f'(1)$	$V = \mathrm{Vect}(e_1 + e_3, e_2 + e_4)$
Robin	$af(0) - bf'(0) = af(1) + bf'(1) = 0$ $(a,b) \in \mathbb{R}^2 \setminus \{(0,0)\}$	$V = \mathrm{Vect}(be_1 + ae_2,$ $be_3 - ae_4)$
Born -von Karman	$f(0) - e^{i\theta}f(1) = f'(0) - e^{i\theta}f'(1) = 0$ $\theta \in [0, 2\pi[$	$V = \mathrm{Vect}(e^{i\theta}e_1 + e_3,$ $e^{i\theta}e_2 + e_4)$

TABLE 1 – Quelques conditions au bord classiques avec V de dimension 2.

Il est clair que le spectre de A_V dépend fortement des conditions au bord choisies. Par exemple 0 est une valeur propre pour les Laplacien de Neumann et périodique (la fonction propre associée est la fonction constante), mais pas pour le Laplacien de Dirichlet (car aucune des fonctions linéaires $f(t) = at + b$ non triviales ne satisfait les conditions de Dirichlet). Le théorème suivant précise que l'on doit choisir exactement deux conditions au bord pour que l'opérateur obtenu soit auto-adjoint.

Théorème 18 (Réalisations auto-adjointes du Laplacien sur $]0,1[$)**.** *L'opérateur A_V défini précédemment est auto-adjoint si et seulement si l'espace isotrope V est de dimension deux. Lorsque* $\dim(V) \in \{0,1\}$*, on a $\sigma(A_V) = \mathbb{C}$.*

Ce résultat confirme l'intuition que D_V doit être choisi assez grand pour que l'égalité soit satisfaite dans (5). Il y a donc une sorte de compétition entre l'hypothèse de symétrie qui nécessite que V ne soit pas trop grand, de sorte que les termes de bord disparaissent dans (8), et l'auto-adjonction qui requiert elle que V soit assez grand. Seuls les espaces isotropes de dimension 2 sont alors admissibles et ce sont les conditions aux bords que nous allons devoir considérer dans la suite. Ce sont les seules pour lesquelles le spectre de A_V est réel, comme en dimension finie.

Quelle condition au bord utiliser ou étudier ? En principe aucune n'est meilleure que les autres et elles ont toutes leurs particularités. Le choix d'une condition est toujours motivé par des considérations pratiques liées au modèle étudié. Par exemple si l'on désire décrire les vibrations d'une corde qui est attachée à ses deux extrémités, on choisira bien sûr la condition de Dirichlet. La condition de Born-von Karman (qui inclut la condition périodique) intervient naturellement lorsqu'on étudie des systèmes périodiques, en lien avec la transformation de Floquet. La condition de Robin intervient elle souvent en électromagnétisme, où elle est parfois appelée condition d'impédance ou condition de Gennes.

Démonstration. Pour simplifier le graphe et le graphe tourné de A_V seront notés

$$G_V = \{(f, Af), f \in D_V\} \quad \text{et} \quad T_V := \{(Af, -f), f \in D_V\}.$$

On a $(g,h) \in (T_V)^\perp \subset L^2(]0,1[)^2$ si et seulement si

$$-\int_0^1 \overline{g(t)} f''(t)\, dt = \int_0^1 \overline{h(t)} f(t)\, dt$$

pour tout $f \in D_V$. En prenant d'abord $f \in C_c^\infty(]0,1[)$, qui est inclus dans tous les D_V, on obtient que $-g'' = h$ au sens des distributions. Comme $g, h \in L^2(]0,1[)$ par hypothèse, on peut conclure, en utilisant le lemme suivant (démontré plus bas) que $g' \in L^\infty(]0,1[) \subset L^2(]0,1[)$ et donc que $g \in H^2(]0,1[)$.

Lemme 19 (Régularité elliptique sur $]0,1[$)**.** *Soit $f \in L^2(]0,1[)$ tel que $f'' \in L^2(]0,1[)$. Alors $f' \in C^0([0,1])$ avec*

$$\max_{[0,1]} |f'| \leq C(\|f\|_{L^2} + \|f''\|_{L^2}) \tag{9}$$

pour une constante C indépendante de f.

Une fois cette information obtenue, on peut utiliser la formule d'intégration par parties (8) qui fournit

$$\overline{g'(1)}f(1) - \overline{g(1)}f'(1) + \overline{g(0)}f'(0) - \overline{g'(0)}f(0) = 0$$

ou, de façon équivalente,

$$\left\langle \begin{pmatrix} g(0) \\ g'(0) \\ g(1) \\ g'(1) \end{pmatrix}, M \begin{pmatrix} f(0) \\ f'(0) \\ f(1) \\ f'(1) \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbb{C}^4} = 0.$$

Comme cette relation est valable pour tout $f \in D_V$ et que, par ailleurs, le vecteur $(f(0), f'(0), f(1), f'(1))$ décrit tout le sous-espace isotrope V par la surjectivité de la restriction au bord (7), on en déduit que nécessairement

$$(g(0), g'(0), g(1), g'(1)) \in (MV)^\perp.$$

De telles fonctions étant évidemment dans $(T_V)^\perp$, on conclut que

$$(T_V)^\perp = \left\{(g, -g'') \ : \ g \in H^2(]0,1[),\ (g(0), g'(0), g(1), g'(1)) \in (MV)^\perp\right\}.$$

Nous voyons ici que $(T_V)^\perp$ est aussi un graphe de A mais sur un domaine différent, faisant intervenir l'espace $(MV)^\perp$ au lieu de V. En particulier, on retrouve bien que le graphe G_V de A_V est inclus dans $(T_V)^\perp$ puisque $V \subset (MV)^\perp$. On a égalité $G_V = G_V^*$ si et seulement si $V = (MV)^\perp$ ce qui, puisque M est inversible, est équivalent à $\dim(V) = 2$.

Il reste à démontrer que le spectre de A_V est tout le plan complexe lorsque V est de dimension 0 ou 1. Nous commençons par le cas plus facile de $V = \{0\}$, pour lequel $(MV)^\perp = \mathbb{C}^4$. Notre argument est basé sur le fait que le trop grand nombre de conditions au bord sur f permet d'utiliser une fonction test g sans aucune condition au bord. Nous choisissons $g(t) = e^{i\overline{a}t}$ avec a un nombre complexe quelconque, une fonction qui est bien sûr dans $H^2(]0,1[)$ et est justement solution de $-g'' = \overline{a}^2 g$ au sens des distributions. Comme $f(0) = f'(0) = f(1) = f'(1) = 0$ pour $f \in D_V$, la formule d'intégration par parties (8) fournit

$$\begin{aligned} \left\langle g, (A_V - a^2)f \right\rangle_{L^2(]0,1[)} &= \int_0^1 \overline{g(t)}\,(-f''(t) - a^2 f(t))\,dt \\ &= \int_0^1 (-\overline{g''(t)} - a^2\overline{g(t)})\,f(t)\,dt = 0. \end{aligned}$$

Ceci étant valable pour tout $f \in D_V$, on a prouvé que g appartient à l'orthogonal de l'image de l'opérateur $(A_V - a^2)$ et donc que ce dernier ne peut être surjectif de D_V dans $L^2(]0,1[)$. D'après la définition 2 du spectre de A_V, on conclut que $a^2 \in \sigma(A_V)$ pour tout $a \in \mathbb{C}$, et donc finalement que $\sigma(A_V) = \mathbb{C}$. Rappelons en passant que les valeurs propres sont toutes réelles car A_V est symétrique. Ainsi le spectre remplit tout $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ sans aucune valeur propre !

Le cas où V est de dimension 1 est exactement similaire, sauf qu'on ne peut pas tester contre n'importe quelle fonction g puisqu'une condition au bord doit être respectée ($(MV)^\perp$ est dans ce cas de dimension 3). Il faut alors utiliser $g(t) = \alpha e^{it\overline{a}} + \beta e^{-it\overline{a}}$ avec des constantes α, β bien choisies. Nous laissons la preuve en exercice. □

Il reste à fournir la

Preuve du lemme 19 de régularité elliptique. On sait que si la dérivée T' d'une distribution T s'identifie à une fonction $T' = g \in L^1(]0,1[)$, alors la distribution T est en fait une fonction continue sur $[0,1]$, qui est simplement égale à

$$T(y) = \int_0^y g(t)\,dt + C$$

pour une certaine constante $C = T(0^+)$. L'hypothèse que $f'' \in L^2(]0,1[) \subset L^1(]0,1[)$ implique que f' est une fonction continue sur $[0,1]$, donc évidemment dans $L^2(]0,1[)$. Du coup, f est une fonction C^1. Pour prouver l'inégalité (9), nous pouvons par exemple partir de la relation

$$f'(y) = \int_0^y f''(t)\,dt + f'(0),$$

et intégrer contre $y(1-y)$, ce qui fournit

$$\int_0^1 y(1-y)\left(\int_0^y f''(t)\,dt\right)dy + \frac{f'(0)}{6} = \int_0^1 y(1-y)f'(y) = -\int_0^1 (1-2y)f(y)\,dy.$$

En intégrant à nouveau par parties le terme de gauche, ceci peut se réécrire

$$f'(0) = -6\int_0^1 (1-2y)f(y)\,dy + \int_0^1 \left(3y^2 - 2y^3 - 1\right) f''(y)\,dy.$$

Nous avons donc obtenu la formule

$$f'(y) = \int_0^y f''(t)\,dt - 6\int_0^1 (1-2y)f(y)\,dy + \int_0^1 \left(3y^2 - 2y^3 - 1\right) f''(y)\,dy$$

à partir de laquelle l'inégalité de Cauchy-Schwarz fournit

$$\|f'\|_{L^\infty(]0,1[)} \leq 2\|f''\|_{L^1(]0,1[)} + 6\|f\|_{L^1(]0,1[)} \leq 2\|f''\|_{L^2(]0,1[)} + 6\|f\|_{L^2(]0,1[)}$$

comme nous voulions. □

Exercice 20. *Écrire la preuve que $\sigma(A_V) = \mathbb{C}$ lorsque V est de dimension 1.*

Exercice 21. *Montrer que pour les Laplaciens de Dirichlet, de Neumann et périodique, on a*

$$\langle f, A_V f\rangle_{L^2(\Omega)} = \int_0^1 |f'(t)|^2\,dt$$

pour tout $f \in D(A_V)$. En déduire du Corollaire 14 que $\sigma(-\Delta_V) \subset [0,+\infty[$. Que dire du Laplacien de Robin ?

Exercice 22 (Dérivation sur $]0,1[$)**.** *En s'inspirant des arguments de cette section, étudier l'opérateur $P = -i(d/dx)$ sur l'intervalle $]0,1[$. On montrera en particulier que les seuls sous-espaces de $H^1(]0,1[)$ sur lesquels P est symétrique et fermé sont*

$$H_0^1(]0,1[) = \left\{f \in H^1(]0,1[) \ : \ f(0) = f(1) = 0\right\}$$

et

$$D_\theta = \left\{ f \in H^1(]0,1[) \ : \ f(0) = e^{i\theta} f(1) \right\}$$

qui est la condition de Born-von Karman. On montrera ensuite que P n'est auto-adjoint que sur D_θ et que son spectre est tout $\mathbb{C}$ sur $H^1_0(]0,1[)$. Ainsi, une seule condition au bord doit être imposée pour l'opérateur de dérivation sur $]0,1[$.

Exercice 23 (Laplacien sur $\mathbb{R}^+$)**.** *Déterminer les sous-espaces de $H^2(]0,+\infty[)$ sur lesquels le Laplacien est symétrique et fermé, puis ceux sur lesquels il est auto-adjoint.*

Exercice 24 (Dérivation sur $\mathbb{R}^+$)**.** *Montrer que l'opérateur $P = -i(\mathrm{d}/\mathrm{d}x)$ n'admet aucune réalisation auto-adjointe sur $]0,+\infty[$, c'est-à-dire qu'il n'existe aucun sous-espace de $H^1(\mathbb{R}^+)$ sur lequel il est auto-adjoint. Plus précisément, montrer qu'il n'est symétrique que sur $H^1_0(\mathbb{R}^+)$, mais que son spectre est égal à $\mathbb{C}$ sur cet espace.*

4 Laplaciens périodique et de Born-von Karman

Nous allons maintenant étudier le Laplacien dans un domaine borné $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ quelconque et commençons avec le cas où Ω est la cellule unité d'un réseau périodique.

Soit donc

$$\mathscr{L} := \mathbb{Z}a_1 + \cdots + \mathbb{Z}a_d$$

un sous-groupe discret de $\mathbb{R}^d$, où les a_i forment une famille libre quelconque de $\mathbb{R}^d$. On appelle cellule unité l'ensemble

$$\Omega = \left\{ x_1 a_1 + \cdots x_d a_d, \ x_1, ..., x_d \in]0,1[\right\},$$

qui est l'intérieur d'un polyèdre dont la forme dépend des vecteurs de base a_i. Dans le cas le plus simple où les a_i sont des multiples de la base canonique, on trouve un parallépipède.

Nous commençons par étudier le Laplacien avec conditions au bord périodique et verrons plus tard comment traiter la condition de Born-von Karman, qui est très similaire. Les conditions périodiques sont juste celles qui sont obtenues lorsqu'on restreint une fonction $\mathscr{L}$-périodique $f \in H^2_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^d)$ à la cellule unité Ω. Les fonctions périodiques sur $\mathbb{R}^d$ satisfont par définition la relation

$$f(x+\ell) = f(x), \qquad \forall x \in \mathbb{R}^d, \quad \forall \ell \in \mathscr{L},$$

ce qui implique en particulier que

$$\nabla f(x+\ell) = \nabla f(x), \qquad \forall x \in \mathbb{R}^d, \quad \forall \ell \in \mathscr{L}.$$

La seule façon pour que x et $x+\ell$ soient tous les deux dans $\overline{\Omega}$ est qu'ils soient tous les deux sur le bord, sur deux faces opposées. Ainsi, nous sommes amenés à étudier le Laplacien défini sur le domaine

$$D(-\Delta_{\mathrm{per}}) = \Big\{ f \in H^2(\Omega) \text{ tels que } f(x+\ell) = f(x) \text{ et}$$
$$(\partial_n f)(x+\ell) = -(\partial_n f)(x), \text{ pour tous } (x,\ell) \in \partial\Omega \times \mathscr{L} \text{ avec } x+\ell \in \partial\Omega \Big\}, \tag{10}$$

que nous notons $-\Delta_{\text{per}}$. Le signe moins dans la condition sur les dérivées normales vient de l'orientation du vecteur normal au bord, qui est toujours sortant par définition.

Dans l'Appendice A nous rappelons la définition de la trace d'une fonction $f \in H^2(\Omega)$ et de sa dérivée normale sur le bord. Ici Ω est l'intérieur un polyèdre et il n'est donc pas lisse. Cependant $\partial\Omega$ est l'union de faces qui sont plates (donc lisses), et la restriction à chacune de ces faces F_i est donc bien définie, avec $f_{|F_i} \in H^{3/2}(F_i)$ et $\partial_n f_{|F_i} \in H^{1/2}(F_i)$. Il y a également des conditions de compatibilité supplémentaires sur les arêtes mais nous n'en avons pas besoin pour définir correctement le domaine (10), puisque la condition ne fait intervenir que les faces opposées. Dans tous les cas, la continuité de l'application de trace sur le bord implique que $D(-\Delta_{\text{per}})$ est un sous-espace fermé de $H^2(\Omega)$ (mais pas de $L^2(\Omega)$).

Par exemple, en dimension 2 dans le cas d'un carré, la condition signifie plus précisément que

$$\begin{cases} f(1/2,y) = f(-1/2,y), \quad \partial_x f(1/2,y) = \partial_x f(-1/2,y), \\ f(x,1/2) = f(x,-1/2), \quad \partial_y f(x,1/2) = \partial_y f(x,-1/2), \end{cases}$$

pour tous $-1/2 < x, y < 1/2$. En dimension 3, on doit comparer les valeurs de la fonction et de sa dérivée normale sur les trois paires de faces qui sont en vis-à-vis (Figure 2).

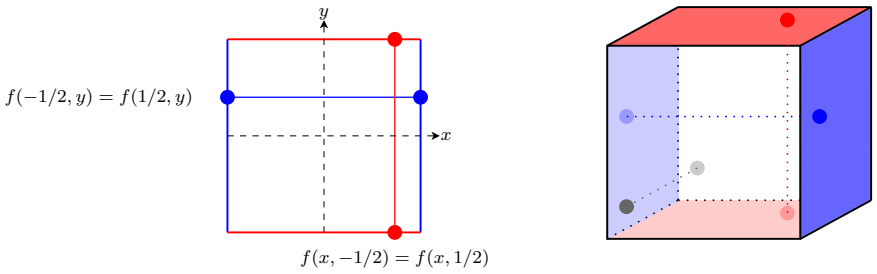


FIGURE 2 – Conditions périodiques en dimensions 2 et 3.

Exercice 25. *Montrer que $D(-\Delta_{per})$ est juste la fermeture pour la norme $H^2(\Omega)$ de l'ensemble des restrictions à Ω des fonctions $f \in C^2(\mathbb{R}^d)$ telles que $x \mapsto f(x)$ est $\mathscr{L}$-périodique.*

Théorème 26 (Laplacien périodique)**.** *L'opérateur $-\Delta_{per}$ est auto-adjoint sur $D(-\Delta_{per})$ et son spectre est*

$$\sigma(-\Delta_{per}) = \left\{|k|^2,\ k \in \mathscr{L}^*\right\},$$

avec les fonctions propres $\left(e^{ik\cdot x}\right)_{k\in\mathscr{L}^*}$, où $\mathscr{L}^*$ est le réseau dual *de $\mathscr{L}$, défini par*

$$\mathscr{L}^* := \left\{k \in \mathbb{R}^d \text{ tel que } k\cdot\ell \in 2\pi\mathbb{Z} \text{ pour tout } \ell \in \mathscr{L}\right\}. \tag{11}$$

Démonstration. Il faut commencer par vérifier que l'opérateur ainsi défini est symétrique sur $D(-\Delta_{\text{per}})$. Pour cela, on utilise la formule de Green

$$-\int_\Omega \overline{g}\Delta f = -\int_\Omega \overline{\Delta g} f + \int_{\partial\Omega} \left(\overline{g}\partial_n f - f\overline{\partial_n g}\right), \tag{12}$$

qui est valable pour toutes fonctions $f, g \in H^2(\Omega)$. Il faut alors vérifier que les termes de bord s'annulent lorsque $f, g \in D(-\Delta_{\rm per})$, ce qui se fait en décomposant $\partial\Omega$ en l'union de ses faces et en utilisant la condition de périodicité au bord pour deux faces opposées.

Pour montrer l'auto-adjonction, nous allons utiliser une preuve très similaire à celle vue au corollaire 15 dans le cas de tout $\mathbb{R}^d$, en remplaçant la transformée de Fourier par les séries de Fourier. Rappelons que les fonctions

$$e_k(x) := \left\{ \frac{e^{ik\cdot x}}{|\Omega|^{1/2}} \right\}_{k\in\mathscr{L}^*}$$

forment une base orthonormée de $L^2(\Omega)$. La condition $k \in \mathscr{L}^*$ sert à ce que la fonction e_k soit $\mathscr{L}$-périodique, puisque

$$e_k(x+\ell) = \frac{e^{ik\cdot(x+\ell)}}{|\Omega|^{1/2}} = e^{ik\cdot\ell} e_k(x) = e_k(x)$$

dès lors que $k\cdot\ell \in 2\pi\mathbb{Z}$. En particulier, les fonctions e_k vérifient la condition de périodicité au bord et on a $e_k \in D(-\Delta_{\rm per})$ pour tout $k \in \mathscr{L}^*$. En fait on a

$$-\Delta e_k = |k|^2 e_k$$

ce qui montre déjà immédiatement que $\{|k|^2,\ k \in \mathscr{L}^*\} \subset \sigma(-\Delta)_{\rm per}$. Toute fonction $f \in L^2(\Omega)$ se décompose sur la base de Fourier sous la forme

$$f = \sum_{k\in\mathscr{L}^*} c_k(f)\, e_k,$$

où la somme est convergente dans $L^2(\Omega)$, avec le coefficient de Fourier

$$c_k(f) := \frac{1}{|\Omega|^{1/2}} \int_\Omega f(x) e^{-ik\cdot x}\, dx.$$

Remarquons que si $f \in H^2(\Omega)$ vérifie les conditions de périodicité au bord (c'est-à-dire pour $f \in D(-\Delta_{\rm per})$), on a par la symétrie de $-\Delta_{\rm per}$ sur $D(-\Delta_{\rm per})$

$$c_k(-\Delta f) = \langle e_k, -\Delta f\rangle = \langle -\Delta e_k, f\rangle = |k|^2 c_k(f).$$

Cette relation très utile est fausse en général, il est très important que f satisfasse les conditions de périodicité au bord.

Nous pouvons maintenant montrer l'auto-adjonction en utilisant le théorème 10. Nous montrons que $1-\Delta_{\rm per}$ est surjectif, ce qui signifie que pour tout $g \in L^2(\Omega)$ nous devons trouver $f \in D(-\Delta_{\rm per})$ telle que

$$(1-\Delta) f = g.$$

Les coefficients de Fourier de f doivent vérifier la relation $(1+|k|^2)c_k(f) = c_k(g)$, ce qui conduit à définir

$$f := \sum_{k\in\mathscr{L}^*} \frac{c_k(g)}{1+|k|^2} e_k.$$

Comme les (e_k) forment une base orthonormée dans $L^2(\Omega)$, qui est également orthogonale dans $H^2(\Omega)$, nous voyons que cette somme converge absolument

dans $H^2(\Omega)$. Par ailleurs, comme tous les e_k sont dans $D(-\Delta_{\rm per})$ et que cet espace est fermé dans $H^2(\Omega)$, on conclut bien que $f \in D(-\Delta_{\rm per})$. Par construction on a alors $(1-\Delta)f = g$, ce qui montre bien que le Laplacien est auto-adjoint sur $D(-\Delta_{\rm per})$.

L'ensemble des $|k|^2$ avec $k \in \mathscr{L}^*$ est discret et son complémentaire est donc ouvert. Ainsi, si λ n'est pas de la forme $|k|^2$, on a $|\lambda - |k|^2| \geq \varepsilon$ pour un certain $\varepsilon > 0$ et tout $k \in \mathscr{L}^*$. Il est alors facile de montrer que $-\Delta_{\rm per} - \lambda$ est inversible d'inverse borné, donné par

$$(-\Delta_{\rm per} - \lambda)^{-1} f = \sum_{k \in \mathscr{L}^*} \frac{c_k(f)}{|k|^2 - \lambda} e_k.$$

Ceci termine la preuve que $\sigma(-\Delta_{\rm per})$ est exactement l'ensemble des $|k|^2$ avec $k \in \mathscr{L}^*$. □

La condition périodique au bord signifie qu'on doit identifier les faces en vis-à-vis et recourber Ω qui devient alors semblable au tore de dimension d, lequel n'a alors plus de bord du tout. L'opérateur $-\Delta_{\rm per}$ s'identifie alors à l'opérateur de Laplace-Beltrami sur le tore. En ce sens, il n'y a pas vraiment de condition au bord périodique puisqu'il n'y a pas de bord...

Nous allons maintenant étudier rapidement la condition au bord de Born-von Karman, qui revient elle à ajouter un champ magnétique sur le tore, comme nous le verrons plus loin. Comme en dimension 1, la condition de Born-von Karman s'écrit

$$f(x + \ell) = f(x) e^{i\xi \cdot \ell},$$

où ξ est un vecteur quelconque de la cellule unité $\overline{\Omega^*}$ fermée du réseau dual $\mathscr{L}^*$. Évidemment, si ξ est en dehors de la cellule unité on peut s'y ramener en ajoutant $k \in \mathscr{L}^*$ à ξ, ce qui ne change pas le facteur $e^{i\xi\cdot\ell}$. Dire qu'une fonction f vérifie la condition de Born-von Karman est exactement équivalent à dire que $x \mapsto f(x)e^{-i\xi\cdot x}$ est $\mathscr{L}$–périodique. Ainsi, l'étude est exactement la même que précédemment. Par exemple, il est utile de choisir comme base de Fourier la famille

$$e_{\xi,k}(x) := \left\{ \frac{e^{i(k+\xi)\cdot x}}{|\Omega|^{1/2}} \right\}_{k \in \mathscr{L}^*}.$$

Le résultat se démontre alors exactement comme dans le cas périodique.

Théorème 27 (Laplacien de Born-von Karman)**.** *Soit ξ dans la cellule unité fermée $\overline{\Omega^*}$ du réseau dual $\mathscr{L}^*$. L'opérateur $-\Delta_{{\rm BK},\xi}$ défini par $-\Delta_{{\rm BK},\xi} f = -\Delta f$ sur le domaine*

$$D(-\Delta_{{\rm BK},\xi}) = \Big\{ f \in H^2(\Omega) \text{ tels que } f(x+\ell) = f(x)e^{i\xi\cdot\ell},$$
$$(\partial_n f)(x+\ell) = -(\partial_n f)(x) e^{i\xi\cdot\ell}, \text{ pour tous } (x,\ell) \in \partial\Omega \times \mathscr{L} \text{ avec } x + \ell \in \partial\Omega \Big\}. \tag{13}$$

est auto-adjoint et son spectre est

$$\sigma(-\Delta_{{\rm BK},\xi}) = \left\{ |k+\xi|^2,\ k \in \mathscr{L}^* \right\}$$

avec les fonctions propres $\left(e^{i(k+\xi)\cdot x}\right)_{k\in\mathscr{L}^*}$.

5 Laplaciens de Dirichet, Neumann et Robin : auto-adjonction

L'étude exhaustive de toutes les conditions au bord en dimension 1 peut être généralisée à un domaine Ω en dimension quelconque. Toutefois, la situation est bien plus complexe. En dimension 1 où le bord est constitué de deux points, on est ramené à l'étude des sous-espaces isotropes d'une matrice finie (de taille 4×4). En dimension supérieure le bord est un ensemble infini de points et on peut *a priori* prendre des conditions différentes sur des sous-ensembles de $\partial\Omega$. Il y a donc beaucoup plus de conditions possibles ! Par ailleurs la régularité du bord joue également un rôle.

Nous avons déjà discuté du Laplacien périodique et du Laplacien de Born-von Karman à la section précédente. Dans cette section, nous allons étudier le Laplacien avec une condition de Robin uniforme sur toute la frontière

$$\cos(\pi\theta)\, f(x) + \sin(\pi\theta)\, \partial_n f(x) = 0, \qquad \forall x \in \partial\Omega, \tag{14}$$

où $\theta \in [0, 1)$. Cette famille contient les deux exemples les plus courants, qui sont les conditions au bord de Dirichlet ($\theta = 0$) et de Neumann ($\theta = 1/2$). Le caractère "uniforme" se lit dans le fait que θ est constant. En pratique il est parfois utile de considérer un $\theta(x)$ variable, ce que nous ne ferons pas ici.

Soit donc un ouvert $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, que l'on suppose "régulier". Plus précisément, nous supposons que la frontière $\partial\Omega$ forme une sous-variété de co-dimension 1 qui est de classe $C^{1,1}$, ou qui est l'union de plusieurs telles surfaces régulières (comme un cube est l'union de ses faces par exemple), auquel cas on suppose de plus que Ω est strictement convexe au voisinage des singularités de $\partial\Omega$. La régularité du bord est nécessaire à plusieurs égards. Nous aurons précisément besoin

(i) que l'application de restriction au bord $f \in H^1(\Omega) \mapsto f_{|\partial\Omega} \in L^2(\partial\Omega)$ soit bien définie et continue, avec une estimée sous la forme

$$\left\| f_{|\partial\Omega} \right\|^2_{L^2(\partial\Omega)} \leq C_\Omega \left\| f \right\|_{L^2(\Omega)} \left\| f \right\|_{H^1(\Omega)} \tag{15}$$

(théorème 110 de l'appendice A) ;

(ii) que l'image de l'application $f \in H^2(\Omega) \mapsto (f_{|\partial\Omega}, \partial_n f_{|\partial\Omega})$ contienne $C_c^m(U)^2$ pour un $m \geq 0$ (dépendant de la régularité de Ω) et un ouvert $U \subset \partial\Omega$ dense dans $\partial\Omega$ (théorème 111 de l'appendice A) .

La seconde condition signifie que toute donnée assez régulière sur le bord (à support dans un sous-ensemble U strict dans $\partial\Omega$, par exemple en dehors des arêtes s'il y en a) peut toujours être étendue en une fonction sur Ω, appartenant à $H^2(\Omega)$. En particulier, l'image de la restriction au bord est dense dans $L^2(\partial\Omega)$.

Sous ces hypothèses, la formule de Green généralise l'intégration par parties

$$\int_\Omega g\, \partial_{x_i} f = -\int_\Omega f \partial_{x_i} g + \int_{\partial\Omega} f g n_i, \qquad \forall f, g \in H^1(\Omega), \tag{16}$$

et fournit

$$\int_\Omega \overline{g}\, (-\Delta f) = \int_\Omega f(-\Delta\overline{g}) + \int_{\partial\Omega} f\overline{\partial_n g} - \int_{\partial\Omega} \overline{g}\partial_n f, \qquad \forall f, g \in H^2(\Omega). \tag{17}$$

On considère donc l'opérateur $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$ défini par $-\Delta_{\mathrm{R},\theta} f = -\Delta f$ pour f dans le domaine

$$D(-\Delta_{\mathrm{R},\theta}) = \{ f \in H^2(\Omega) \ : \ \cos(\pi\theta)\, f_{|\partial\Omega} + \sin(\pi\theta)\, \partial_n f_{|\partial\Omega} = 0 \}.$$

Notons que $D(-\Delta_{\mathrm{R},\theta})$ est non vide et dense dans $L^2(\Omega)$, puisqu'il contient $C_c^\infty(\Omega)$. La formule de Green (17) implique immédiatement que $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$ est symétrique sur $D(-\Delta_{\mathrm{R},\theta})$.

Arrêtons-nous sur la condition que $f \in H^2(\Omega)$ dans la définition de $D(-\Delta_{\mathrm{R},\theta})$. Cette hypothèse, en apparence anodine, doit être discutée plus en détails. En principe, on cherche le domaine de $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$ dans l'ensemble des fonctions $f \in L^2(\Omega)$ telles que $\Delta f \in L^2(\Omega)$. Il faut également donner un sens à la condition au bord (14), qui rendra l'opérateur symétrique. Il se trouve que tout $f \in L^2(\Omega)$ tel que $\Delta f \in L^2(\Omega)$ a des restrictions au bord bien définies, mais qui sont des distributions. Par exemple, si Ω est suffisamment lisse, alors $f_{|\partial\Omega}$ appartient à l'espace $H^{-1/2}(\partial\Omega)$ qui est par définition le dual de $H^{1/2}(\partial\Omega)$ (l'image de l'application de restriction au bord). De même, $\partial_n f_{|\partial\Omega}$ appartient à l'espace $H^{-3/2}(\partial\Omega)$. Ces assertions peuvent être démontrées en se basant sur la formule de Green (17) qui, du coup, fait sens dans ces espaces

$$\begin{aligned}\int_\Omega g\,(-\Delta\overline{f}) - \int_\Omega \overline{f}(-\Delta g) \\ = {}_{H^{-1/2}(\partial\Omega)}\langle f, \partial_n g\rangle_{H^{1/2}(\partial\Omega)} \;-\; {}_{H^{-3/2}(\partial\Omega)}\langle \partial_n f, g\rangle_{H^{3/2}(\partial\Omega)}, \\ \forall g \in H^2(\Omega),\ \forall f \in L^2(\Omega) \text{ tel que } \Delta f \in L^2(\Omega), \quad (18)\end{aligned}$$

voir [18]. Du coup, nous voyons que la condition de Robin (14) fait bien sens pour toute fonction $f \in L^2(\Omega)$ telle que $\Delta f \in L^2(\Omega)$, mais c'est une égalité entre distributions sur le bord. Mentionnons que la situation est encore plus complexe lorsque la frontière de Ω est composée d'une union de surfaces lisses, qui s'intersectent transversalement. Les propriétés sont les mêmes sur chacune des surfaces en question, mais il y a en plus des conditions de compatibilité sur les arêtes [18, 11]. Les distributions sont par contre complètement déterminées par leur restriction à chaque face, elles ne peuvent pas vivre uniquement sur les arêtes.

Le théorème suivant justifie alors notre choix de l'espace $H^2(\Omega)$.

Théorème 28 (Régularité elliptique)**.** *Soit Ω un ouvert borné tel que*

- soit $\partial\Omega$ *forme une variété de co-dimension 1 de classe C^2 ;*
- soit $\partial\Omega$ *est l'union d'un nombre fini de telles hypersurfaces, et Ω est* strictement convexe *au voisinage des divers singularités du bord.*

Soit également $0 \leq \theta < 1$. Alors, il existe une constante $C(\Omega,\theta)$ (ne dépendant que de Ω et de θ) telle que pour toute fonction $f \in H^2(\Omega)$ satisfaisant

$$\cos(\pi\theta)\, f_{|\partial\Omega} + \sin(\pi\theta)\, \partial_n f_{|\partial\Omega} = 0, \tag{19}$$

on a l'estimée

$$\|f\|_{H^2(\Omega)} \leq C(\Omega,\theta)\Big(\,\|f\|_{L^2(\Omega)} + \|\Delta f\|_{L^2(\Omega)}\,\Big). \tag{20}$$

Par ailleurs, si $f \in L^2(\Omega)$ est telle que $\Delta f \in L^2(\Omega)$ et satisfait la condition de Robin (19) *au sens des distributions sur $\partial\Omega$, alors $f \in H^2(\Omega)$ et satisfait l'inégalité* (20)*.*

Ce théorème précise que l'information que $f, \Delta f \in L^2(\Omega)$, alliée à la condition au bord au sens des distributions, suffit à assurer que $f \in H^2(\Omega)$, c'est-à-dire à contrôler toutes les autres dérivées $\partial_{x_i} f$ et $\partial_{x_i}\partial_{x_j} f$ avec $i \neq j$. En dimension 1, les conditions au bord ne sont pas utiles (lemme 19 vu précédemment) et

elles ne deviennent indispensables qu'en dimension supérieure. De telles conditions sont vraiment nécessaires si $d \geq 2$. Considérons par exemple la fonction $f(x) = |x - x_0|^{-1}$ qui résout l'équation

$$-\Delta f = 4\pi\delta_{x_0}$$

au sens des distributions dans $\mathbb{R}^3$. Soit alors un ouvert borné $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ et x_0 un point quelconque de sa frontière. On a évidement $\Delta f = 0$ dans $\mathcal{D}'(\Omega)$ et $f \in L^2(\Omega)$ car la fonction $x \mapsto |x - x_0|^{-1}$ est de carré intégrable en dimension 3 et Ω est borné (l'écrire). Pourtant, on ne peut pas avoir $f \in H^2(\Omega)$ car ceci impliquerait que $f \in C^0(\overline{\Omega})$ qui est clairement faux. En fait on peut voir que $f \notin H^1(\Omega)$. Un argument du même type peut être utilisé en toute dimension.

Exercice 29. *Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ vérifiant les hypothèses du théorème 28. Vérifier que si $x_0 \in \partial\Omega$ la fonction $f(x) = |x - x_0|^{-1}$ est bien dans $L^2(\Omega)$ et vérifie dans $\mathcal{D}'(\Omega)$ l'équation $-\Delta f = 0$, mais qu'elle n'appartient pas à $H^1(\Omega)$. Généraliser l'argument à toutes les dimensions $d \geq 2$.*

La preuve du théorème 28 est longue et technique. Elle est généralement divisée en deux étapes, la première consistant à obtenir des estimées sur les dérivées à l'intérieur de Ω (la condition au bord ne joue alors aucun rôle), et la seconde, plus difficile, dédiée à la régularité à la frontière. Dans la plupart des ouvrages sur le sujet, la seconde partie du théorème est par ailleurs énoncée pour la condition de Dirichlet, avec l'hypothèse supplémentaire que $f \in H^1_0(\Omega)$ (voir par exemple [2, Thm. IX.25]). La preuve complète du théorème 28 peut être trouvée dans [18].

Nous avons supposé que Ω est borné pour simplifier, mais le résultat reste vrai lorsque Ω n'est pas borné, à condition que la frontière vérifie des estimées uniformes à l'infini. Par ailleurs, insistons sur la nouvelle hypothèse que Ω est strictement convexe au voisinage des singularités du bord. Cette condition est nécessaire pour que le Laplacien soit défini dans $H^2(\Omega)$, comme nous le discuterons plus bas à la section 11. Si Ω n'est pas strictement convexe au voisinage des coins de Ω, il est encore possible de définir l'opérateur $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$ en utilisant la méthode de Friedrichs évoquée au Théorème 52 ci-dessous, mais nous n'en parlerons pas ici.

Le théorème 28 implique donc que, sous les hypothèses mentionnées, le domaine du Laplacien de Robin doit être inclus dans $H^2(\Omega)$. Le résultat suivant précise que c'est le bon espace.

Théorème 30 (Laplacien de Robin)**.** *L'opérateur $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$ défini précédemment est auto-adjoint. Si $0 \leq \theta \leq 1/2$, son spectre est inclus dans $[0, +\infty[$. Il est minoré si $1/2 < \theta < 1$.*

Le théorème 30 est en fait équivalent au théorème 28, mais nous allons seulement le déduire de ce dernier. Nous étudierons le comportement des valeurs propres de $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$ en fonction de θ plus précisément au théorème 66.

Preuve du théorème 30. La preuve est exactement similaire à celle du théorème 18, la difficulté principale étant maintenant le théorème de régularité elliptique (théorème 28 que nous admettons ici). Comme les opérateurs sont symétriques par construction, il suffit de montrer l'inclusion $\supset$ dans (5). Soit donc $(f, g) \in$

$L^2(\Omega)^2$ dans l'orthogonal du graphe tourné $\{(-\Delta_\theta h, -h)\}$, c'est-à-dire tel que

$$\int_\Omega \overline{f(x)}(-\Delta h)(x)\,dx = \int_\Omega \overline{g(x)}h(x)\,dx,$$

pour tout h dans $D(-\Delta_{\mathrm{R},\theta})$. En prenant $h \in C_c^\infty(\Omega)$, nous en déduisons que $-\Delta f = g$ au sens des distributions et donc, en particulier, que $\Delta f \in L^2(\Omega)$. La formule de Green (18) implique alors que

$${}_{H^{-1/2}(\partial\Omega)}\langle f, \partial_n h\rangle_{H^{1/2}(\partial\Omega)} = {}_{H^{-3/2}(\partial\Omega)}\langle \partial_n f, h\rangle_{H^{3/2}(\partial\Omega)}$$

pour tout $h \in D(-\Delta_{\mathrm{R},\theta})$. Cette formule fait sens si le domaine est lisse. S'il y a des arêtes, on peut se restreindre aux fonctions $h \in D(-\Delta_{\mathrm{R},\theta})$ telles que la restriction au bord a son support en dehors des arêtes, et obtenir une formule similaire avec une somme sur les arêtes. Nous supposerons pour simplifier que Ω est lisse dans la suite de l'argument, et laissons le cas plus général en exercice. Si $\theta = 0$, on a $h_{|\partial\Omega} = 0$ et $\partial_n h$ peut prendre n'importe quelle valeur dans $H^{1/2}(\Omega)$ (d'après l'hypothèse (ii) plus haut), ce qui implique que $f_{|\partial\Omega} = 0$, dans $H^{-1/2}(\partial\Omega)$. Dans ce cas, le théorème 28 fournit que $f \in H^2(\Omega)$, c'est-à-dire que $f \in D(-\Delta_{\mathrm{R},0})$, ce qui montre bien que (f, g) est dans le graphe de $-\Delta_{\mathrm{R},0}$. L'argument est exactement similaire pour $\theta > 0$, en utilisant que $\partial_n h_{|\partial\Omega} = -\tan(\pi\theta) h_{|\partial\Omega}$.

Montrons finalement que le spectre de $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$ est minoré. La formule de Green fournit

$$-\int_\Omega \overline{f}\,\Delta f = \int_\Omega |\nabla f|^2 - \int_{\partial\Omega} \overline{f}\partial_n f = \int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta)}\int_{\partial\Omega} |f|^2, \qquad (21)$$

avec la convention que $1/\tan(0) = 0$. Cette expression est positive tant que $0 \le \theta \le 1/2$ et le corollaire 14 implique alors que $\sigma(-\Delta_{\mathrm{R},\theta}) \subset [0, +\infty[$. Lorsque $1/2 < \theta < 1$, on doit utiliser l'inégalité (15) qui précise que

$$\int_{\partial\Omega} |f|^2 \le C\,\|f\|_{L^2(\Omega)}\,\|f\|_{H^1(\Omega)}\,. \qquad (22)$$

Ainsi, en ajoutant la contrainte que $\|f\|_{L^2(\Omega)} = 1$ on trouve

$$\begin{aligned}\int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta)}\int_{\partial\Omega} |f|^2 &\ge \int_\Omega |\nabla f|^2 - \frac{C}{|\tan(\pi\theta)|}\,\|f\|_{H^1(\Omega)} \\ &\ge \int_\Omega |\nabla f|^2 - \frac{C}{|\tan(\pi\theta)|}\left(1 + \|\nabla f\|_{L^2(\Omega)}\right) \\ &\ge -\frac{C}{|\tan(\pi\theta)|} - \frac{C^2}{4|\tan(\pi\theta)|^2}.\end{aligned}$$

puisque

$$\begin{aligned}\|\nabla f\|_{L^2(\Omega)}^2 - \frac{C}{|\tan(\pi\theta)|}\,\|\nabla f\|_{L^2(\Omega)} &= \left(\|\nabla f\|_{L^2(\Omega)} - \frac{C}{2|\tan(\pi\theta)|}\right)^2 - \frac{C^2}{4|\tan(\pi\theta)|^2} \\ &\ge -\frac{C^2}{4|\tan(\pi\theta)|^2}.\end{aligned}$$

Ainsi

$$\inf_{\substack{f\in D(-\Delta_{\mathrm{R},\theta})\\ \|f\|_{L^2(\Omega)}=1}}\left(-\int_\Omega \overline{f}\,\Delta f\right)\geq -\frac{C}{|\tan(\pi\theta)|}-\frac{C^2}{4|\tan(\pi\theta)|^2}, \tag{23}$$

qui implique que le spectre est minoré, par le corollaire 14. □

Remarque 31. *Le lecteur aura remarqué que la borne inférieure de* (23) *diverge si* $\theta\to 1^-$. *Si* Ω *est borné il est possible de montrer que le bas du spectre se comporte précisément comme* $-C_\Omega(1-\theta)^{-2}$ *lorsque* $\theta\to 1^-$, *où* C_Ω *est une constante ne dépendant que de la géométrie de* Ω, *voir par exemple [15, 16, 12].*

Exercice 32. *Montrer que le théorème 28 suit du théorème 30.*

6 Diagonalisation dans une base orthonormée

Après avoir discuté le cas du Laplacien sur un domaine Ω, nous allons retourner provisoirement vers des résultats plus abstraits, dans le but de diagonaliser le Laplacien de Robin sur un domaine borné à la section suivante.

6.1 Diagonalisation dans une base orthonormée

Nous allons maintenant nous restreindre à une classe particulièrement importante d'opérateurs auto-adjoints, ceux qui n'ont que des valeurs propres ou, plus précisément, dont les valeurs propres sont denses dans le spectre et qui peuvent être diagonalisés dans une base orthonormée.

Définition 33 (Diagonalisation dans une base orthonormée)**.** *On dit qu'un opérateur auto-adjoint* A *défini sur* $D(A)\subset\mathfrak{H}$ *est* diagonalisable dans une base orthonormée *s'il existe une base orthonormée* (v_n) *de* $\mathfrak{H}$ *qui sont tous des vecteurs propres de* A, *c'est-à-dire vérifiant* $v_n\in D(A)$ *et* $Av_n=\lambda_n v_n$.

Les opérateurs auto-adjoints ne sont pas tous diagonalisables dans une base orthonormée, car cette propriété implique nécessairement que les valeurs propres sont denses dans $\sigma(A)$, comme nous allons le voir dans le prochain énoncé. Nous avons vu au corollaire 15 le cas du Laplacien sur $\mathbb{R}^d$ dont le spectre ne contient *aucune* valeur propre. La diagonalisation des opérateurs auto-adjoints quelconques est plus subtile et nous ne la discuterons pas ici.

Théorème 34 (Spectre des opérateurs diagonalisables dans une base orthonormée)**.** *Soit* A *un opérateur auto-adjoint défini sur* $D(A)\subset\mathfrak{H}$ *et qui peut être diagonalisé dans une base orthonormée* $(v_n)\subset D(A)$ *avec* $Av_n=\lambda_n v_n$. *Alors*

$$D(A)=\left\{v\in\mathfrak{H}\ \textit{tels que}\ \sum_{n\geq 1}(\lambda_n)^2|\langle v_n,v\rangle_{\mathfrak{H}}|^2<\infty\right\} \tag{24}$$

et, pour tout $v\in D(A)$, *on a*

$$Av=\sum_{n\geq 1}\lambda_n\,\langle v_n,v\rangle_{\mathfrak{H}}\,v_n. \tag{25}$$

Finalement, le spectre de A *est la fermeture de l'ensemble des valeurs propres :*

$$\sigma(A)=\overline{\{\lambda_n,\ n\geq 1\}}.$$

Réciproquement, tout opérateur A sous la forme (25) *avec $(v_n)_{n\geq 1}$ une base orthonormée de $\mathfrak{H}$ et $(\lambda_n)_{n\geq 1}$ une famille de réels, est auto-adjoint sur le domaine* (24) *et son spectre est la fermeture de l'ensemble des λ_n.*

Démonstration. Appelons V l'ensemble à droite de (24), composé des vecteurs $w = \sum_{n\geq 1} \alpha_n v_n$ tels que $\sum_{n\geq 1}(\lambda_n)^2|\alpha_n|^2 < \infty$, où $\alpha_n := \langle v_n, w\rangle_{\mathfrak{H}}$. Nous commençons par montrer que $V \subset D(A)$. Comme les v_n sont dans $D(A)$ par définition, il est clair que les sommes finies $\sum_{n\in I} \alpha_n v_n$ sont toutes dans $D(A)$. Par ailleurs, pour une telle somme on a $A\sum_{n\in I} \alpha_n v_n = \sum_{n\in I} \alpha_n A v_n = \sum_{n\in I} \lambda_n \alpha_n v_n$ et donc

$$\left\| A \sum_{n\in I} \alpha_n v_n \right\|_{\mathfrak{H}}^2 = \sum_{n\in I} \lambda_n^2 |\alpha_n|^2$$

par la formule de Parseval. Soit alors $w = \sum_{n\geq 1} \alpha_n v_n$ un vecteur quelconque de V et posons $w_N = \sum_{n=1}^N \alpha_n v_n$, qui converge vers w pour la norme de $\mathfrak{H}$. La suite $Aw_N = \sum_{n=1}^N \lambda_n \alpha_n v_n$ converge vers le vecteur $z = \sum_{n\geq 1} \lambda_n \alpha_n v_n$ dans $\mathfrak{H}$. Comme A est auto-adjoint, son graphe est fermé et on déduit que $w \in D(A)$ et que $Aw = z$. Nous avons donc prouvé que $V \subset D(A)$ (et en même temps la formule (25) pour tous les éléments de V).

Pour l'inclusion inverse, rappelons que $D(A) = \mathrm{Im}\,(A+i)^{-1}$. Dans ce cas, tout $w \in D(A)$ peut s'écrire $w = (A+i)^{-1}z$ avec $z \in \mathfrak{H}$ ou, dit autrement, w est l'unique solution de l'équation $(A+i)w = z$ dans $D(A)$. Or, si on décompose $z = \sum_{n\geq 1} \beta_n v_n$ avec $\beta_n = \langle v_n, z\rangle_{\mathfrak{H}}$, tel que $\sum_{n\geq 1} |\beta_n|^2 < \infty$, il est clair que

$$w' := \sum_{n\geq 1} \frac{\beta_n}{\lambda_n + i} v_n$$

appartient à V (donc à $D(A)$) puisque

$$\sum_{n\geq 1} |\beta_n|^2 \frac{(\lambda_n)^2}{(\lambda_n)^2+1} \leq \sum_{n\geq 1} |\beta_n|^2 = \|z\|_{\mathfrak{H}}^2 < \infty.$$

Les arguments précédents montrent aussi que $(A+i)w' = z$ et donc, par l'injectivité de $(A+i)^{-1}$, que $w = w' \in V$. Ainsi $D(A) \subset V$.

Il reste à prouver que le spectre de A est l'adhérence des valeurs propres (λ_n). Comme les λ_n sont clairement des éléments du spectre et que ce dernier est fermé, il est clair que $\overline{\{\lambda_n\}} \subset \sigma(A)$. Soit alors $z \in \mathbb{R} \setminus \overline{\{\lambda_n\}}$, c'est-à-dire tel que $|z - \lambda_n| \geq \varepsilon > 0$ pour tout n et un ε assez petit. Il est facile d'en déduire que $A - z$ est inversible, d'inverse borné donné par la formule

$$(A-z)^{-1} \sum_{n\geq 1} \alpha_n v_n := \sum_{n\geq 1} \frac{\alpha_n}{\lambda_n - z} v_n.$$

Ainsi, $z \in \rho(A) = \mathbb{C} \setminus \sigma(A)$.

Réciproquement, soit A un opérateur sous la forme (25) avec des λ_n réels, défini sur le domaine (24). D'une part A est symétrique par la formule de Parseval

$$\langle w', Aw\rangle_{\mathfrak{H}} = \sum_{n\geq 1} \lambda_n \overline{\alpha'_n} \alpha_n v_n = \langle Aw', w\rangle_{\mathfrak{H}}$$

où $w = \sum_{n\geq 1} \alpha_n\, v_n$ et $w' = \sum_{n\geq 1} \alpha'_n\, v_n$ ont été décomposés sur la base orthonormée (v_n). D'autre part, si on a $\langle w, Av\rangle = \langle z, v\rangle$ pour tout $v \in D(A)$, ceci signifie, en prenant $v = v_n$, que $\lambda_n \langle w, v_n\rangle_{\mathfrak{H}} = \langle z, v\rangle_{\mathfrak{H}}$ et donc que

$$\sum_{n\geq 1} (\lambda_n)^2 |\langle w, v_n\rangle_{\mathfrak{H}}|^2 = \sum_{n\geq 1} |\langle z, v_n\rangle_{\mathfrak{H}}|^2 = \|z\|^2_{\mathfrak{H}} < \infty.$$

On a bien $w \in D(A)$ et $Aw = z$ ce qui montre, par la caractérisation (5), que A est auto-adjoint. Le calcul du spectre a déjà été discuté. □

Voici une conséquence très simple du théorème précédent (qui est en fait valable pour tout opérateur auto-adjoint [9]).

Corollaire 35 (Opérateurs bornés inférieurement)**.** *Soit A un opérateur auto-adjoint, qui est diagonalisable dans une base orthonormée. Alors les conditions suivantes sont équivalentes*

1. *$\sigma(A) \subset [a, +\infty[$;*
2. *$\langle v, Av\rangle_{\mathfrak{H}} \geq a \|v\|^2_{\mathfrak{H}}$ pour tout $v \in D(A)$.*

On dit alors que A est borné inférieurement.

Démonstration. Nous avons déjà vu que la minoration sur $\langle v, Av\rangle$ implique que $\sigma(A) \subset [a; +\infty[$ au corollaire 14. Réciproquement, si A est diagonalisable dans une base orthonormé (v_n) et que toutes les valeurs propres associées sont $\geq a$, alors on obtient immédiatement

$$\langle v, Av\rangle_{\mathfrak{H}} = \sum_{n\geq 1} \lambda_n |\alpha_n|^2 \geq a \sum_{n\geq 1} |\alpha_n|^2 = a \|v\|^2_{\mathfrak{H}},$$

par la formule (25). □

Dans l'exercice suivant, on étudie la situation inverse, un peu incongrue, dans laquelle il est possible de diagonaliser un opérateur A explicitement, ce qui permet ensuite d'en déduire un domaine naturel sur lequel il est auto-adjoint, avec le spectre calculé en premier lieu.

Exercice 36 (Auto-adjonction des opérateurs déjà diagonalisés)**.** *Soit A un opérateur symétrique sur un domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$, tel qu'il existe une base orthonormée (v_n) de $\mathfrak{H}$ composée d'éléments de $D(A)$, qui sont tous des vecteurs propres de A, c'est-à-dire $A\, v_n = \lambda_n\, v_n$ avec $\lambda_n \in \mathbb{R}$. Montrer que l'opérateur $\overline{A}$, défini sur le domaine*

$$D(\overline{A}) := \left\{ v \in \mathfrak{H} \text{ tels que } \sum_{n\geq 1} (\lambda_n)^2 |\langle v_n, v\rangle_{\mathfrak{H}}|^2 < \infty \right\}$$

par

$$\overline{A} v = \sum_{n\geq 1} \lambda_n \langle v_n, v\rangle_{\mathfrak{H}}\, v_n,$$

est auto-adjoint, de spectre $\sigma(\overline{A}) = \overline{\{\lambda_n,\ n \geq 1\}}$. Montrer aussi que c'est l'unique opérateur auto-adjoint défini sur un domaine contenant $D(A)$, qui coïncide avec A sur $D(A)$.

L'opérateur $\overline{A}$ s'appelle la fermeture de A *et il est caractérisé par le fait que son graphe est la fermeture du graphe de A. Si le graphe de A est déjà fermé, alors nous aurons $\overline{A} = A$. Lorsqu'un opérateur symétrique A a sa fermeture $\overline{A}$ qui est un opérateur auto-adjoint, on dit que A est* essentiellement auto-adjoint.

6.2 Opérateurs auto-adjoints compacts

Nous rappelons qu'un opérateur A est dit compact lorsque $Av_n \to 0$ fortement dès que $v_n \rightharpoonup 0$ faiblement dans $\mathfrak{H}$. Un tel opérateur est forcément continu, donc borné, et est donc nécessairement défini sur tout $D(A) = \mathfrak{H}$. L'objectif de cette section est la diagonalisation des opérateurs compacts auto-adjoint. Une première étape est de préciser un peu le théorème 12, en distinguant les valeurs propres isolées de multiplicité finie du reste du spectre (appelé généralement *spectre essentiel*).

Théorème 37 (Spectre des opérateurs auto-adjoints II)**.** *Soit A un opérateur auto-adjoint sur le domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$, et $\lambda \in \sigma(A)$. On a alors l'alternative suivante :*

soit *λ est une valeur propre isolée, de multiplicité finie, c'est-à-dire $0 < \dim\ker(A-\lambda) < \infty$ et $\sigma(A) \cap [\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon] = \{\lambda\}$ pour un $\varepsilon > 0$ assez petit ;*

soit *il existe une suite $(v_n) \subset D(A)$ telle que $\|v_n\|_{\mathfrak{H}} = 1$, $v_n \rightharpoonup 0$ faiblement et $\|(A-\lambda)v_n\|_{\mathfrak{H}} \to 0$.*

L'énoncé précise celui du théorème 12 dans le sens où la suite v_n peut être choisie de sorte que $v_n \rightharpoonup 0$ faiblement, dès que λ n'est pas une valeur propre de multiplicité finie, qui est isolée au milieu du spectre. La preuve est très similaire mais un peu plus ardue.

Démonstration. Si λ est une valeur propre de multiplicité infinie, alors on peut choisir une base orthonormale (v_n) de $\ker(A-\lambda)$ qui vérifie nécessairement la propriété $v_n \rightharpoonup 0$. Enfin, si λ n'est pas une valeur propre du tout, on sait qu'il existe une suite v_n telle que $\|v_n\|_{\mathfrak{H}} = 1$ et $Av_n - \lambda v_n \to 0$ fortement. Quitte à extraire une sous-suite on peut supposer que $v_n \rightharpoonup v$ et que $Av_n \rightharpoonup \lambda v$. Comme A est auto-adjoint son graphe est fermé. Par ailleurs c'est un espace vectoriel de $\mathfrak{H} \times \mathfrak{H}$ qui est donc convexe, et on conclut qu'il est aussi faiblement fermé. On en déduit donc que $v \in D(A)$ et que $Av = \lambda v$. Mais nous avons supposé que λ n'est pas une valeur propre, donc on doit avoir $v = 0$, ce qui implique bien $v_n \rightharpoonup 0$ comme désiré.

Il reste donc à traiter du cas où λ est une valeur propre de multiplicité finie qui n'est pas isolée, c'est-à-dire telle qu'il existe $\sigma(A) \ni \lambda_k \to \lambda$ avec $\lambda_k \neq \lambda$. Si on peut choisir les λ_k de sorte que ce soient tous des valeurs propres, l'argument est facile. En effet, comme $\lambda_k \neq \lambda$, les sous-espaces $\ker(A-\lambda)$ et $\ker(A-\lambda_k)$ sont orthogonaux. Si on prend v_k tel que $Av_k = \lambda_k v_k$, et que $v_k \rightharpoonup v$, on aura par l'argument précédent $Av = \lambda v$ et $v \in \ker(A-\lambda)^\perp$ qui implique $v = 0$.

Finalement considérons le cas où aucun des λ_k n'est une valeur propre. D'après l'argument au début de cette preuve, nous savons que pour chaque k, il existe une suite $(v_{k,n})_{n\geq 1}$ telle que $\|v_{k,n}\|_{\mathfrak{H}} = 1$, $v_{k,n} \rightharpoonup 0$ et $(A-\lambda_k)v_{k,n} \to 0$ quand $n \to \infty$. Or, comme $v_{k,n} \rightharpoonup 0$, on a $Pv_{k,n} \to 0$ fortement, où P est la projection orthogonale sur l'espace de dimension finie $\ker(A-\lambda)$ (P est de rang fini donc compact). Ainsi, pour chaque k on peut choisir un n_k de sorte que $\|(A-\lambda_k)v_{k,n_k}\| \leq 1/k$ et $\|Pv_{k,n_k}\| \leq 1/k$. L'argument est alors le même que précédemment : toute limite faible v d'une sous-suite de v_{k,n_k} doit vérifier à la fois $Av = \lambda v$ et $Pv = 0$, ce qui implique $v = 0$. □

Même si nous n'en avons pas besoin tout de suite, nous en profitons pour introduire une séparation naturelle du spectre en deux parties, correspondants aux deux alternatives du théorème 37.

Définition 38. *Soit A un opérateur auto-adjoint sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$. L'ensemble des valeurs propres isolées de multiplicité finie est appelé* spectre discret*, alors que son complémentaire est appelé* spectre essentiel*.*

Nous sommes maintenant prêts pour diagonaliser les opérateurs auto-adjoints compacts. Pour simplifier l'exposé, nous supposerons que l'espace ambiant est de dimension infinie (sinon tous les opérateurs auto-adjoint sont compacts et on étudie simplement des matrices hermitiennes).

Théorème 39 (Diagonalisation des opérateurs auto-adjoints compacts)**.** *Soit A un opérateur auto-adjoint compact sur $\mathfrak{H}$ supposé de dimension infinie. Alors*

1. *le spectre de A dans $\mathbb{R} \setminus \{0\}$ est constitué de valeurs propres isolées et de multiplicité finie, dont le seul point d'accumulation est 0 ;*
2. *A est diagonalisable dans une base orthonormée. En particulier, A est donné par la formule* (25) *dans cette base.*

Démonstration. Nous commençons par prouver que, en dehors de zéro, le spectre ne peut contenir que des valeurs propres de multiplicité finie. Soit donc $\mu \in \sigma(A)$ avec $\mu \neq 0$. Nous raisonnons par l'absurde et supposons donc que μ n'est pas isolée et de multiplicité finie. D'après le théorème 37, il existe une suite v_n telle que $\|v_n\|_{\mathfrak{H}} = 1$, $v_n \rightharpoonup 0$ faiblement et $Av_n - \mu v_n \to 0$ fortement. Comme A est compact, on a $Av_n \to 0$ fortement, ce qui implique alors $\mu v_n \to 0$ fortement aussi. Si $\mu \neq 0$, ceci contredit le fait que $\|v_n\|_{\mathfrak{H}} = 1$ pour tout n. Comme A est un opérateur borné, le spectre de A est borné donc compact. Le seul point d'accumulation possible des valeurs propres est 0, car sinon il y aurait un autre élément du spectre non isolé, ce qui contredirait l'argument précédent.

À ce stade, nous prétendons avoir diagonalisé l'opérateur A et c'est ce qu'il nous reste à expliquer. Le reste de l'argument est en fait basé sur le lemme suivant, que nous démontrerons après avoir terminé la preuve du théorème 39.

Lemme 40. *Si A est un opérateur auto-adjoint compact, alors*

$$\sigma(A) \subset [-\|A\|, \|A\|]$$

et $\sigma(A)$ contient $-\|A\|$ ou $\|A\|$. Dit autrement,

$$\|A\| = \max_{\lambda \in \sigma(A)} |\lambda|.$$

Le raisonnement procède alors par récurrence. On commence par ordonner les valeurs propres en une suite décroissante par rapport à leur module : $|\mu_1| \geq |\mu_2| \geq \cdots$, qui tend vers 0 d'après ce que nous venons de prouver. Bien sûr, on peut toujours avoir $\mu_n = -\mu_{n+1}$ mais dans ce cas on aura $|\mu_{n+2}| < |\mu_n|$ puisque les valeurs propres sont isolées. Considérons alors μ_1, la valeur propre dont le module est maximal. Comme elle est de multiplicité finie, $\ker(A - \mu_1)$ est de dimension finie. L'espace $\ker(A - \mu_1)$ est stable sous l'action de A et son orthogonal également, à cause du fait que A est symétrique (l'écrire en exercice). On trouve donc que $\mathfrak{H} = \ker(A - \mu_1) \oplus \mathfrak{H}_1$ où $\mathfrak{H}_1$ est A-stable. Appelons A_1 la restriction de A à $\mathfrak{H}_1$, c'est-à-dire $A_1 = P_1^{\perp} A P_1^{\perp}$ où P_1 est le projecteur orthogonal sur $\ker(A - \mu_1)$ (de rang fini). Comme $P_1^{\perp}$ est borné, l'opérateur A_1 est également compact et, à cause de la décomposition en somme directe

$$A = \mu_1 P_1 \oplus A_1,$$

il est clair que $\sigma(A) = \{\mu_1\} \cup \sigma(A_1)$. La norme de l'opérateur A_1 est égale à la plus grande valeur propre en module, en dehors de μ_1, c'est-à-dire $\|A_1\| = |\mu_2|$. En raisonnant par récurrence, on peut donc écrire

$$A = \sum_{n=1}^{K} \mu_n P_n + A_K$$

avec $\|A_K\| = |\mu_K| < |\mu_{K-2}| \to 0$ et où la somme est directe. En continuant l'argument, on trouve donc que

$$A = \sum_{n=1}^{\infty} \mu_n P_n$$

où la somme est directe et converge en norme d'opérateur. Pour chaque n, on peut choisir une base orthonormée $v_{n,1}, ..., v_{n,d_n}$ de $\ker(A - \mu_n)$, de sorte que P_n est le projecteur orthogonal sur Vect $(v_{n,k},\ k = 1, ..., d_n)$. Quitte à répéter les μ_n en fonction de leur multiplicité, on trouve bien des λ_j et des v_j pour lesquels la formule (25) est valide. La famille orthonormée (v_n) n'est toutefois pas nécessairement une base, mais l'argument précédent montre que $\text{Vect}(v_n,\ n \geq 1)^\perp = \bigoplus_{n\geq 1} \ker(A - \lambda_n)^\perp = \ker(A)$ car A ne peut admettre de valeur propre non nulle sur cet espace, par construction (le fait que $\sigma(A) = \{0\}$ implique $A = 0$ suit encore du lemme 40). Ce sous-espace peut être de dimension finie ou infinie, mais on peut toujours en choisir une base orthonormée pour obtenir une base de $\mathfrak{H}$. □

Il nous reste à fournir la preuve du lemme 40.

Preuve du lemme 40. L'inclusion $\sigma(A) \subset [-\|A\|, \|A\|]$ se montre facilement à l'aide de la définition du spectre ou grâce au Corollaire 14. Rappelons que $\|A\| = \sup\{\|Av\|_{\mathfrak{H}} \ :\ \|v\|_{\mathfrak{H}} = 1\}$. Soit alors une suite v_n telle que $\|v_n\|_{\mathfrak{H}} = 1$ et $\|Av_n\|_{\mathfrak{H}} \to \|A\|$. Quitte à extraire une sous-suite on peut supposer que $v_n \rightharpoonup v$ faiblement et que $Av_n \to Av$ fortement. Ainsi, on déduit que $\|A\| = \|Av\|_{\mathfrak{H}}$ et que $\|v\|_{\mathfrak{H}} \leq 1$. Sauf si $A = 0$ qui est trivial, on a donc $v \neq 0$. On obtient donc

$$\|A\| \geq \frac{\|Av\|_{\mathfrak{H}}}{\|v\|_{\mathfrak{H}}} = \frac{\|A\|}{\|v\|_{\mathfrak{H}}},$$

qui implique immédiatement $\|v\|_{\mathfrak{H}} = 1$. Le supremum est donc atteint dans la définition de $\|A\|$. Ceci montre que $\langle v, A^2 v\rangle_{\mathfrak{H}} = \|Av\|^2 \geq \|Aw\|^2_{\mathfrak{H}} = \langle w, A^2 w\rangle_{\mathfrak{H}}$ pour tout $\|w\|_{\mathfrak{H}} = 1$. En prenant $w = (v + \varepsilon z)\|v + \varepsilon z\|_{\mathfrak{H}}^{-1}$ et en développant on trouve alors

$$\langle z, (A^2 - \|A\|^2)v\rangle_{\mathfrak{H}} = 0$$

pour tout z, ce qui implique finalement que $\|A\|^2$ est une valeur propre de A^2. L'espace $\ker(A^2 - \|A\|^2)$ est évidemment stable par A, et il est de dimension finie car A^2 est aussi compact. Sur cet espace de dimension finie, A peut être diagonalisé et ses valeurs propres sont de carré égal à $\|A\|^2$, et il s'agit donc de $-\|A\|$ ou $\|A\|$. □

6.3 Opérateurs auto-adjoints à résolvante compacte

Après avoir diagonalisé les opérateurs compacts, nous étudions maintenant une famille intéressante d'opérateurs qui sont toujours non bornés, mais toutefois aisés à diagonaliser.

Définition 41 (Opérateurs à résolvante compacte)**.** *Soit A un opérateur auto-adjoint, défini sur $D(A) \subset \mathfrak{H}$. On dit que A* est à résolvante compacte *lorsque $(A+i)^{-1}$ est compact.*

Rappelons que le spectre d'un opérateur auto-adjoint est réel (théorème 10), donc que $A+i$ est toujours inversible, d'inverse borné. Le choix de i est ici arbitraire et on peut voir que $(A+i)^{-1}$ compact équivaut à avoir $(A-z)^{-1}$ compact pour tout $z \in \mathbb{C} \setminus \sigma(A)$.

Exercice 42. *Montrer que pour tous $z, z' \in \mathbb{C} \setminus \sigma(A)$,*

$$(A-z)^{-1} = (A-z')^{-1} + (z-z')(A-z)^{-1}(A-z')^{-1} \tag{26}$$

et en déduire que $(A+i)^{-1}$ est compact si et seulement si $(A-z)^{-1}$ est compact pour tout $z \in \mathbb{C} \setminus \sigma(A)$.

Théorème 43 (Diagonalisation des opérateurs auto-adjoints à résolvante compacte)**.** *Soit A un opérateur auto-adjoint, défini sur $D(A) \subset \mathfrak{H}$, dont la résolvante est compacte. Alors $\sigma(A)$ est composé d'une suite de valeurs propres isolées de multiplicité finie dont le module tend vers $+\infty$. Il existe une base orthonormée $(v_n) \subset D(A)$ de $\mathfrak{H}$, composée de vecteurs propres de A, c'est-à-dire tels que $Av_n = \lambda_n v_n$.*

Démonstration. Comme pour le théorème 39 nous commençons par prouver que le spectre de A est uniquement composé de valeurs propres isolées de multiplicité finie. Soit donc $\lambda \in \sigma(A)$ tel qu'il existe une suite $(v_n) \subset D(A)$ telle que $\|v_n\| = 1$, $v_n \rightharpoonup 0$ et $(A-\lambda)v_n \to 0$. Alors on a $(A+i)v_n = (A-\lambda)v_n + (\lambda+i)v_n := w_n \rightharpoonup 0$. Ainsi $v_n = (A+i)^{-1}w_n \to 0$ fortement, puisque $(A+i)^{-1}$ est compact. Ceci contredit le fait que $\|v_n\| = 1$, et on conclut bien que $\sigma(A)$ ne contient que des valeurs propres isolées de multiplicité finie, d'après le théorème 37.

Soit alors $a \in \mathbb{R} \setminus \sigma(A)$ un nombre réel qui n'est pas dans le spectre de A. D'après la formule (26), l'opérateur $(A-a)^{-1}$ est compact et, comme a est réel, cet opérateur est aussi symétrique, donc auto-adjoint (puisque borné). En appliquant le théorème 39, on trouve qu'il existe une base orthonormée v_n de $\mathfrak{H}$ et des réels $\mu_n \to 0$ tels que $(A-a)^{-1}v_n = \mu_n v_n$. Les μ_n sont tous non nuls puisque $(A-a)^{-1}$ est injectif. Ainsi, on en déduit que $v_n \in \mathrm{Im}(A-a)^{-1} \subset D(A)$ pour tout n. En composant par $(A-a)$ on trouve que

$$Av_n = (a + \mu_n^{-1})v_n$$

ce qui fournit $\lambda_n = a + \mu_n^{-1}$ et conclut la preuve. □

Il peut arriver que l'opérateur A soit réel, c'est-à-dire que $D(A)$ soit stable par la conjugaison complexe, et que l'on ait $\overline{Av} = A\overline{v}$ pour tout $v \in D(A)$. Comme les valeurs propres sont toujours réelles, on voit que si on a $A(v+iw) = \lambda(v+iw)$ avec v, w des vecteurs réels, alors $Av = \lambda v$ et $Aw = \lambda w$. Ainsi on peut toujours choisir des vecteurs propres réels.

7 Laplaciens de Dirichet, Neumann et Robin : diagonalisation

Nous pouvons maintenant appliquer le théorème de la section précédente au Laplacien $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$ avec la condition au bord de Robin, sur un domaine borné Ω.

Théorème 44 (Laplacien de Robin)**.** *Soit $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$ le Laplacien avec condition au bord de Robin, défini à la section 5, sur un domaine Ω borné vérifiant les conditions du théorème 28. Cet opérateur est à résolvante compacte, et il peut donc être diagonalisé dans une base orthonormée. Par ailleurs, $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$ est un opérateur réel, et toutes ses fonctions propres peuvent être choisies à valeurs réelles.*

Démonstration. La preuve est basée sur le théorème 123 de Rellich qui précise que l'injection de $H^2(\Omega)$ dans $L^2(\Omega)$ est compacte dès que Ω est borné. En effet, soit $c > 0$ un réel assez grand tel que $-c \notin \sigma(-\Delta)_{\mathrm{R},\theta}$ (nous avons montré au théorème 30 que le spectre de $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$ est minoré). Nous devons prouver que si $f_n \rightharpoonup 0$ faiblement dans $L^2(\Omega)$, alors $g_n := (-\Delta_{\mathrm{R},\theta} + c)^{-1} f_n \to 0$ fortement dans $L^2(\Omega)$. La fonction g_n est l'unique solution de $(-\Delta_{\mathrm{R},\theta} + c)g_n = f_n$ dans $D(-\Delta)_{\mathrm{R},\theta}$. Comme $(-\Delta_{\mathrm{R},\theta} + c)^{-1}$ est borné, g_n est aussi bornée pour la norme de $L^2(\Omega)$ et on a évidemment $g_n \rightharpoonup 0$ faiblement. Par ailleurs, $-\Delta_{\mathrm{R},\theta} g_n = f_n - c g_n$ est également borné et, d'après l'inégalité (20), ceci implique finalement que g_n est bornée dans $H^2(\Omega)$. L'injection compacte $H^2(\Omega) \hookrightarrow L^2(\Omega)$ implique alors que $g_n \to 0$ fortement dans $L^2(\Omega)$, qui est exactement ce que nous voulions démontrer.

Pour voir que $-\Delta$ est réel, il faut d'abord montrer que son domaine est réel, ce qui suit du fait que la condition au bord fait intervenir $\cos(\pi\theta)$ et $\sin(\pi\theta)$ qui sont réels. Ainsi, il est clair que si $f \in D(-\Delta_{\mathrm{R},\theta})$, alors $\Re f$ et $\Im f$ sont aussi dans $D(-\Delta_{\mathrm{R},\theta})$. Par ailleurs, il est évident que $\overline{-\Delta f} = -\Delta \overline{f}$. □

Remarque 45. *Le Laplacien périodique est aussi réel, mais le Laplacien de Born-von Karman ne l'est pas pour $k \neq 0$ modulo π. Dans ce cas, travailler avec des fonctions à valeurs complexes est incontournable.*

8 Formes quadratiques

Nous terminons l'étude théorique de la diagonalisation des opérateurs auto-adjoints et en particulier du Laplacien avec différentes conditions au bord de Ω, par une discussion des formes quadratiques associées. Cette partie est fréquemment mise en avant dans les ouvrages classiques, car bien plus adaptée aux procédures de discrétisation (ce point sera discuté à la section 14), alors que nous avons plutôt mis l'accent ici sur les aspects spectraux.

8.1 Théorème de Lax-Milgram

Soit donc A un opérateur auto-adjoint. On appelle *forme quadratique associée à A* celle définie par

$$q_A(v) := \langle v, Av \rangle, \qquad v \in D(A).$$

On peut aussi regarder la forme polaire associée, qui vaut

$$\varphi_A(v, w) := \langle v, Aw \rangle, \qquad v, w \in D(A).$$

Dans cette section on fait l'hypothèse que q_A est *coercive*, c'est-à-dire qu'il existe $\alpha > 0$ tel quel

$$\langle v, Av\rangle_{\mathfrak{H}} \geq \alpha \|v\|_{\mathfrak{H}}^2, \qquad \forall v \in D(A). \tag{27}$$

D'après le lemme 14, ceci implique que $\sigma(A) \subset [a, \infty[$. En fait, par le théorème spectral les deux propositions sont même équivalentes dès que A est auto-adjoint, ce que nous avons vu seulement dans le cas particulier d'un opérateur diagonalisable dans une base orthonormée au corollaire 35. Bien sûr, ce dont nous avons réellement besoin est que $q_A(x) \geq -C\|x\|_{\mathfrak{H}}^2$, ce qui correspond au fait que $\sigma(A)$ est minoré, et ensuite on peut se ramener à (27) en remplaçant A par $A + a$ avec $a > C$.

Sous l'hypothèse (27), nous voyons que $x \in D(A) \mapsto \sqrt{q_A(x)}$ définit une norme, et que φ_A définit un produit scalaire. En général, l'espace $D(A)$ n'est pas fermé pour cette norme. En complétant $D(A)$ pour le produit scalaire φ_A, on trouve un nouvel espace $Q(A)$ tel que

$$D(A) \subset Q(A) \subset \mathfrak{H}.$$

Par extension, on trouve également une forme quadratique continue sur cet espace, qui étend q_A de façon unique et que l'on note de la même façon. De même, on trouve un produit scalaire φ_A pour lequel $Q(A)$ est un espace de Hilbert. L'inégalité (27) garantie que $Q(A)$ s'identifie à un sous-espace de l'espace de Hilbert ambient $\mathfrak{H}$, avec injection continue $Q(A) \hookrightarrow \mathfrak{H}$. Par construction, $D(A)$ est dense dans $Q(A)$ pour la norme induite par q_A et on a donc

$$\varphi_A(v, w) = \langle v, Aw\rangle, \qquad \forall v \in Q(A),\ w \in D(A).$$

Ainsi, $q_A(v) \leq \|v\|_{\mathfrak{H}}\|Av\|_{\mathfrak{H}} \leq \|v\|_{D(A)}^2$ et l'injection $D(A) \hookrightarrow Q(A)$ est également continue.

Définition 46 (Forme quadratique)**.** *Soit A un opérateur auto-adjoint, tel que $\langle x, Ax\rangle \geq \alpha\|x\|_{\mathfrak{H}}^2$ pour tout $x \in D(A)$. On appelle* forme quadratique associée à *A l'unique forme quadratique q_A définie précédemment sur son domaine $Q(A)$. La forme polaire associée est notée φ_A.*

Si A vérifie $\langle v, Av\rangle_{\mathfrak{H}} \geq -C\|v\|_{\mathfrak{H}}^2$ pour tout $x \in D(A)$, on pose de façon similaire $q_A := q_{A+a} - a\|\cdot\|_{\mathfrak{H}}^2$ pour $a > C$.

Exercice 47. *Si A vérifie $\langle v, Av\rangle_{\mathfrak{H}} \geq -C\|v\|_{\mathfrak{H}}^2$ pour tout $v \in D(A)$, montrer que $Q(A + a)$ ne dépend pas de $a > C$, et que q_A est bien définie.*

Exemple 48 (Laplacien sur $\mathbb{R}^d$)**.** *Considérons l'opérateur $A = -\Delta$ qui est auto-adjoint sur $H^2(\mathbb{R}^d)$, comme nous l'avons vu au corollaire 15. Alors on a*

$$q_A(f) = -\int_{\mathbb{R}^d} \overline{f(x)}\Delta f(x)\, dx = \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla f(x)|^2\, dx, \qquad \forall f \in H^2(\mathbb{R}^d).$$

Comme q_A est positive, on peut regarder par exemple $A + 1$ de sorte que

$$q_{A+1}(f) = \|f\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}^2 \geq \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2$$

est coercive. Nous voyons que le procédé de complétion fournit simplement la forme quadratique

$$q_A(f) = \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla f(x)|^2\, dx \quad \textit{sur} \quad Q(A) = H^1(\mathbb{R}^d),$$

puisque $H^2(\mathbb{R}^d)$ est dense dans $H^1(\mathbb{R}^d)$ pour la norme de $H^1(\mathbb{R}^d)$.

Nous verrons que la forme quadratique q_A est un objet qui peut être plus facile à manipuler que l'opérateur A lui-même. Il est cependant légitime de se demander quelle relation il y a entre A et q_A. Peut-on retrouver A à partir de q_A ? La réponse est positive et justifie l'introduction de la notion de forme quadratique.

Théorème 49 (Caractérisation du domaine)**.** *Soit A un opérateur auto-adjoint vérifiant*

$$\langle v, Av\rangle_{\mathfrak{H}} \geq -C\|v\|_{\mathfrak{H}}^2, \qquad \forall v \in D(A),$$

et soit φ_A la forme polaire associée. Les propositions suivantes sont équivalentes :

(i) $v \in Q(A)$ et il existe $z \in \mathfrak{H}$ tel que $\varphi_A(v,h) = \langle z, h\rangle_{\mathfrak{H}}$ pour tout $h \in Q(A)$;

(ii) $v \in D(A)$ et $Av = z$.

Démonstration. Si $v \in D(A)$ et $Av = z$, alors $\varphi_A(v,h) = \langle Av, h\rangle_{\mathfrak{H}} = \langle z, h\rangle_{\mathfrak{H}}$ pour tout $h \in Q(A)$.

Réciproquement, si $\varphi_A(v,h) = \langle z, h\rangle_{\mathfrak{H}}$ pour tout $h \in Q(A)$, alors on peut prendre $h \in D(A)$ et on trouve $\langle v, Ah\rangle_{\mathfrak{H}} = \langle z, h\rangle_{\mathfrak{H}}$ pour tout $h \in D(A)$. Cela signifie que $(v,z) \in T(A)^{\perp}$, l'orthogonal du graphe tourné de A qui est égal à $G(A)$ puisque A est supposé auto-adjoint. Donc $v \in D(A)$ et $Av = z$. □

Nous pouvons maintenant utiliser le résultat précédent pour donner une caractérisation variationnelle de l'équation $(A+a)v = z$.

Théorème 50 (Lax-Milgram)**.** *Soit A un opérateur auto-adjoint vérifiant*

$$\langle v, Av\rangle_{\mathfrak{H}} \geq -C\|v\|_{\mathfrak{H}}^2, \qquad \forall v \in D(A),$$

et $a > C$. Soit $z \in \mathfrak{H}$ quelconque. Alors, le problème de minimisation

$$\inf_{w \in Q(A)} \left\{ \frac{1}{2} q_A(w) + \frac{a}{2}\|w\|_{\mathfrak{H}}^2 - \Re\langle w, z\rangle_{\mathfrak{H}} \right\}; \tag{28}$$

admet pour unique minimiseur $v = (A-a)^{-1}z \in D(A)$. Ce dernier est aussi caractérisé par la relation

$$\varphi_A(v,h) + a\langle v, h\rangle_{\mathfrak{H}} = \langle z, h\rangle_{\mathfrak{H}} \tag{29}$$

pour tout $h \in Q(A)$.

Le théorème nous précise comment retrouver A (ou plutôt $(A+a)^{-1}$) à partir de la forme quadratique q_A, puisque le point $v = (A+a)^{-1}z$ est l'unique minimiseur du problème (28). L'équation (29) s'appelle la *formulation faible* de l'équation $(A+a)v = z$ et elle s'obtient formellement en prenant le produit scalaire avec z. La caractère "faible" vient du fait qu'on suppose seulement que $v \in Q(A)$. Nous verrons de nombreux exemples à la section 9.

Démonstration. Nous avons déjà vu au théorème 49 que la formulation faible (29) alliée à la condition que $v \in Q(A)$ était équivalente au fait que $v \in D(A)$ avec $(A+a)v = z$, c'est-à-dire $v = (A-a)^{-1}z$. On peut alors écrire pour tout $w \in Q(A)$, en complétant le carré,

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}q_A(w) + \frac{a}{2}\|w\|_{\mathfrak{H}}^2 - \Re\langle w, z\rangle_{\mathfrak{H}} - \frac{1}{2}q_A(v) + \frac{a}{2}\|v\|_{\mathfrak{H}}^2 - \Re\langle v, z\rangle_{\mathfrak{H}} \\ = \frac{1}{2}q_A(w-v) + \frac{a}{2}\|w-v\|_{\mathfrak{H}}^2 \geq \frac{a-C}{2}\|w-v\|_{\mathfrak{H}}^2 \end{aligned} \tag{30}$$

qui est positif et s'annule seulement quand $w = v$. □

Exercice 51. *Sans utiliser l'information que $v = (A-a)^{-1}z$, montrer que le problème de minimisation* (28) *admet un minimiseur (prendre une suite minimisante, montrer qu'elle est bornée dans $Q(A)$ et passer à la limite faible dans cet espace). Par un argument de perturbation, montrer que tout minimiseur vérifie la relation* (29).

Ainsi, nous avons prouvé que la donnée de la forme quadratique q_A et de son domaine $Q(A)$ est équivalente à celle de A et $D(A)$. En pratique, une version réciproque du théorème 50 due à Friedrichs [9] est souvent utilisée. Elle stipule que toute forme quadratique continue q est égale à un q_A pour un opérateur auto-adjoint A. C'est une technique habituelle pour construire les extensions auto-adjointes. L'idée est de partir d'un opérateur A défini sur un domaine très petit, puis de calculer la forme quadratique associée q_A, de la compléter et enfin de déterminer l'extension auto-adjointe de A qui en découle. Cette construction est très importante mais elle a le désavantage de masquer le rôle des conditions au bord, puisque ces dernières n'apparaissent pas toujours très clairement dans q_A et $Q(A)$, comme nous le discuterons plus loin. Mais c'est toutefois une méthode très élégante, qui fonctionne dans de nombreuses situations.

Théorème 52 (Riesz-Friedrichs)**.** *Soient $\mathcal{Q} \subset \mathfrak{H}$ deux espaces de Hilbert, de normes $\|\cdot\|_{\mathcal{Q}}$ et $\|\cdot\|_{\mathfrak{H}}$ et de produits scalaires $\langle\cdot,\cdot\rangle_{\mathcal{Q}}$ et $\langle\cdot,\cdot\rangle_{\mathfrak{H}}$. On suppose que $\mathcal{Q}$ est dense et s'injecte continuement dans $\mathfrak{H}$, c'est-à-dire qu'il existe $\alpha > 0$ tel que*

$$\|v\|_{\mathcal{Q}} \geq \alpha \|v\|_{\mathfrak{H}}, \qquad \forall v \in \mathcal{Q}. \tag{31}$$

Alors il existe un unique opérateur auto-adjoint A sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$, tel que $q_A = \|\cdot\|_{\mathcal{Q}}^2$, $\varphi_A = \langle\cdot,\cdot\rangle_{\mathcal{Q}}$ et $\mathcal{Q} = Q(A)$.

Démonstration. Par les théorèmes 49 et 50, on est amené à introduire

$$G(A) = \left\{(v,z) \in \mathcal{Q} \times \mathfrak{H} \ : \ \langle v, h\rangle_{\mathcal{Q}} = \langle z, h\rangle_{\mathfrak{H}}, \ \forall h \in \mathcal{Q}\right\}$$

et

$$D(A) := \left\{v \in \mathcal{Q} \ : \ \exists z \in \mathfrak{H}, \ (v,z) \in G(A)\right\}.$$

Il est clair que $G(A)$ est un sous-espace vectoriel de $\mathfrak{H} \times \mathfrak{H}$. Si par ailleurs $(0,z) \in G(A)$ alors on a $\langle z, h\rangle_{\mathfrak{H}} = 0$ pour tout $h \in \mathcal{Q}$, ce qui implique que $z = 0$ puisque $\mathcal{Q}$ est dense dans $\mathfrak{H}$. Ainsi, $G(A)$ est le graphe d'un opérateur linéaire A défini sur $D(A)$ par $Av = z$ (Exercice 8). Nous allons vérifier dans un instant que $D(A)$ est un sous-espace dense de $\mathfrak{H}$.

Pour $v_1, v_2 \in D(A)$, on a

$$\langle Av_1, v_2\rangle_{\mathfrak{H}} = \langle v_1, v_2\rangle_{\mathcal{Q}} = \overline{\langle v_2, v_1\rangle_{\mathcal{Q}}} = \overline{\langle Av_2, v_1\rangle_{\mathfrak{H}}} = \langle v_1, Av_2\rangle_{\mathfrak{H}}$$

qui montre immédiatement que l'opérateur A est symétrique sur son domaine.

Soit $z \in \mathfrak{H}$ quelconque. Comme $h \mapsto \langle z, h\rangle_{\mathfrak{H}}$ est une application linéaire continue sur $\mathcal{Q}$, le théorème de Riesz implique l'existence d'un unique $v \in \mathcal{Q}$ tel que $\langle v, h\rangle_{\mathcal{Q}} = \langle z, h\rangle_{\mathfrak{H}}$ pour tout $h \in \mathcal{Q}$, c'est-à-dire tel que $Av = z$. La preuve habituelle consiste à minimiser la fonctionnelle strictement convexe

$$w \in \mathcal{Q} \mapsto \frac{1}{2}\|w\|_{\mathcal{Q}}^2 - \Re\langle z, w\rangle,$$

ce qui revient à calculer la projection orthogonale de z sur $\mathcal{Q}$. L'existence d'un minimiseur est garantie par l'inégalité (31) et un argument de minimisation

comme à l'exercice 51. Ainsi, nous avons montré que l'opérateur A est surjectif de $D(A)$ dans $\mathfrak{H}$.

Écrivons maintenant la preuve que $D(A)$ est dense. Soit h dans l'orthogonal de $D(A)$ pour le produit scalaire de $\mathcal{Q}$ et, puisque A est surjectif, soit alors $v \in D(A)$ tel que $Av = h$. On a $0 = \langle v, h\rangle_{\mathcal{Q}} = \langle h, h\rangle_{\mathfrak{H}}$ ce qui implique $h = 0$, donc $D(A)$ est dense dans $\mathcal{Q}$ pour la norme de $\mathcal{Q}$. Puisque $\mathcal{Q}$ est lui même supposé dense dans $\mathfrak{H}$, on conclut aisément que $D(A)$ est dense dans $\mathfrak{H}$.

Comme nous avons déjà montré que A est surjectif de $D(A)$ dans $\mathfrak{H}$, d'après le théorème 10, il suit donc que A est auto-adjoint. Par ailleurs nous avons également prouvé que $D(A)$ est dense dans $\mathcal{Q}$ pour sa norme, et on a donc bien $q_A = \|\cdot\|^2_{\mathcal{Q}}$ comme annoncé. □

8.2 Formule de Courant-Fischer et ses variantes

À la section précédente, nous avons introduit la forme quadratique q_A d'un opérateur auto-adjoint A et avons donné une caractérisation faible de l'équation $(A + a)v = z$. Nous allons maintenant donner une caractérisation variationelle des valeurs propres à partir de q_A uniquement. Pour cela, nous allons supposer pour simplifier que A est à résolvante compacte. D'après le théorème 43, A est alors diagonalisable dans une base orthonormée, ce qui signifie qu'il existe une base (v_n) et des réels λ_n avec $|\lambda_n| \to \infty$ tels que $Av_n = \lambda_n v_n$. On a alors, d'après le théorème 34,

$$D(A) = \left\{ v \in \mathfrak{H} \text{ tels que } \sum_{n\geq 1} (\lambda_n)^2 |\langle v_n, v\rangle_{\mathfrak{H}}|^2 < \infty \right\}$$

et

$$Av = \sum_{n\geq 1} \lambda_n \langle v_n, v\rangle_{\mathfrak{H}} v_n.$$

Ceci permet d'obtenir une formule pour la forme quadratique associée à l'opérateur A

$$q_A(v) := \langle v, Av\rangle_{\mathfrak{H}} = \sum_{n\geq 1} \lambda_n |\langle v_n, v\rangle_{\mathfrak{H}}|^2 \tag{32}$$

et pour la forme sesquilinéaire associée

$$\varphi_A(v, w) := \langle v, Aw\rangle_{\mathfrak{H}} = \sum_{n\geq 1} \lambda_n \langle v, v_n\rangle_{\mathfrak{H}} \langle v_n, w\rangle_{\mathfrak{H}}. \tag{33}$$

Ici on suppose d'abord que $v, w \in D(A)$, ce qui permet d'écrire $\langle v, Aw\rangle_{\mathfrak{H}}$. Mais il est ensuite clair que les séries à droite font sens pour v et w dans un sous-espace plus grand que $D(A)$, qui est précisément le domaine

$$Q(A) = \left\{ v \in \mathfrak{H} \text{ tels que } \sum_{n\geq 1} |\lambda_n| \, |\langle v_n, v\rangle_{\mathfrak{H}}|^2 < \infty \right\}. \tag{34}$$

L'hypothèse dans la définition de $Q(A)$ implique que la série

$$\sum_{n\geq 1} \lambda_n \, |\langle v_n, v\rangle_{\mathfrak{H}}|^2$$

converge absolument. Mais si les λ_n ont un signe arbitraire, il se pourrait que la série soit oscillante et converge simplement sans converger absolument, pour des v en dehors de $Q(A)$. C'est pour éviter ce cas pathologique qu'on doit supposer que

$$\langle v, Av\rangle_{\mathfrak{H}} \geq -C\|v\|_{\mathfrak{H}}^2 \tag{35}$$

ce qui, par le corollaire 35 est équivalent à supposer que le spectre est minoré. Comme alors $\lambda_n \to +\infty$ et donc $\lambda_n > 0$ pour n assez grand, la convergence de la série ne peut être qu'absolue.

Exercice 53. *Vérifier que lorsque A est à résolvante compacte avec un spectre minoré, l'espace $Q(A)$ (défini en complétant $D(A)$ pour la norme induite par q_A comme expliqué à la section précédente) est bien donné par la formule* (34).

Nous montrons maintenant comment obtenir les vecteurs et valeurs propres à partir de la forme quadratique. Le résultat suivant est une généralisation de la célèbre formule de Courant-Fischer pour les valeurs propres de matrices hermitiennes, qui est parfois aussi appelée Rayleigh-Ritz dans la littérature physique.

Théorème 54 (Courant-Fischer)**.** *Soit A un opérateur auto-adjoint à résolvante compacte, dont le spectre est minoré, et $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots$ la suite ordonnée de ses valeurs propres.*[2] *Alors on a*

$$\lambda_1 = \min \sigma(A) = \min_{\substack{v\in Q(A)\\ \|v\|_{\mathfrak{H}}=1}} q_A(v) \tag{36}$$

et le minimum est exactement atteint pour les $v \in \ker(A-\lambda_1) \subset D(A)$ normalisés. Plus généralement, on a

$$\lambda_k = \min_{\substack{V\subset Q(A)\\ \dim(V)=k}} \max_{\substack{v\in V\\ \|v\|_{\mathfrak{H}}=1}} q_A(v) \tag{37}$$

et le minimum est atteint pour les espaces sous la forme $V = \mathrm{Vect}(v_1, ..., v_k) \subset D(A)$ engendrés par k vecteurs propres correspondants aux k premières valeurs propres $\lambda_1, ..., \lambda_k$.

Démonstration. La preuve est exactement la même qu'en dimension finie. Commençons par (36) et écrivons

$$q_A(v) = \sum_{n\geq 1} \lambda_n |\langle v_n, v\rangle_{\mathfrak{H}}|^2 \geq \lambda_1 \sum_{n\geq 1} |\langle v_n, v\rangle_{\mathfrak{H}}|^2 = \lambda_1 \|v\|_{\mathfrak{H}}^2 = \lambda_1.$$

Ceci montre que l'infimum est $\geq \lambda_1$. Par ailleurs, on a égalité si et seulement si $\langle v_n, v\rangle_{\mathfrak{H}} = 0$ pour tous les $\lambda_n > \lambda_1$, ce qui signifie précisément que $v \in \ker(A-\lambda_1)$.

Pour la formule (37), prenons $V_k = \mathrm{Vect}(v_1, ..., v_k)$ engendré par k vecteurs propres correspondants aux k premières valeurs propres $\lambda_1, ..., \lambda_k$. Alors pour tout $v \in V_k$ on a

$$q_A(v) = \sum_{n=1}^{k} \lambda_n |\langle v_n, v\rangle_{\mathfrak{H}}|^2 \leq \lambda_k \|v\|_{\mathfrak{H}}^2 = \lambda_k,$$

2. Comme $\lambda_n \to +\infty$, chaque λ_n ne peut coïncider qu'avec un nombre fini d'autres λ_k.

de sorte que l'infimum à droite de (37) est $\leq \lambda_k$. Réciproquement, soit maintenant $W \subset Q(A)$ un espace quelconque de dimension k, et V_{k-1} comme précédemment. Comme $\dim(W) = k$ alors que $\dim(V_{k-1}) = k-1$, il est clair que W doit intersecter l'orthogonal de V_{k-1}. Or, tout $v \in (V_{k-1})^\perp \cap Q(A)$ vérifie $q_A(v) \geq \lambda_k \|v\|_{\mathfrak{H}}^2$ par construction de V_{k-1}, de sorte que

$$\max_{\substack{v \in W \\ \|v\|_{\mathfrak{H}}=1}} q_A(v) \geq \lambda_k.$$

Nous avons donc montré la formule (37). Le cas d'égalité est laissé en exercice. □

Exercice 55. *Montrer que l'infimum dans* (37) *est atteint pour (et seulement pour) les espaces* $V = \mathrm{Vect}(v_1, ..., v_k)$ *engendré par* k *vecteurs propres correspondants aux* k *premières valeurs propres* $\lambda_1, ..., \lambda_k$*, le maximum étant lui atteint pour* v *un vecteur propre associé à* λ_k*.*

La formule de Courant-Fischer est très pratique pour la première valeur propre, mais bien sûr un peu plus compliquée pour les suivantes, puisqu'il s'agit d'un principe de min-max. Nous allons maintenant fournir une caractérisation moins connue, pour les *sommes de valeurs propres*, qui repose elle sur un principe de minimisation, et qui fait également intervenir des espaces de dimension k.

Théorème 56 (Caractérisation des sommes de valeurs propres)**.** *Soit* A *un opérateur auto-adjoint à résolvante compacte, dont le spectre est minoré, et* $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots$ *la suite ordonnée de ses valeurs propres. Alors on a*

$$\sum_{j=1}^{k} \lambda_j = \min_{\substack{w_1,...,w_k \in Q(A) \\ \langle w_i, w_j \rangle_{\mathfrak{H}} = \delta_{ij}}} \sum_{j=1}^{k} q_A(w_j) \tag{38}$$

et le minimum est exactement atteint lorsque Vect $(w_1, ..., w_k)$ *est un espace engendré par* k *premiers vecteurs propres de* A*.*

Dans le minimum à droite, on prend un espace $W \subset Q(A)$ de dimension k comme dans (37), et une base orthonormée $w_1, ..., w_k$ de cet espace. Enfin, on somme les valeurs de la forme quadratique pour ces vecteurs. On peut montrer que la somme ne dépend pas de la base choisie

Exercice 57. *Montrer que si* $W \subset Q(A)$ *est un espace de dimension* k*, alors* $\sum_{j=1}^{k} q_A(w_j)$ *ne dépend pas de la base orthonormée* w_j *choisie pour* W*.*

L'idée est ici que $\sum_{j=1}^{k} q_A(w_j)$ est (formellement) égal à $\mathrm{Tr}(A\Pi_W)$ où Π_W est le projecteur orthogonal sur W, une formule qu'il est aisé de vérifier en dimension finie et qui peut être utilisée une fois que le problème a été discrétisé.

Démonstration. Soit $w_1, ..., w_k$ un système orthonormé comme dans l'énoncé, où chaque w_j est dans $Q(A)$, et soient (λ_n, v_n) les éléments propres de A. Soit

enfin μ un réel quelconque qui sera fixé plus bas. On a alors

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{k} q_A(w_j) - \sum_{j=1}^{k} \lambda_j &= \sum_{j=1}^{k} \left(q_A(w_j) - \mu \|w_j\|_{\mathfrak{H}}^2\right) - \sum_{j=1}^{k} (\lambda_j - \mu) \\ &= \sum_{j=1}^{k} \sum_{n=1}^{\infty} (\lambda_n - \mu) \left(|\langle w_j, v_n\rangle_{\mathfrak{H}}|^2 - \delta_{jn}\right) \\ &= \sum_{j=1}^{k} \sum_{n=1}^{k} (\lambda_n - \mu) \left(|\langle w_j, v_n\rangle_{\mathfrak{H}}|^2 - \delta_{jn}\right) \\ &\qquad + \sum_{j=1}^{k} \sum_{n=k+1}^{\infty} (\lambda_n - \mu) \, |\langle w_j, v_n\rangle_{\mathfrak{H}}|^2.\end{aligned}$$

Rappelons la formule de Parseval

$$\sum_{n\geq 1} |\langle w, v_n\rangle_{\mathfrak{H}}|^2 = \|w\|_{\mathfrak{H}}^2, \qquad \forall w \in \mathfrak{H}.$$

et remarquons que, de façon similaire,

$$\sum_{j=1}^{k} |\langle v, w_j\rangle_{\mathfrak{H}}|^2 \leq \|v\|_{\mathfrak{H}}^2, \qquad \forall v \in \mathfrak{H},$$

puisque les w_j forment aussi un système orthonormé. Nous choisissons maintenant

$$\mu = \frac{\lambda_k + \lambda_{k+1}}{2}$$

(qui peut éventuellement être égal à λ_k en cas de dégénérescence), et, en utilisant que $\mu \geq \lambda_n$ pour $n \leq k$ et que $\mu \leq \lambda_n$ pour $n \geq k+1$, nous en déduisons que

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{k} q_A(w_j) - \sum_{j=1}^{k} \lambda_j &= \sum_{n=1}^{k} (\lambda_n - \mu) \left(\sum_{j=1}^{k} |\langle w_j, v_n\rangle_{\mathfrak{H}}|^2 - 1\right) \\ &\qquad + \sum_{j=1}^{k} \sum_{n=k+1}^{\infty} (\lambda_n - \mu) \, |\langle w_j, v_n\rangle_{\mathfrak{H}}|^2 \\ &= \sum_{n=1}^{k} |\lambda_n - \mu| \left(1 - \sum_{j=1}^{k} |\langle w_j, v_n\rangle_{\mathfrak{H}}|^2\right) \\ &\qquad + \sum_{j=1}^{k} \sum_{n=k+1}^{\infty} |\lambda_n - \mu| \, |\langle w_j, v_n\rangle_{\mathfrak{H}}|^2. \qquad (39)\end{aligned}$$

En introduisant Π_W, le projecteur orthogonal sur $W = \text{Vect}\ (w_1, ..., w_k)$ on peut réécrire la formule (39) sous la forme

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{k} q_A(w_j) - \sum_{j=1}^{k} \lambda_j &= \sum_{n=1}^{k} |\lambda_n - \mu| \left\langle v_n, (\Pi_W)^{\perp} v_n\right\rangle_{\mathfrak{H}} \\ &\qquad + \sum_{n=k+1}^{\infty} |\lambda_n - \mu| \left\langle v_n, \Pi_W v_n\right\rangle_{\mathfrak{H}} \qquad (40)\end{aligned}$$

et il est maintenant clair que cette formule est positive. Par ailleurs, on a égalité en choisissant $w_j = v_j$ pour tout $1 \leq j \leq k$, ce qui démontre la formule (38).

Nous discutons maintenant du cas d'égalité et commençons par supposer pour simplifier que $\lambda_{k+1} > \lambda_k$, ce qui implique $|\lambda_n - \mu| > 0$ pour tout $n \geq k+1$. Alors le terme (40) est nul si $\Pi_W v_n = 0$ pour tout $n \geq k+1$, ce qui signifie que $w_j \in \text{Vect}\ (v_1, ..., v_k)$ et donc, en comparant les dimensions, que Vect $(w_1, ..., w_k) =$ Vect $(v_1, ..., v_k)$.

Si $\lambda_{k-p-1} < \lambda_{k-p} = \lambda_k = \lambda_{k+q} < \lambda_{k+q+1}$, l'argument est similaire. Comme précédemment, on doit avoir $W \subset \text{Vect}\ (v_1, ..., v_{k+p})$ où $W := \text{Vect}\ (w_1, ..., w_k)$. Par ailleurs, l'annulation du premier terme nous précise maintenant que $v_1, ...,$ $v_{k-p-1} \in W$. Ainsi, $W = \text{Vect}\ (v_1, ..., v_{k-p-1}) \oplus W'$ où $W' \subset \ker(A - \lambda_k)$ qui est ce que nous voulions démontrer. □

Remarque 58. *Si $\lambda_{k+1} > \lambda_k$, en prenant $\mu = (\lambda_{k+1} + \lambda_k)/2$ et en utilisant que $|\lambda_n - \mu| \geq (\lambda_{k+1} - \lambda_k)/2$ pour tout n, on trouve que*

$$\begin{aligned}
&\sum_{j=1}^{k} q_A(w_j) - \sum_{j=1}^{k} \lambda_j \\
&\qquad \geq \frac{\lambda_{k+1} - \lambda_k}{2} \left(\sum_{n=1}^{k} \left\langle v_n, (\Pi_W)^\perp v_n \right\rangle_{\mathfrak{H}} + \sum_{n=k+1}^{\infty} \langle v_n, \Pi_W v_n \rangle_{\mathfrak{H}} \right) \\
&\qquad = (\lambda_{k+1} - \lambda_k) \sum_{n=1}^{k} \left\langle v_n, (\Pi_W)^\perp v_n \right\rangle_{\mathfrak{H}}. \qquad (41)
\end{aligned}$$

Soit maintenant Π_V le projecteur orthogonal (pour le produit scalaire de $\mathfrak{H}$) sur l'espace engendré par $v_1, ..., v_k$. Comme Π_W et Π_V sont tous les deux de rang k, l'opérateur $Q = \Pi_V - \Pi_W$ est de rang au plus $2k$. Soit alors X l'espace vectoriel engendré par $v_1, ..., v_k$ et $w_1, ..., w_k$, qui est de dimension au plus $2k$. Comme on a

$$\left\langle v_n, (\Pi_W)^\perp v_n \right\rangle_{\mathfrak{H}} = \langle v_n, (1 - \Pi_W) v_n \rangle_{\mathfrak{H}} = \langle v_n, (\Pi_V - \Pi_W) v_n \rangle_{\mathfrak{H}},$$

on peut réécrire

$$\begin{aligned}
\sum_{n=1}^{k} \left\langle v_n, (\Pi_W)^\perp v_n \right\rangle_{\mathfrak{H}} = \text{Tr}_X \Pi_V (\Pi_V - \Pi_W) &= k - \text{Tr}_X (\Pi_V \Pi_W) \\
&= \frac{1}{2} \text{Tr}_X (\Pi_V - \Pi_W)^2.
\end{aligned}$$

La trace est ici la trace usuelle sur l'espace de dimension finie X (on pourrait faire l'argument directement dans l'espace $\mathfrak{H}$, ce que nous évitons pour ne pas avoir à parler de trace en dimension infinie). L'opérateur $\Pi_V - \Pi_W$ est compact (même de rang fini) et auto-adjoint, il est donc diagonalisable. Si on appelle $\mu_1 \leq \cdots \leq \mu_{2k}$ ses valeurs propres, on a bien sûr

$$\text{Tr}_X (\Pi_V - \Pi_W)^2 = \sum_{j=1}^{2k} (\mu_j)^2 \geq \max_{j=1,...,2k} |\mu_j|^2 = \|\Pi_V - \Pi_W\|^2.$$

Nous avons donc démontré l'inégalité

$$\sum_{j=1}^{k} q_A(w_j) - \sum_{j=1}^{k} \lambda_j \geq \frac{\lambda_{k+1} - \lambda_k}{2} \|\Pi_V - \Pi_W\|^2, \tag{42}$$

où Π_V et Π_W sont respectivement les projecteurs orthogonaux sur $V = \text{Vect}\,(v_1, ..., v_k)$ (l'espace engendré par les k premiers vecteurs propres de A) et $W = \text{Vect}\,(w_1, ..., w_k)$, pour le produit scalaire de $\mathfrak{H}$.

C'est une autre façon de voir le résultat (déjà démontré plus haut) que si $\lambda_{k+1} > \lambda_k$, alors on a égalité lorsque le projecteur orthogonal Π_W sur l'espace engendré par les w_j est égal au projecteur orthogonal Π_V sur l'espace engendré par $v_1, ..., v_k$, c'est-à-dire lorsque les deux espaces sont égaux. L'avantage de l'inégalité (42) *est qu'elle fournie une estimée explicite simple, faisant intervenir la norme d'opérateur de la différence des projecteurs.*

Exercice 59 (Formulations variationnelles pour un opérateur réel)**.** *Si A est un opérateur* réel*, vérifier qu'on peut se restreindre dans les formules des théorèmes 50, 54 et 56 à des vecteurs réels uniquement.*

9 Formes quadratiques du Laplacien et applications

Dans cette section, nous calculons les formes quadratiques associées aux différentes réalisations auto-adjointes du Laplacien, construites dans les sections précédentes, et nous déduisons des résultats précédents une formulation variationnelle pour les valeurs propres.

9.1 Laplaciens périodique et de Born-von Karman

Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ la cellule unité associée à un réseau périodique $\mathscr{L}$ comme à la section 4, et $-\Delta_{\text{BK},\xi}$ l'opérateur Laplacien avec les conditions au bord de Born-von Karman, c'est-à-dire défini sur le domaine

$$D(-\Delta_{\text{BK},\xi}) = \Big\{ f \in H^2(\Omega) \text{ tels que } f(x+\ell) = f(x)e^{i\xi\cdot\ell},$$
$$(\partial_n f)(x+\ell) = (\partial_n f)(x)e^{i\xi\cdot\ell}, \text{ pour tous } (x,\ell) \in \partial\Omega \times \mathscr{L} \text{ avec } x+\ell \in \partial\Omega \Big\}.$$

Nous rappelons que le Laplacien périodique usuel est obtenu pour $\xi = 0$.

Théorème 60 (Laplaciens périodique et de Born-von Karman)**.** *La forme quadratique associée à $-\Delta_{BK,\xi}$ est*

$$q_{-\Delta_{\text{BK},\xi}}(f) := \int_\Omega |\nabla f(x)|^2 \, dx$$

sur le sous-espace fermé de $H^1(\Omega)$

$$Q(-\Delta_{\text{BK},\xi}) = \Big\{ f \in H^1(\Omega) \text{ tels que } f(x+\ell) = f(x)e^{i\xi\cdot\ell},$$
$$\text{pour tous } (x,\ell) \in \partial\Omega \times \mathscr{L} \text{ avec } x+\ell \in \partial\Omega \Big\}.$$

En particulier, pour tout $g \in L^2(\Omega)$ et tout $a > -\min\sigma(-\Delta_{BK,\xi})$, l'unique solution du problème

$$\begin{cases}(-\Delta + a)f = g\\ f \in D(-\Delta_{\mathrm{BK},\xi})\end{cases}$$

coïncide avec l'unique minimiseur du problème de minimisation

$$\min_{f\in Q(-\Delta_{\mathrm{BK},\xi})}\left\{\frac{1}{2}\int_\Omega |\nabla f(x)|^2\,dx + \frac{a}{2}\int_\Omega |f(x)|^2\,dx - \Re\int_\Omega \overline{g(x)}f(x)\,dx\right\}$$

qui est aussi l'unique solution dans $Q(-\Delta_{\mathrm{BK},\xi})$ de la formulation faible

$$\int_\Omega \nabla\overline{h}\cdot\nabla f + a\int_\Omega \overline{h}f = \int_\Omega \overline{h}g, \qquad \forall h \in Q(-\Delta_{\mathrm{BK},\xi}).$$

Par ailleurs, la première valeur propre est donnée par le principe variationnel

$$\lambda_1(-\Delta_{\mathrm{BK},\xi}) = \min_{p\in\mathscr{L}^*}|p+\xi|^2 = \min_{\substack{f\in Q(-\Delta_{\mathrm{BK},\xi})\\ \int_\Omega |f|^2=1}}\int_\Omega |\nabla f|^2$$

et les autres valeurs propres par le principe de Courant-Fischer (37) *ou la caractérisation* (38)*.*

Démonstration. Pour tout $f \in D(-\Delta_{\mathrm{BK},\xi})$, nous avons

$$\begin{aligned}\langle f, -\Delta_{\mathrm{BK},\xi}f\rangle_{L^2(\Omega)} &= \int_\Omega \overline{f(x)}(-\Delta f)(x)\,dx\\ &= \int_\Omega |\nabla f(x)|^2\,dx - \int_{\partial\Omega}\overline{f(x)}\partial_n f(x)\,dx.\end{aligned}$$

En écrivant la frontière du cube comme l'union des faces et en les groupant deux par deux, on trouve en utilisant la condition au bord que

$$\int_{\partial\Omega}\overline{f(x)}\partial_n f(x)\,dx = 0, \qquad \forall f \in D(-\Delta_{\mathrm{BK},\xi}),$$

de sorte que

$$q_{-\Delta_{\mathrm{BK},\xi}}(f) = \int_\Omega |\nabla f(x)|^2\,dx.$$

La norme associée à cette forme quadratique est donc juste la norme $H^1(\Omega)$. L'espace de définition de cette forme quadratique est, d'après l'exercice 53, la fermeture de $D(-\Delta_{\mathrm{BK},\xi})$ pour cette norme. Dans $H^1(\Omega)$ la condition sur la dérivée normale est perdue car cette dernière ne fait pas sens dans cet espace. Par contre, la condition sur la fonction reste, car l'application $f \in H^1(\Omega) \mapsto f_{|\partial\Omega} \in L^2(\partial\Omega)$ est continue. Le reste suit immédiatement des théorèmes 50 et 54. □

Exercice 61. *Montrer que $f \in Q(-\Delta_{\mathrm{BK},\xi})$ si et seulement si $x \mapsto e^{-i\xi\cdot x}f(x)$ appartient à $Q(-\Delta_{\mathrm{BK},0})$. En déduire que*

$$\lambda_1(-\Delta_{\mathrm{BK},\xi}) = \min_{\substack{f\in Q(-\Delta_{\mathrm{BK}},0)\\ \int_\Omega |f|^2=1}}\int_\Omega |\nabla f(x) + i\xi f(x)|^2\,dx. \tag{43}$$

Montrer qu'on ne peut pas se restreindre ici aux fonctions f à valeurs réelles.

9.2 Laplaciens de Dirichlet, Neumann et Robin

Soit Ω un ouvert borné comme à la section 5, et $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$ l'opérateur Laplacien avec les conditions au bord de Robin, c'est-à-dire défini sur le domaine

$$D(-\Delta_{\mathrm{R},\theta}) = \big\{ f \in H^2(\Omega) \ : \ \cos(\pi\theta)\, f_{|\partial\Omega} + \sin(\pi\theta)\, \partial_n f_{|\partial\Omega} = 0 \big\}.$$

Nous rappelons que les Laplaciens de Dirichlet et de Neumann correspondent respectivement à $\theta = 0$ et $\theta = 1/2$.

Théorème 62 (Laplaciens de Dirichlet, Neumann et Robin)**.** *La forme quadratique associée à $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$ est*

$$q_{-\Delta_{\mathrm{R},\theta}}(f) := \begin{cases} \displaystyle\int_\Omega |\nabla f(x)|^2\, dx + \frac{1}{\tan(\pi\theta)} \int_{\partial\Omega} |f|^2 & \text{pour } \theta \in]0,1[\setminus\{1/2\}, \\ \displaystyle\int_\Omega |\nabla f(x)|^2\, dx & \text{pour } \theta = 0 \text{ et } \theta = 1/2, \end{cases} \tag{44}$$

sur le sous-espace

$$Q(-\Delta_{\mathrm{R},\theta}) = \begin{cases} H^1(\Omega) & \text{pour } \theta \in]0,1[, \\ H^1_0(\Omega) & \text{pour } \theta = 0. \end{cases}$$

En particulier, pour tout $g \in L^2(\Omega)$ et tout $a > -\min \sigma(-\Delta)_{\mathrm{R},\theta}$, l'unique solution du problème

$$\begin{cases} -\Delta f + af = g \\ g \in L^2(\Omega),\ f \in H^2(\Omega) \\ \cos(\pi\theta)\, f_{|\partial\Omega} + \sin(\pi\theta)\, \partial_n f_{|\partial\Omega} = 0 \end{cases}$$

coïncide avec l'unique minimiseur du problème de minimisation

$$\min_{f \in Q(-\Delta_{\mathrm{R},\theta})} \bigg\{ \frac{1}{2} \int_\Omega |\nabla f(x)|^2\, dx + \frac{a}{2} \int_\Omega |f(x)|^2\, dx + \frac{\mathbb{1}(\theta \neq 0)}{2\tan(\pi\theta)} \int_{\partial\Omega} |f(x)|^2\, dx - \Re \int_\Omega \overline{g(x)} f(x)\, dx \bigg\}, \tag{45}$$

qui est aussi l'unique solution de l'équation au sens faible

$$\int_\Omega \nabla\overline{h(x)} \cdot \nabla f(x)\, dx + a \int_\Omega \overline{h(x)} f(x)\, dx + \frac{\mathbb{1}(\theta \neq 0)}{\tan(\pi\theta)} \int_{\partial\Omega} \overline{h(x)} f(x)\, dx = \int_\Omega \overline{h(x)} g(x)\, dx, \qquad \forall h \in Q(-\Delta_{\mathrm{R},\theta}). \tag{46}$$

Par ailleurs, la première valeur propre de $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$ est donnée par le principe variationnel

$$\lambda_1(-\Delta_{\mathrm{R},\theta}) = \min_{\substack{f \in Q(-\Delta_{\mathrm{R},\theta}) \\ \int_\Omega |f|^2 = 1}} \bigg\{ \int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{\mathbb{1}(\theta \neq 0)}{\tan(\pi\theta)} \int_{\partial\Omega} |f|^2 \bigg\} \tag{47}$$

et les autres valeurs propres par le principe de Courant-Fischer (37) *ou la caractérisation* (38)*.*

Démonstration. Commençons par le cas $\theta = 0$ (Dirichlet), et soit donc $f \in D(-\Delta_{\mathrm{R},0}) = H^2(\Omega) \cap H^1_0(\Omega)$. Alors

$$\int_\Omega \overline{f(x)}(-\Delta f)(x)\,dx = \int_\Omega |\nabla f(x)|^2\,dx - \int_{\partial\Omega} \overline{f}(x)\partial_n f(x)\,dx = \int_\Omega |\nabla f(x)|^2\,dx.$$

car f s'annule au bord. Ainsi, nous voyons que $q_{-\Delta_{\mathrm{R},0}}(f) = \int_\Omega |\nabla f|^2$. Le domaine $Q(-\Delta_{\mathrm{R},0})$ est donc la fermeture de $H^2(\Omega)\cap H^1_0(\Omega)$ pour la norme $H^1(\Omega)$, et on trouve donc $Q(-\Delta_{\mathrm{R},0}) = H^1_0(\Omega)$. Le reste suit des théorèmes 50 et 54 L'argument est exactement le même pour $\theta > 0$, en utilisant cette fois la formule (21). □

Il faut retenir de tous ces résultats que

- seule la condition au bord de Dirichlet fait sens dans $H^1(\Omega)$, et la forme quadratique est alors définie sur $Q(-\Delta_{\mathrm{R},0}) = H^1_0(\Omega)$;
- les formes quadratiques pour le Laplacien de Robin avec $\theta > 0$ (incluant donc Neumann) sont toutes définies sur le même domaine $H^1(\Omega)$, où la condition au bord est invisible ;
- la condition au bord de Neumann n'est visible ni dans l'espace de définition $Q(-\Delta_{\mathrm{R},1/2}) = H^1(\Omega)$, ni dans la forme de la fonctionnelle $q_{-\Delta_{\mathrm{R},1/2}}(f) = \int_\Omega |\nabla f|^2$;
- la forme quadratique associée à $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$ dépend de θ et contient un terme de bord seulement pour $\theta \in]0,1[\setminus\{1/2\}$.

Ces résultats font jouer des rôles particuliers aux Laplaciens de Dirichlet et de Neumann, alors que du point de vue des opérateurs auto-adjoints $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$, il n'y a pas de différence flagrante dans les domaines de définitions $D(-\Delta_{\mathrm{R},\theta})$, qui se déduisent les uns des autres en faisant varier θ continûment. Cette discussion montre comment, d'une certaine manière, la théorie spectrale des opérateurs est parfois plus naturelle que celle des formes quadratiques associées. Évidemment les formes quadratiques jouent un rôle très important, par exemple dans les procédés numériques qui vont être discutés à la section suivante.

Remarque 63. *Le second terme de la forme quadratique* (44) *du Laplacien de Robin pour* $\theta \in]0,1/2[\cup]1/2,1[$ *a la forme d'une distribution de simple couche uniforme* $\delta_{\partial\Omega}$ *sur le bord* $\partial\Omega$*. En ce sens, on considère fréquemment que*

$$-\Delta_{\mathrm{R},\theta} = -\Delta + \frac{1}{\tan(\pi\theta)}\delta_{\partial\Omega}.$$

Cette formule est à prendre avec précaution car elle n'est valable qu'au sens des formes quadratiques : la distribution $\delta_{\partial\Omega}$ *s'applique à* $|f|^2$ *et non à* f*.*

Remarque 64. *Lorsque* $\theta \to 0^+$ *le terme de bord en* $1/\tan(\pi\theta)$ *tend vers* $+\infty$ *et il joue alors le rôle d'une* pénalisation *qui mène, à la limite, à la condition de Dirichlet* $f_{|\partial\Omega} = 0$*.*

Exercice 65 (Estimées semi-classiques)**.** *Soient* $\Omega' \subset \Omega$ *deux ouverts vérifiant les hypothèses du théorème 28. En utilisant le fait que* $H^1_0(\Omega') \subset H^1_0(\Omega)$ *et le principe de Courant-Fischer* (37)*, montrer que les valeur propres* λ'_m *et* λ_m *du Laplacien de Dirichlet sur* Ω' *et* Ω *respectivement, vérifient* $\lambda_m \le \lambda'_m$*. En plaçant deux cubes* K_1 *et* K_2 *de sorte que* $K_1 \subset \Omega \subset K_2$*, montrer que*

$$C_1\, m^{2/d} \le \lambda_m(-\Delta_{\mathrm{R},0}) \le C_2\, m^{2/d}. \tag{48}$$

Que se passe-t-il pour les autres conditions au bord ?

Voici maintenant un résultat sur les valeurs propres du Laplacien de Robin, vues comme des fonctions de θ, et qui suit de la formulation variationnelle (47).

Théorème 66 (Propriétés des valeurs propres de Robin)**.** *Soient $\lambda_k(\theta)$ les valeurs propres de $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$, ordonnées par ordre croissant et comptées avec multiplicité. Ce sont des fonctions continues sur $[0,1[$ et strictement décroissantes qui toutes sont strictement positives en $\theta = 0$. Si $d \geq 2$, elles tendent toutes vers $-\infty$ quand $\theta \to 1^-$, mais si $d = 1$ seules $\lambda_1(\theta)$ et $\lambda_2(\theta)$ tendent toujours vers $-\infty$ quand $\theta \to 1^-$. Par ailleurs, $\lambda_1(\theta)$ est concave par rapport à $1/\tan(\pi\theta)$ et vérifie $\lambda_1(1/2) = 0$.*

Démonstration. D'après le principe de Courant-Fischer (théorème 54) et la formule (44), nous avons pour $\theta \in]0,1[$,

$$\lambda_k(\theta) = \min_{\substack{V \subset H^1(A) \\ \dim(V)=k}} \max_{\substack{f \in V \\ \|f\|_{L^2}=1}} \left\{ \int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta)} \int_{\partial\Omega} |f|^2 \right\}. \tag{49}$$

Pour plus de clarté, nous divisons la preuve en plusieurs étapes.

Preuve de la non trivialité des valeurs au bord. Soit f un vecteur propre quelconque de l'opérateur $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$, de valeur propre λ. Nous commençons par prouver que les deux valeurs au bord $f_{|\partial\Omega}$ et $\partial_n f_{|\partial\Omega}$ ne peuvent s'annuler simultanément.

En effet, si on a $f_{|\partial\Omega} = \partial_n f_{|\partial\Omega} = 0$, on déduit d'après la formule de Green (17) que

$$0 = \int_\Omega \overline{g}(-\Delta f - \lambda f) = \int_\Omega f(-\Delta\overline{g} - \lambda\overline{g})$$

pour tout $g \in H^2(\Omega)$ (sans hypothèse sur les valeurs de g au bord). En prenant $g = e^{ip\cdot x} \in H^2(\Omega)$ on trouve

$$0 = \int_\Omega g(-\Delta f - \lambda f) = (|p|^2 - \lambda) \int_\Omega f(x) e^{-ip\cdot x}\, dx.$$

Ceci démontre que la transformée de Fourier de la fonction $f \in L^2(\Omega)$ est à support dans la sphère de rayon $\sqrt{\lambda_+}$ et comme cette dernière est de mesure nulle, on déduit immédiatement que $f \equiv 0$, qui est une contradiction.

Nous concluons donc que

- $\partial_n f_{|\partial\Omega} \neq 0$ pour toute fonction propre du Laplacien de Dirichlet $-\Delta_{\mathrm{R},0}$;
- $f_{|\partial\Omega} \neq 0$ pour toute fonction propre du Laplacien de Neumann $-\Delta_{\mathrm{R},1/2}$;
- $f_{|\partial\Omega} \neq 0$ et $\partial_n f_{|\partial\Omega} \neq 0$ pour toute fonction propre du Laplacien de Robin $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$ avec $\theta \in]0,1/2[\cup]1/2,1[$.

Preuve de la décroissance. Soient $0 < \theta < \theta'$ et soit $V_\theta \subset H^2(\Omega)$ un espace engendré par les k premiers vecteurs propres de $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$. Alors

$$\int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta)} \int_{\partial\Omega} |f|^2 \geq \int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta')} \int_{\partial\Omega} |f|^2$$

pour tout $f \in V_\theta$, de sorte que

$$\begin{aligned} \lambda_k(\theta) &= \max_{\substack{f \in V_\theta \\ \|f\|_{L^2}=1}} \left\{ \int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta)} \int_{\partial\Omega} |f|^2 \right\} \\ &\geq \max_{\substack{f \in V_\theta \\ \|f\|_{L^2}=1}} \left\{ \int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta')} \int_{\partial\Omega} |f|^2 \right\} \geq \lambda_k(\theta'). \end{aligned}$$

La fonction

$$\theta' \mapsto \max_{\substack{f\in V_\theta \\ \|f\|_{L^2}=1}} \left\{ \int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta')} \int_{\partial\Omega} |f|^2 \right\} \tag{50}$$

est continue et décroissante. Par ailleurs, comme V_θ est ici un espace fixe de dimension finie, le maximum est atteint en un certain $f_{\theta'}$ (qui n'est pas forcément unique) et lorsque $\theta' \to \theta^+$, $f_{\theta'}$ converge fortement dans $H^2(\Omega)$, à une sous-suite près, vers une fonction f_θ qui réalise le maximum pour $\theta' = \theta > 0$. Par définition de V_θ, f_θ est une fonction propre associée à la valeur propre $\lambda_k(\theta)$ et donc $\int_{\partial_\Omega} |f_\theta|^2 > 0$ d'après la première étape. Par continuité de l'application de trace sur $H^2(\Omega)$, on conclut donc que

$$\int_{\partial\Omega} |f_{\theta'}|^2 > 0$$

pour $\theta' > \theta$ suffisamment proche de θ. Pour ces valeurs de θ', on a

$$\begin{aligned}
&\max_{\substack{f\in V_\theta \\ \|f\|_{L^2}=1}} \left\{ \int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta)} \int_{\partial\Omega} |f|^2 \right\} \\
&\qquad = \int_\Omega |\nabla f_{\theta'}|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta')} \int_{\partial\Omega} |f_{\theta'}|^2 \\
&\qquad < \int_\Omega |\nabla f_{\theta'}|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta)} \int_{\partial\Omega} |f_{\theta'}|^2 \\
&\qquad \leq \max_{\substack{f\in V_\theta \\ \|f\|_{L^2}=1}} \left\{ \int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta)} \int_{\partial\Omega} |f|^2 \right\} \\
&\qquad = \lambda_k(\theta).
\end{aligned}$$

À cause de la décroissance de la fonction (50), ceci implique alors que

$$\begin{aligned}
\lambda_k(\theta) = \max_{\substack{f\in V_\theta \\ \|f\|_{L^2}=1}} &\left\{ \int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta)} \int_{\partial\Omega} |f|^2 \right\} \\
&> \max_{\substack{f\in V_\theta \\ \|f\|_{L^2}=1}} \left\{ \int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta')} \int_{\partial\Omega} |f|^2 \right\} \geq \lambda_k(\theta'),
\end{aligned}$$

pour tout $\theta < \theta' < 1$, et on conclut que $\theta \mapsto \lambda_k(\theta)$ est strictement décroissante.

Preuve de la continuité sur $]0,1[$. Soit maintenant un espace $V_{\theta'}$ engendré par les k premiers vecteurs propres de $-\Delta_{\theta'}$. Alors, pour tout $f \in V_{\theta'}$ avec $\|f\|_{L^2} = 1$, on a

$$\begin{aligned}
&\int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta')} \int_{\partial\Omega} |f|^2 \\
&\quad \geq \int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta)} \int_{\partial\Omega} |f|^2 - \left| \frac{1}{\tan(\pi\theta')} - \frac{1}{\tan(\pi\theta)} \right| \int_{\partial\Omega} |f|^2 \\
&\quad \geq (1-\varepsilon) \left(\int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta)} \int_{\partial\Omega} |f|^2 \right) \\
&\qquad + \varepsilon \int_\Omega |\nabla f|^2 - \left(\frac{\varepsilon}{|\tan(\pi\theta)|} + \left| \frac{1}{\tan(\pi\theta')} - \frac{1}{\tan(\pi\theta)} \right| \right) \int_{\partial\Omega} |f|^2.
\end{aligned}$$

On suppose maintenant que $\eta \leq \theta < \theta' \leq 1-\eta$ pour un $\eta > 0$ et on utilise le fait que la fonction $\vartheta \mapsto 1/\tan(\pi\vartheta)$ est C^1 sur cet intervalle, ce qui donne

$$\frac{\varepsilon}{|\tan(\pi\theta)|} + \left|\frac{1}{\tan(\pi\theta')} - \frac{1}{\tan(\pi\theta)}\right| \leq K_\eta(\varepsilon + |\theta - \theta'|)$$

pour une constante K_η (qui peut être calculée explicitement). Ceci suggère de choisir $\varepsilon = |\theta - \theta'|$ et on obtient alors

$$\begin{aligned}\int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta')}\int_{\partial\Omega}|f|^2 \geq (1-|\theta-\theta'|)\left(\int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta)}\int_{\partial\Omega}|f|^2\right)\\ + |\theta-\theta'|\left(\int_\Omega |\nabla f|^2 - 2K_\eta\int_{\partial\Omega}|f|^2\right).\end{aligned}$$

En utilisant à nouveau (15) et le fait que $\|f\|_{L^2} = 1$, on trouve que

$$\int_\Omega |\nabla f|^2 - 2K_\eta\int_{\partial\Omega}|f|^2 \geq -C(K_\eta)^2$$

et donc nous avons prouvé que

$$\begin{aligned}\int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta')}\int_{\partial\Omega}|f|^2\\ \geq (1-|\theta-\theta'|)\left(\int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta)}\int_{\partial\Omega}|f|^2\right) - C(K_\eta)^2|\theta-\theta'|\end{aligned}$$

pour tout $f \in V_{\theta'}$ normalisé. En utilisant la décroissance prouvée plus haut, ceci démontre que

$$\lambda_k(\theta) \geq \lambda_k(\theta') \geq (1-|\theta-\theta'|)\lambda_k(\theta) - C(K_\eta)^2|\theta-\theta'| \geq \lambda_k(\theta) - C_\eta|\theta-\theta'|$$

et donc bien que la fonction $\vartheta \mapsto \lambda_k(\vartheta)$ est Lipschitz sur tout intervalle $]\eta, 1-\eta[$. C'est donc en particulier une fonction continue sur $]0,1[$.

Preuve de la continuité en 0^+. On remarque d'abord que, en prenant $V \subset H^1_0(\Omega)$ un sous-espace propre composé de fonctions propres du Laplacien de Dirichlet, on a

$$\lambda_k(0) \geq \lambda_k(\theta)$$

puisque le terme de bord s'annule pour ces fonctions. Soit alors une suite $\theta_n \to 0^+$ et V_n une suite d'espaces de dimension k, engendré par une famille orthonormée de k premiers vecteurs propres $f_{1,n}, ..., f_{k,n}$, pour $-\Delta_{\theta_n}$. Comme on a

$$\lambda_k(\theta) = \max_{\substack{f\in V_n\\ \|f\|_{L^2}=1}} \left(\int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta_n)}\int_{\partial\Omega}|f|^2\right) \leq \lambda_k(0), \tag{51}$$

on conclut que les $f_{j,n}$ sont tous bornés dans $H^1(\Omega)$ et vérifient

$$\int_{\partial\Omega}|f_{j,n}|^2 \leq \tan(\pi\theta_n)\lambda_k(0) \to 0. \tag{52}$$

Quitte à extraire une sous-suite, on peut supposer que $f_{j,n} \to f_j$ faiblement dans $H^1(\Omega)$ et fortement dans $L^2(\Omega)$ (par le théorème 123 de Rellich). La convergence

forte dans $L^2(\Omega)$ implique que les f_j forment un système orthonormé et on appelle V l'espace de dimension k, engendré par ces fonctions. Par ailleurs, la limite (52) signifie que les f_j sont tous dans $H_0^1(\Omega)$ et donc V est également inclus dans cet espace. La dernière chose à vérifier est que

$$\liminf_{n\to\infty} \max_{\substack{f\in V_n \\ \|f\|_{L^2}=1}} \int_\Omega |\nabla f|^2 \geq \max_{\substack{f\in V \\ \|f\|_{L^2}=1}} \int_\Omega |\nabla f|^2,$$

ce qui peut être prouvé en écrivant tout $f \in V$ normalisé sous la forme $f = \sum_{j=1}^k \alpha_j f_j$ et en utilisant que $g_n := \sum_{j=1}^k \alpha_j f_{j,n}$ appartient à V_n et converge vers f fortement dans $L^2(\Omega)$ et faiblement dans $H^1(\Omega)$. Il s'agit alors juste d'appliquer le lemme de Fatou. Comme $V \subset H_0^1(\Omega)$ est de dimension k, la caractérisation de Courant-Fischer donne immédiatement

$$\max_{\substack{f\in V \\ \|f\|_{L^2}=1}} \int_\Omega |\nabla f|^2 \geq \lambda_k(0).$$

En conclusion, nous avons démontré que $\lambda_k(\theta) \leq \lambda_k(0)$ et que

$$\liminf_{n\to\infty} \lambda_k(\theta_n) \geq \lambda_k(0),$$

ce qui implique bien que

$$\lim_{n\to\infty} \lambda_k(\theta_n) = \lambda_k(0)$$

et termine la preuve de la continuité en 0^+.

Preuve de la divergence en 1^-. Soit $V \subset H^1(\Omega)$ un espace de dimension k, dont la restriction au bord forme encore un espace de dimension k (pour construire un tel espace, il suffit de prendre k fonctions orthogonales suffisamment lisses sur $\partial\Omega$ que l'on relève en k fonctions $f_1, ..., f_k$ dans $H^1(\Omega)$). Un tel espace V existe toujours en dimension $d \geq 2$ car $L^2(\partial\Omega)$ est alors de dimension infinie. Par contre, $L^2(\partial\Omega)$ peut être de dimension finie si $d = 1$, auquel cas l'argument suivant ne s'appliquera que pour $k \leq \dim L^2(\partial\Omega)$. Plus précisément, si Ω est l'union de N intervalles disjoints, $L^2(\partial\Omega)$ est exactement de dimension $2N$.

La matrice de Gram $G = \langle f_i, f_j \rangle_{L^2(\Omega)}$ est inversible et, pour tout $f = \sum_{j=1}^k \alpha_j f_j \in V$, on a

$$\int_{\partial\Omega} |f|^2 = \sum_{j=1}^k |\alpha_j|^2 \geq \frac{1}{\|G\|} \sum_{i,j=1}^k \overline{\alpha_i} G_{ij} \alpha_j = \frac{\|f\|_{L^2}^2}{\|G\|}.$$

De façon similaire, on a

$$\int_\Omega |\nabla f|^2 = \int_\Omega \left| \sum_{j=1}^k \alpha_j \nabla f_j \right|^2 \leq \left(\sum_{j=1}^k |\alpha_j|^2 \right) \left(\sum_{j=1}^k \int_\Omega |\nabla f_j|^2 \right)$$
$$\leq \|G^{-1}\| \left(\sum_{j=1}^k \int_\Omega |\nabla f_j|^2 \right) \|f\|_{L^2}^2 .$$

Pour $1/2 < \theta < 1$, ceci fournit l'inégalité

$$\lambda_k(\theta) \leq \|G^{-1}\| \left(\sum_{j=1}^{k} \int_\Omega |\nabla f_j|^2 \right) - \frac{1}{\|G\| \tan(\pi\theta)}$$

et comme les f_j sont fixés, il est maintenant clair que $\lambda_k(\theta) \to -\infty$ quand $\theta \to 1^-$.

Preuve de la concavité de λ_1. La concavité de λ_1 comme fonction de $\beta := 1/\tan(\pi\theta)$ est classique (le minimum d'une fonction dépendant linéairement d'un paramètre est toujours concave en ce paramètre), et implique automatiquement la stricte décroissance. □

Exercice 67. *Écrire en détail la preuve de la concavité de λ_1 par rapport à $1/\tan(\pi\theta)$.*

Exercice 68. *On se place en dimension 1 sur l'intervalle $\Omega =]0,1[$. Montrer que $\omega^2 \neq 0$ est une valeur propre du Laplacien de Robin $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$ (de fonction propre $\alpha e^{i\omega x} + \beta e^{-i\omega x}$ avec α, β bien choisis) si et seulement si*

$$\Big(\cos(\pi\theta) + i\omega \sin(\pi\theta) \Big)^2 e^{i\omega} = \Big(\cos(\pi\theta) - i\omega \sin(\pi\theta) \Big)^2 e^{-i\omega}.$$

Montrer que 0 est une valeur propre uniquement pour $\theta = 1/2$ et $\theta = 1 - \pi^{-1} \arctan(1/2) \simeq 0,85$. Que se passe-t-il quand $\theta \to 1^-$? La courbe de la figure 3 représente les trois premières valeurs propres.

10 La première fonction propre du Laplacien de Robin

Dans cette section, nous démontrons que la première valeur propre du Laplacien (pour n'importe laquelle des conditions au bord de Robin considérée plus haut), est toujours simple, et que sa fonction propre associée est toujours strictement positive à l'intérieur de Ω.

Théorème 69 (Perron-Frobenius)**.** *La première valeur propre du Laplacien de Robin sur un domaine borné et connexe Ω est toujours simple, et sa fonction propre associée peut être choisie strictement positive à l'intérieur de Ω.*

Ce théorème important peut être utilisé ensuite pour démontrer que $\lambda_1(\theta)$, la première valeur propre du Laplacien de Robin, est une fonction très lisse (analytique réelle) de θ, mais nous n'en dirons pas plus ici. Les autres valeurs propres sont aussi des fonctions analytiques de θ [13] mais qui peuvent se croiser, ce qui rend les $\lambda_k(\theta)$ au plus Lipschitz car ces dernières sont toujours classées dans l'ordre croissant, par définition.

Notons que le théorème reste vrai pour le Laplacien avec la condition au bord *périodique* correspondant à $\xi = 0$, puisque la valeur propre est nulle et la fonction propre associée est la fonction constante. Par contre il n'est plus vrai pour le Laplacien de Born-von Karman dès que $\xi \neq 0$. La valeur propre de $-\Delta_{\mathrm{BK},\xi}$ reste simple lorsque ξ est petit, mais la fonction propre $e^{i\xi\cdot x}$ associée n'a pas de signe dès que $\xi \neq 0$. Enfin, la valeur propre est dégénérée lorsque ξ est à égale distance de deux points du réseau $\mathscr{L}^*$, par exemple pour $k = \pm\pi$ en dimension 1.

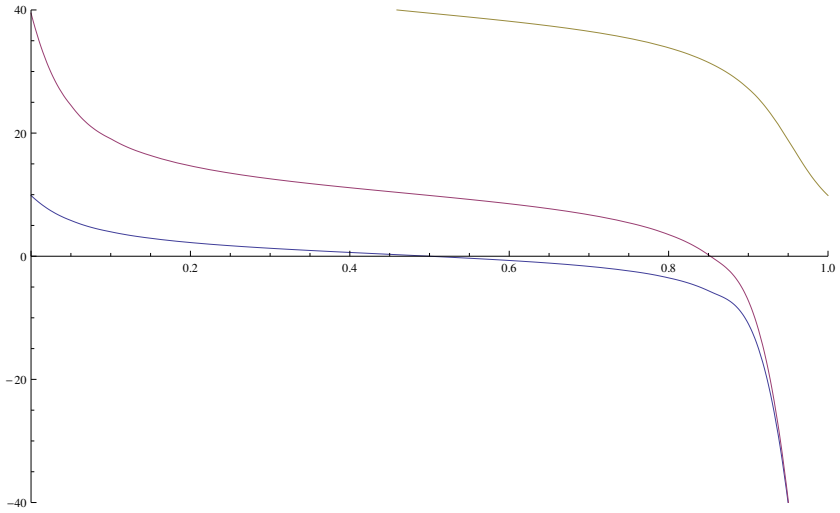


FIGURE 3 – Tracé des fonctions $\lambda_1(\theta)$, $\lambda_2(\theta)$ et $\lambda_3(\theta)$, pour $\Omega =]0,1[$, en fonction de $\theta \in [0,1[$.

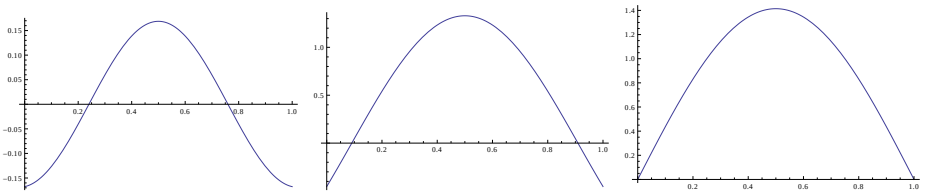


FIGURE 4 – Tracé de la fonction propre correspondant à la valeur propre $\lambda_3(\theta)$, pour $\theta = 0.7$, pour $\theta = 0.97$ et à la limite $\theta = 1$.

L'hypothèse que Ω est connexe est très importante. Par exemple, si Ω a deux composantes connexes, il est clair en prenant une fonction constante pour chacun des deux ensembles, que $\lambda_1(1/2) = \lambda_2(1/2) = 0$ est dégénérée dans le cas des conditions de Neumann. De même, si Ω est l'union de deux domaines identiques, tous les $\lambda_k(\theta)$ sont de multiplicité paire (ceci quelle que soit la condition au bord).

La preuve du théorème repose sur deux résultats importants, que nous n'allons pas démontrer en détail. Le premier est le lemme fondamental suivant.

Lemme 70 (Convexité des gradients)**.** *Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un ouvert connexe. Pour tout $f, g \in H^1(\Omega, \mathbb{R})$ on a*

$$|\nabla f(x)|^2 + |\nabla g(x)|^2 \geq \left|\nabla \sqrt{f^2 + g^2}(x)\right|^2 \tag{53}$$

presque partout. Si $f^2 + g^2 > 0$ sur Ω, alors on a égalité dans (53) pour presque tout $x \in \Omega$, si et seulement si $f = a\sqrt{f^2+g^2}$ et $g(x) = b\sqrt{f^2+g^2}$ presque partout, pour des constantes $a, b \in \mathbb{R}$ avec $a^2 + b^2 = 1$.

Nous remarquons que l'inégalité peut être réécrite sous la forme

$$|\nabla F(x)| \geq \left|\nabla |F|(x)\right|$$

pour toute fonction $F = f + ig$ à valeurs complexes. Lorsque $|F| > 0$ sur Ω, le cas d'égalité correspond alors à $F = e^{i\vartheta}|F|$ pour un $\vartheta \in [0, 2\pi[$. Rappelons que pour des fonctions mesurables, la condition $f^2 + g^2 > 0$ sur Ω signifie que pour toute boule B incluse dans Ω, on a $f^2 + g^2 \geq \varepsilon_B > 0$ presque partout sur B.

Preuve du lemme 70. Nous faisons la preuve en supposant que f et g sont C^1 avec $f^2 + g^2 > 0$ et renvoyons à [17, Thm. 7.8] pour la preuve dans $H^1(\Omega)$. Pour (53) c'est juste un argument par densité mais l'argument pour le cas d'égalité est un peu plus subtil. On calcule donc, simplement,

$$\begin{aligned}\left|\nabla\sqrt{f^2+g^2}(x)\right|^2 &= \frac{|f(x)\nabla f(x) + g(x)\nabla g(x)|^2}{f(x)^2+g(x)^2} \\ &= |\nabla f(x)|^2 + |\nabla g(x)|^2 - \frac{|g(x)\nabla f(x) - f(x)\nabla g(x)|^2}{f(x)^2+g(x)^2}.\end{aligned}$$

L'inégalité suit donc immédiatement et on a égalité si et seulement si $g\nabla f = f\nabla g$, lorsque le dénominateur ne s'annule pas. Or, un simple calcul montre que

$$\nabla(f/h)(x) = \frac{g(x)}{h(x)^3}\big(g(x)\nabla f(x) - f(x)\nabla g(x)\big)$$

et

$$\nabla(g/h)(x) = -\frac{f(x)}{h(x)^3}\big(g(x)\nabla f(x) - f(x)\nabla g(x)\big)$$

avec $h = \sqrt{f^2+g^2}$. Comme Ω est connexe, on en déduit bien que $f = ah$ et $g = bh$. La réciproque est évidente. □

Nous aurons besoin d'un deuxième outil très important.

Théorème 71 (Inégalité de Harnack)**.** *Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un ouvert connexe et $f \in H^2(\Omega)$ une fonction positive ou nulle sur Ω, qui vérifie l'inégalité*

$$-\Delta f + af \geq 0$$

presque partout sur Ω avec $a > 0$. Alors, pour tout $r > 0$ et tout $x \in \Omega$ situé à une distance au moins r de $\partial\Omega$, on a

$$f(x) \geq \frac{c(r,a)}{|B_r|}\int_{B_r(x)} f(y)\,dy \tag{54}$$

presque partout. Ici $c(r,a)$ est une constante strictement positive qui ne dépend que de r, a et de la dimension $d \geq 1$, alors que $B_r(x)$ est la boule de rayon r centrée en $x \in \mathbb{R}^d$. En particulier, l'inégalité (54) *implique que si $f \neq 0$, on doit alors avoir $f > 0$ sur Ω.*

Pour la preuve nous renvoyons à [17, Chap. 9]. L'idée est de résoudre explicitement l'équation $-\Delta J_{r,a} + aJ_{r,a} = 0$ sur la boule B_r (la fonction $J_{r,a} > 0$ est une fonction de Bessel, calculée dans [17]), puis d'utiliser un principe de comparaison pour en déduire (54), avec la constante $c(a,r) = J_{r,a}(r)^{-1} > 0$. Pour montrer que $f > 0$, on utilise un argument de continuation en recouvrant l'intérieur de Ω par des boules. Intuitivement, si f est continue et s'annule dans Ω, l'inégalité (54) sera violée en un point de la frontière de l'ensemble où $f > 0$.

Bien sûr, si on a

$$-\Delta f + af \geq 0$$

avec $a \leq 0$, on peut écrire

$$-\Delta f + f \geq (1-a)f \geq 0$$

et appliquer le théorème 71. L'hypothèse que a est positif dans l'énoncé n'est donc pas limitante.

Nous pouvons maintenant écrire la

Preuve du théorème 69. On appelle

$$q(f) = \int_\Omega |\nabla f|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta)} \int_{\partial\Omega} |f|^2$$

la forme quadratique du Laplacien de Robin $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$ et on remarque que l'inégalité (53) implique $q(f) \geq q(|f|)$. Soit donc f un vecteur propre associé à $\lambda_1(\theta)$, c'est-à-dire qui minimise q sous la contrainte que $\int_\Omega |f|^2 = 1$. Comme f et $|f|$ ont la même norme L^2, il est clair que $|f|$ minimise également q, ce qui implique que $|f|$ est également un vecteur propre associé à $\lambda_1(\theta)$, et que

$$\int_\Omega |\nabla f|^2 = \int_\Omega |\nabla |f||^2. \tag{55}$$

En particulier, on a $|f| \in D(-\Delta_{\mathrm{R},\theta}) \subset H^2(\Omega)$ et

$$-\Delta |f|(x) = \lambda_1(\theta)|f|(x), \qquad x \in \Omega.$$

Comme expliqué précédemment, on peut maintenant ajouter une grande constante $a > |\lambda_1(\theta)|$ et obtenir

$$-\Delta |f|(x) + a|f|(x) = (a + \lambda_1(\theta))|f|(x) \geq 0, \qquad x \in \Omega.$$

La fonction $|f|$ est positive ou nulle et ne s'annule pas car elle est normalisée dans $L^2(\Omega)$. Le théorème 71 implique alors que $|f| > 0$ sur Ω, et l'égalité (55) implique, d'après le lemme 70, que $f = e^{i\vartheta}|f|$ avec $|f| > 0$. Nous avons donc montré que, modulo une phase, toutes les fonctions propres sont strictement positives.

Pour finir la preuve, nous considérons deux fonctions f et g strictement positives et normalisées dans $L^2(\Omega)$, pour lesquelles q est minimale et nous remarquons que

$$q\left(\sqrt{\frac{f^2+g^2}{2}}\right) \leq \frac{q(f)}{2} + \frac{q(g)}{2} = \lambda_1(\theta)$$

en utilisant à nouveau (53). Ainsi, nous voyons que $h = \sqrt{\frac{f^2+g^2}{2}}$ est également un minimiseur et on doit avoir une fois de plus

$$\int_\Omega \left| \nabla \sqrt{\frac{f^2+g^2}{2}} \right|^2 = \frac{1}{2}\int_\Omega f^2 + \frac{1}{2}\int_\Omega g^2.$$

Le cas d'égalité dans le lemme 70 implique à nouveau $f = a\sqrt{f^2+g^2}$ et $g = b\sqrt{f^2+g^2}$ et, comme toutes les fonctions sont normalisées dans $L^2(\Omega)$, il est clair que $a = b = 1/\sqrt{2}$. Ainsi $f = g$.

Pour conclure nous avons bien montré que l'espace propre et de dimension 1 : si $f_0 > 0$ est un vecteur propre positif fixé associé à $\lambda_1(\theta)$ et g en est un autre, alors $g = e^{i\vartheta}|g|$ et $|g| = f_0$ donc $g = e^{i\vartheta} f_0$. □

11 Un peu de régularité

Nous discutons ici rapidement la régularité des solutions aux équations $(-\Delta + a)f = g$ et $-\Delta f = \lambda f$, pour les différentes réalisations auto-adjointes du Laplacien que nous avons construites. Nous avons vu au théorème 28 que les fonctions satisfaisant la condition de Robin et telles que $\Delta f \in L^2(\Omega)$ étaient nécessairement dans $H^2(\Omega)$. Ceci est vrai à condition que $\partial\Omega$ soit de classe C^2, ou que $\partial\Omega$ soit constitué d'une union de sous-variétés de co-dimension 1 tel que Ω soit strictement convexe au voisinage des coins. Ce résultat peut se généraliser à des régularités plus fortes, au moins pour un domaine lisse.

Théorème 72 (Haute régularité elliptique, Ω régulier)**.** *Soit Ω un ouvert dont la frontière est de classe C^{k+2} avec $k \geq 1$ et $0 \leq \theta < 1$. Alors, il existe une constante $C(\Omega, \theta, k)$ (ne dépendant que de Ω, θ et k) telle que si $f \in H^2(\Omega)$ satisfait la condition de Robin*

$$\cos(\pi\theta)\, f_{|\partial\Omega} + \sin(\pi\theta)\, \partial_n f_{|\partial\Omega} = 0, \tag{56}$$

et $\Delta f \in H^k(\Omega)$, alors $f \in H^{k+2}(\Omega)$ avec l'estimée

$$\|f\|_{H^{k+2}(\Omega)} \leq C(\Omega, \theta, k) \Big(\|f\|_{L^2(\Omega)} + \|\Delta f\|_{H^k(\Omega)} \Big). \tag{57}$$

La preuve est essentiellement la même que celle du théorème 72, voir par exemple [2, Thm. IX.25] pour le cas du Laplacien de Dirichlet et [18] pour le cas général. En raisonnant par récurrence sur l'équation aux valeurs propres $-\Delta_{\mathrm{R},\theta} f = \lambda f$, on trouve immédiatement le résultat suivant.

Corollaire 73 (Régularité des fonctions propres, Ω régulier)**.** *Soit Ω un ouvert dont la frontière est de classe C^{k+2} avec $k \geq 1$ et $0 \leq \theta < 1$. Alors, les fonctions propres du Laplacien de Robin $-\Delta_{\mathrm{R},\theta}$ sont toutes dans $H^{k+2}(\Omega)$.*

Le résultat de haute régularité elliptique ne s'étend pas de façon immédiate aux domaines qui ne sont pas lisses, à cause des singularités du bord. De façon générale on s'attend à ce que la régularité maximale attendue dépende de l'angle maximal entre les différentes faces, ce que nous expliquerons plus en détail ci-dessous. Avant d'entrer dans ces considérations plus techniques, commençons cependant par le cas du Laplacien périodique et de Born-von Karman sur un cube, pour lequel les fonctions propres $e^{i(p+k)\cdot x}$ calculées à la section 4 sont bien sûr C^∞.

Théorème 74 (Haute régularité elliptique, Laplaciens périodique et de Born–von Karman)**.** *Soit Ω la cellule unité du réseau $\mathscr{L}$, $\xi \in \Omega^*$ (la cellule unité de $\mathscr{L}^*$) et $-\Delta_{BK,\xi}$ le Laplacien de Born-von Karman, tous définis à la section 4. Si $f \in D(-\Delta_{BK,\xi})$ est telle que $-\Delta f \in H^k(\Omega)$, alors $f \in H^{k+2}(\Omega)$ avec l'estimée*

$$\|f\|_{H^{k+2}(\Omega)} \leq C(k) \Big(\|f\|_{L^2(\Omega)} + \|\Delta f\|_{H^k(\Omega)} \Big). \tag{58}$$

Démonstration. La preuve suit immédiatement du fait que

$$\begin{aligned}\|f\|^2_{H^\ell(\Omega)} &= \sum_{|\alpha_p|\le\ell}\sum_{p\in 2\pi\mathbb{Z}^d}\prod_{j=1}^{d}|p_j+\xi_j|^{2(\alpha_p)_j}|c_p(f)|^2\\ &\le C(\ell)\sum_{p\in 2\pi\mathbb{Z}^d}(1+|p|^{2\ell})|c_p(f)|^2\\ &\le C'(\ell)\big(\,\|f\|^2_{L^2(\Omega)}+\|\Delta f\|^2_{H^\ell(\Omega)}\,\big),\end{aligned}$$

où $c_p(f)=|\Omega|^{-1/2}\int_\Omega f(x)e^{-i(p+\xi)\cdot x}$ est le $p$ième coefficient de Fourier de f. □

Passons maintenant au cas d'un domaine qui peut avoir des coins. Afin de comprendre ce qu'il peut se passer, il est utile de faire un calcul explicite en dimension $d=2$, sur un secteur angulaire d'ange φ_0

$$\Omega_{\varphi_0}=\big\{x=r(\cos(\varphi),\sin(\varphi))\in\mathbb{R}^2\ :\ 0\le r\le 1,\ 0\le\varphi\le\varphi_0\big\},$$

comme à la figure 5, et qui servira de prototype "local" pour les coins de tout domaine $\Omega\subset\mathbb{R}^2$. On cherche des solutions de l'équation aux valeurs propres $-\Delta f=\lambda f$ qui sont factorisées sous la forme $f(r,\varphi)=u(r)v(\varphi)$ avec la condition de Dirichlet $u(0)=u(1)=v(0)=v(\varphi_0)=0$. En utilisant la formule du Laplacien en coordonnées cylindriques, on trouve facilement que $v(\varphi)=\sin(n\pi\varphi/\varphi_0)$ et que u doit résoudre l'équation différentielle

$$r^2u''(r)+r\,u'(r)+\left(\lambda r^2-\frac{n^2\pi^2}{\varphi_0^2}\right)u(r)=0.$$

L'unique solution qui admet une limite en $r=0$ s'exprime sous la forme

$$u(r)=J_{n\pi/\varphi_0}(\sqrt{\lambda}r)$$

où

$$J_\alpha(r)=\sum_{m\ge 0}\frac{(-1)^m}{m!\Gamma(m+\alpha+1)2^{2m+\alpha}}r^{2m+\alpha}$$

est la fonction de Bessel du premier type. En ajoutant la contrainte que $u(1)=0$, nous en déduisons donc que les fonctions propres du Laplacien de Dirichlet sur le secteur angulaire sont données par la formule

$$f_{n,\ell}(r,\varphi)=J_{n\pi/\varphi_0}\left(\sqrt{\lambda_{n,\ell}}r\right)\ \sin\left(\frac{n\pi\varphi}{\varphi_0}\right),\tag{59}$$

où, pour chaque entier $n\ge 1$, les valeurs propres $\lambda_{n,\ell}$ sont déterminées par la condition que $J_{n\pi/\varphi_0}(\sqrt{\lambda_{n,\ell}})=0$, c'est-à-dire les valeurs propres sont les carrés des zéros de $J_{n\pi/\varphi_0}$, pour chaque $n\ge 1$. Par exemple, la première fonction propre, qui est positive d'après le théorème 69, est associée à la valeur propre égale au carré du premier zéro de la fonction J_{π/φ_0} (qui correspond à prendre $n=1$).

Le résultat est similaire pour le Laplacien de Neumann, dont les fonctions propres peuvent s'écrire

$$g_{n,\ell}(r,\varphi)=J_{n\pi/\varphi_0}\left(\sqrt{\lambda_{n,\ell}}r\right)\ \cos\left(\frac{n\pi\varphi}{\varphi_0}\right)\tag{60}$$

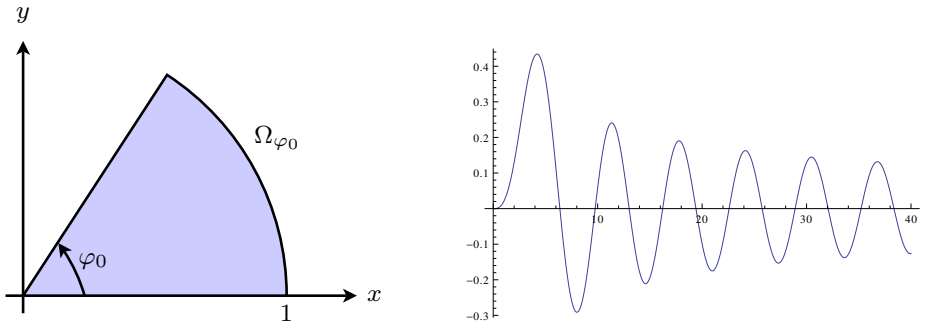


FIGURE 5 – Les fonctions et valeurs propres du Laplacien sur un secteur d'angle φ_0 (gauche) peuvent s'exprimer à l'aide de la fonction de Bessel $J_{n\pi/\varphi_0}$ dessinée à droite pour $\varphi_0 = \pi/3$ et $n = 1$.

où les $\lambda_{n,\ell}$ sont cette fois choisis de sorte que $J'_{n\pi/\varphi_0}(\sqrt{\lambda_{n,\ell}}) = 0$, en autorisant cette fois $n = 0$ qui correspond à la fonction constante. Le cas du Laplacien de Robin est également du même type.

Exercice 75. *Écrire le détails des arguments menant aux formules* (59) *et* (60).

Nous pouvons maintenant lire la régularité des fonctions propres du Laplacien de Dirichlet dans le secteur Ω_{φ_0} sur la formule (59). En effet, la fonction de Bessel $J_\alpha(r)$ est égale à r^α multipliée par une fonction entière du paramètre $r^2 = x^2 + y^2$ (donc $C^\infty(\Omega_{\varphi_0})$) et c'est donc le terme

$$r^{n\pi/\varphi_0} \sin\left(\frac{n\pi\varphi}{\varphi_0}\right)$$

qui détermine toute la régularité des fonctions propres. Si $\pi/\varphi_0 = m$ est un entier, alors il est facile de vérifier que $r^{nm}\sin(nm\varphi)$ est un polynôme en $x = r\cos\varphi$ et $y = r\sin\varphi$, et ainsi la fonction propre correspondante est C^∞. Par contre, si π/φ_0 n'est pas un entier, la fonction propre est dans H^s au voisinage de 0 seulement pour $s < \pi/\varphi_0 + 1$. Le théorème de régularité elliptique ne peut donc pas être vrai au delà de $\pi/\varphi_0 + 1$ dans ce cas.

Remarquons que si l'angle φ_0 est strictement supérieur à π (cas d'un angle rentrant), alors la première fonction propre n'est même pas dans $H^2(\Omega)$! Ceci est l'explication de la condition que Ω est strictement convexe au voisinage des singularités de $\partial\Omega$, que nous avons imposée dans le théorème 28 de régularité elliptique et dans notre construction du Laplacien de Dirichlet. Pour un secteur angulaire rentrant, le théorème 28 est faux, comme le montre l'exemple de la fonction (59). En fait, pour un angle rentrant nous n'avons pas défini le Laplacien de Dirichlet. Cet opérateur peut être construit en utilisant la méthode de Friedrichs du Théorème 52, ou le fait que les fonctions propres (59) sont connues et forment une base de $L^2(\Omega_{\varphi_0})$ et en appliquant l'exercice 36. Son domaine n'est alors pas inclus dans $H^2(\Omega_{\varphi_0})$. Nous n'en dirons pas plus ici.

Exercice 76 (Laplacien de Dirichlet pour un angle rentrant)**.** *Montrer que les fonctions $f_{n,\ell}$ forment une base orthonormale de $L^2(\Omega_{\varphi_0})$. Construire l'opérateur $-\Delta_{\mathrm{R},0}$ pour le secteur angulaire Ω_{φ_0} avec $\pi < \varphi_0 < 2\pi$, en utilisant l'exercice 36. Discuter également du Laplacien de Robin.*

Pour un ouvert en dimension 2 qui est composée de courbes très lisses qui s'intersectent en des coins d'angles $< \pi$, il est possible d'utiliser localement la régularité trouvée pour un secteur angulaire exact et d'en déduire le résultat suivant.

Théorème 77 (Haute régularité elliptique, Ω à coins)**.** *Soit Ω un ouvert borné de $\mathbb{R}^2$ dont la frontière est composée d'un nombre fini de courbes de classe C^{k+2} qui s'intersectent deux à deux avec des angles $\varphi_1, ..., \varphi_K \in]0, \pi[$. Alors le théorème 72 de régularité elliptique reste vrai pour tout*

$$k + 1 < \min \left\{ \frac{\pi}{\varphi_j}, \quad \frac{\pi}{\varphi_j} \notin \mathbb{N} \right\}.$$

La preuve de ce théorème consiste à localiser au voisinage des coins, voir par exemple [8, 7].

L'analyse décrite rapidement ici en dimension 2 s'étend aux dimensions plus grandes. Ainsi, la régularité maximale à l'intersection transverse de deux hypersurfaces dépendra de l'angle maximal le long de l'intersection, alors qu'aux coins la situations est plus complexe [11, 14]. Ces questions très importantes et qui vont jouer un rôle à la section suivante peuvent néanmoins devenir très techniques et nous n'en dirons pas plus ici.

12 Auto-adjonction des opérateurs de Schrödinger

L'objectif de cette section est d'étudier à quelle condition un opérateur sous la forme $A+B$ est auto-adjoint sur le même domaine $D(A)$ que l'opérateur auto-adjoint A, puis d'appliquer ceci au cas où $A = -\Delta$ et $B = V(x)$ est l'opérateur de multiplication par une fonction. Le résultat principal est le suivant.

Théorème 78 (Rellich-Kato)**.** *Soit A un opérateur auto-adjoint sur son domaine $D(A)$ et B un opérateur symétrique sur $D(A)$. S'il existe $0 \leq \alpha < 1$ et $C > 0$ tels que*

$$\|Bv\|_{\mathfrak{H}} \leq \alpha \|Av\|_{\mathfrak{H}} + C\|v\|_{\mathfrak{H}}, \qquad \forall v \in D(A), \tag{61}$$

alors l'opérateur $A + B$ est auto-adjoint sur $D(A)$.

Démonstration. Comme $A + B$ est par hypothèse symétrique sur $D(A)$, il suffit de montrer que $A + B \pm i\mu$ est surjectif de $D(A)$ dans $\mathfrak{H}$ pour un certain $\mu \in \mathbb{R}$, d'après le théorème 10. On écrit alors

$$A + B + i\mu = \Big(1 + B(A + i\mu)^{-1}\Big)(A + i\mu).$$

Comme l'opérateur $A + i\mu$ est inversible de $D(A)$ dans $\mathfrak{H}$ pour tout $\mu \in \mathbb{R}$, puisque A est auto-adjoint, il suffit de prouver que $1+B(A+i\mu)^{-1}$ est inversible sur $\mathfrak{H}$. Comme nous l'avons rappelé dans la preuve du lemme 4, il suffit pour cela de trouver μ tel que

$$\left\|B(A + i\mu)^{-1}\right\| < 1.$$

En appliquant l'inégalité (61), on déduit que

$$\left\|B(A + i\mu)^{-1}v\right\|_{\mathfrak{H}} \leq \alpha \left\|A(A + i\mu)^{-1}v\right\|_{\mathfrak{H}} + C \left\|(A + i\mu)^{-1}v\right\|_{\mathfrak{H}},$$

ce fournit l'inégalité sur les normes d'opérateurs

$$\left\|B(A+i\mu)^{-1}\right\| \leq \alpha \left\|A(A+i\mu)^{-1}\right\| + C \left\|(A+i\mu)^{-1}\right\|.$$

Comme vu plusieurs fois précédemment, il est utile de rappeler que

$$\|(A+i\mu)v\|_{\mathfrak{H}}^2 = \|Av\|_{\mathfrak{H}}^2 + \mu^2 \|v\|_{\mathfrak{H}}^2, \qquad \forall v \in D(A),$$

ce qui implique

$$\|v\|_{\mathfrak{H}}^2 = \left\|A(A+i\mu)^{-1}v\right\|_{\mathfrak{H}}^2 + \mu^2 \left\|(A+i\mu)^{-1}v\right\|_{\mathfrak{H}}^2, \qquad \forall v \in \mathfrak{H},$$

et donc

$$\left\|A(A+i\mu)^{-1}\right\| \leq 1, \qquad \left\|(A+i\mu)^{-1}\right\| \leq \frac{1}{|\mu|}.$$

Pour conclure, nous avons

$$\left\|B(A+i\mu)^{-1}\right\| \leq \alpha + \frac{C}{|\mu|}$$

qui est bien strictement inférieur à 1 pour μ assez grand. □

Remarque 79. *Si A a son spectre minoré, alors sous les hypothèses du théorème 78, $A+B$ aura aussi un spectre minoré. Il suffit en effet d'utiliser exactement la même preuve, en remplaçant $i\mu$ par $\mu \in \mathbb{R}$ très grand. On doit utiliser le fait que si A a un spectre minoré, alors*

$$\left\|A(A+\mu)^{-1}\right\| \leq 1 + \frac{C}{\mu}, \qquad \left\|(A+\mu)^{-1}\right\| \leq \frac{C}{\mu}, \tag{62}$$

pour μ assez grand, ce qui suit du théorème spectral [9].

Exercice 80. *Si A est diagonalisable dans une base orthonormée et que son spectre est minoré, montrer* (62) *en diagonalisant A.*

Nous voulons appliquer cette technique pour étudier les opérateurs sous la forme $-\Delta+V(x)$ dans $H^2(\mathbb{R}^d)$. Il faut pouvoir contrôler $\|Vf\|$ par $f \in H^2(\mathbb{R}^d)$, ce qui est l'objet du théorème suivant.

Théorème 81 (Potentiels infinitésimalement bornés)**.** *Soit $V \in L^p(\mathbb{R}^d)$ telle que*

$$\begin{cases} p \geq 2 & si\ d = 1,2,3, \\ p > 2 & si\ d = 4, \\ p \geq \frac{d}{2} & si\ d \geq 5. \end{cases} \tag{63}$$

Pour tout $\varepsilon > 0$, il existe une constante C_ε telle que

$$\|Vf\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq \varepsilon \|\Delta f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} + C_\varepsilon \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}, \qquad \forall f \in H^2(\mathbb{R}^d). \tag{64}$$

et

$$\left|\int_{\mathbb{R}^d} V(x)|f(x)|^2\,dx\right| \leq \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla f(x)|^2\,dx + C_\varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^2\,dx, \quad \forall f \in H^1(\mathbb{R}^d). \tag{65}$$

Sur un ouvert Ω dont la frontière est Lipschitzienne, on a les inégalités

$$\|Vf\|_{L^2(\Omega)} \leq \varepsilon \|f\|_{H^2(\Omega)} + C_\varepsilon \|f\|_{L^2(\Omega)}, \qquad \forall f \in H^2(\Omega). \tag{66}$$

et

$$\left| \int_\Omega V(x)|f(x)|^2 \, dx \right| \leq \varepsilon \int_\Omega |\nabla f(x)|^2 \, dx + C_\varepsilon \int_\Omega |f(x)|^2 \, dx, \quad \forall f \in H^1(\Omega). \tag{67}$$

Lorsqu'une fonction V vérifie (64) on dit qu'elle est infinitésimalement bornée par rapport au Laplacien.

Démonstration. La preuve suit des injections de Sobolev rappelées à l'appendice A au théorème 118. En dimension $d \neq 4$, il suffit de prouver l'inégalité pour $p = \max(2, d/2)$. En effet, lorsque $V \in L^p(\mathbb{R}^d)$ avec $2 < p \leq \infty$, on peut écrire

$$V = V\mathbb{1}(|V| \leq R) + V\mathbb{1}(|V| \geq R) := V_1 + V_2$$

où $V_1 \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$ et $V_2 \in L^{\max(2,d/2)}(\mathbb{R}^d)$ puisque

$$\int_{\mathbb{R}^d} |V_2|^2 = \int_{|V| \geq R} |V|^2 \leq R^{p-\max(2,d/2)} \int_{\mathbb{R}^d} |V|^p.$$

En écrivant alors

$$\|Vf\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq R \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} + \|V_2 f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}$$

on est bien ramené au cas de $p = \max(2, d/2)$ avec la fonction V_2.

Supposons donc maintenant $p = 2$ et $d \leq 3$. On écrit

$$\|Vf\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq \|V\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \|f\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)}.$$

En utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on écrit

$$\begin{aligned}
\|f\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} &\leq (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} |\widehat{f}(\xi)| \, d\xi \\
&\leq (2\pi)^{-d/2} \left(\int_{\mathbb{R}^d} (1+|\xi|^2)^\beta |\widehat{f}(\xi)|^2 \, d\xi \right)^{1/2} \left(\int_{\mathbb{R}^d} \frac{1}{(1+|\xi|^2)^\beta} \, d\xi \right)^{1/2} \\
&= C \left(\int_{\mathbb{R}^d} (1+|\xi|^2)^\beta |\widehat{f}(\xi)|^2 \, d\xi \right)^{1/2}
\end{aligned}$$

pour $d/2 < \beta < 2$. Pour tout $\varepsilon > 0$, il existe une constante C_ε telle que

$$(1+|\xi|^2)^\beta \leq \varepsilon (1+|\xi|^2)^2 + C_\varepsilon$$

ce qui implique bien que

$$\begin{aligned}
\|f\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} &\leq \varepsilon \|(1-\Delta)f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} + C_\varepsilon \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \\
&\leq \varepsilon \|\Delta f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} + (\varepsilon + C_\varepsilon) \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}.
\end{aligned}$$

En dimension $d \geq 5$ il faut utiliser l'inégalité de Sobolev

$$\|f\|_{L^{\frac{2d}{d-4}}(\mathbb{R}^d)} \leq C \|\Delta f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}$$

qui se prouve comme le théorème 114 (exercice 117). On a en particulier

$$\|Vf\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq \|V\|_{L^{d/2}(\mathbb{R}^d)} \|f\|_{L^{\frac{2d}{d-4}}(\mathbb{R}^d)} \leq C \|V\|_{L^{d/2}(\mathbb{R}^d)} \|\Delta f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}.$$

Malheureusement, cet argument ne peut pas fournir une constante aussi petite que l'on veut. L'astuce consiste à écrire encore une fois

$$V = V\mathbb{1}(|V| \leq R) + V\mathbb{1}(|V| \geq R)$$

et d'utiliser

$$\|Vf\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq R\|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} + C \|V\mathbb{1}(|V| \geq R)\|_{L^{d/2}(\mathbb{R}^d)} \|\Delta f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}.$$

Par convergence dominée,

$$\|V\mathbb{1}(|V| \geq R)\|_{L^{d/2}(\mathbb{R}^d)} \underset{R\to\infty}{\longrightarrow} 0,$$

ce qui permet d'avoir une constante plus petite que ε quand R est assez grand.

La preuve dans le cas $d = 4$ est similaire au premier cas et laissée en exercice. La preuve dans un ouvert Ω est très semblable et peut aussi être obtenue à partir du cas de $\mathbb{R}^d$ en utilisant l'opérateur de prolongement du théorème 113. Finalement, les inégalités (65) et (67) suivent immédiatement de la remarque 79 mais elles peuvent aussi se démontrer par des arguments similaires à ceux expliqués ici, dans $H^1(\mathbb{R}^d)$ au lieu de $H^2(\mathbb{R}^d)$. Les conditions (63) sur V ne sont d'ailleurs pas optimales dans ce cas (en dimension $d \leq 3$). □

Exercice 82. *Écrire la preuve du théorème 81 en dimension $d = 4$.*

Exercice 83. *Écrire la preuve de l'inégalité* (66) *dans un ouvert borné Ω.*

Exercice 84. *Écrire la preuve des inégalités* (65) *et* (67).

Le résultat suivant est une simple conséquence du théorème précédent et du théorème 78 de Rellich-Kato.

Corollaire 85 (Auto-adjonction des opérateurs de Schrödinger)**.** *Soit $V \in L^p(\mathbb{R}^d) + L^\infty(\mathbb{R}^d)$ une fonction à valeurs réelles, avec*

$$\begin{cases} p = 2 & \text{si } d = 1, 2, 3, \\ p > 2 & \text{si } d = 4, \\ p = \frac{d}{2} & \text{si } d \geq 5. \end{cases}$$

Alors l'opérateur $f \mapsto -\Delta f + Vf$ est auto-adjoint sur $D(-\Delta) = H^2(\mathbb{R}^d)$ et son spectre est minoré.

Démonstration. Comme la fonction V est réelle, $f \mapsto Vf$ est symétrique. Par ailleurs cet opérateur est bien défini sur $H^2(\mathbb{R}^d)$ d'après (64). On écrit alors $V = V_1 + V_2$ avec $V_2 \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$ et $V_1 \in L^p(\mathbb{R}^d)$ et on applique (64) pour obtenir

$$\begin{aligned} \|Vf\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} &\leq \|V_1 f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} + \|V_2\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \\ &\leq \varepsilon \|\Delta f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} + C_\varepsilon \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}, \end{aligned}$$

pour tout $f \in H^2(\mathbb{R}^d)$. Le résultat suit alors du théorème 78 de Rellich-Kato. Pour la minoration du spectre, on utilise le corollaire 14 et l'inégalité

$$\begin{aligned}\langle f, (-\Delta + V)f\rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} &= \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla f(x)|^2\,dx + \int_{\mathbb{R}^d} V(x)|f(x)|^2\,dx \\ &\geq (1-\varepsilon)\int_{\mathbb{R}^d} |\nabla f(x)|^2\,dx - C_\varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^2\,dx \\ &\geq -C_\varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^2\,dx.\end{aligned}$$

□

Le théorème signifie que perturber le Laplacien par une fonction qui reste bornée à l'infini dans un sens faible (plus précisément une fonction qui s'écrit $V = V_1 + V_2$ avec $V_2 \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$ et $V_1 \in L^p(\mathbb{R}^d)$) ne change pas le domaine d'auto-adjonction. Les opérateurs sous la forme $A = -\Delta + V$ s'appellent *opérateurs de Schrödinger* car ils interviennent dans la description d'une particule quantique non-relativiste évoluant dans un potentiel extérieur V, voir par exemple [3, 17].

Exemple 86. *L'atome d'hydrogène est décrit par le potentiel $V(x) = -|x|^{-1}$ en dimension $d = 3$. Comme $V \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$, on conclut que l'opérateur $-\Delta - |x|^{-1}$ est auto-adjoint sur $H^2(\mathbb{R}^3)$.*

Le corollaire 85 s'étend très facilement au cas d'un domaine borné.

Corollaire 87 (Auto-adjonction des opérateurs de Schrödinger sur Ω)**.** *Soit Ω un ouvert borné et $V \in L^p(\Omega)$ une fonction à valeurs réelles, avec*

$$\begin{cases} p = 2 & \text{si } d = 1, 2, 3, \\ p > 2 & \text{si } d = 4, \\ p = \frac{d}{2} & \text{si } d \geq 5. \end{cases}$$

Si Ω est la cellule unité d'un réseau $\mathscr{L} \subset \mathbb{R}^d$, l'opérateur

$$-\Delta_{\mathrm{BvK},\xi} + V(x)$$

est auto-adjoint sur le domaine $D(-\Delta_{\mathrm{BvK},\xi})$ du Laplacien de Born-von Karman défini à la section 4.

Si Ω satisfait les conditions de régularité du théorème 28, l'opérateur

$$-\Delta_{\mathrm{R},\theta} + V(x)$$

est auto-adjoint sur le domaine $D(-\Delta_{\mathrm{R},\theta})$ du Laplacien de Robin défini à la section 5.

Ces opérateurs sont tous à résolvante compacte et peuvent être diagonalisés dans une base orthonormée, avec des valeurs propres qui tendent vers $+\infty$.

Comme une fonction dans $L^r(\Omega)$ appartient automatiquement à $L^p(\Omega)$ pour $p \leq r$, nous avons pris simplement $p = \max(2, d/2)$ en dimension $d \neq 4$.

Démonstration. D'après (66), on a pour tout $f \in H^2(\Omega)$

$$\|Vf\|_{L^2(\Omega)} \leq \varepsilon \|f\|_{H^2(\mathbb{R}^d)} + C_\varepsilon \|f\|_{L^2(\Omega)}.$$

Lorsque f vérifie les conditions au bord de Born-von Karman, ou alors celles de Robin et que Ω satisfait les hypothèses du théorème 28, on a par régularité elliptique

$$\|f\|_{H^2(\mathbb{R}^d)} \leq C\big(\|\Delta f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} + \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}\big)$$

et ainsi

$$\|Vf\|_{L^2(\Omega)} \leq \varepsilon \|\Delta f\|_{H^2(\mathbb{R}^d)} + C_\varepsilon \|f\|_{L^2(\Omega)}$$

comme nous voulions. L'auto-adjonction suit à nouveau du théorème 78 de Rellich-Kato.

D'après la preuve du théorème de Rellich-Kato, on a pour μ assez grand

$$(-\Delta + V + i\mu)^{-1} = (-\Delta + i\mu)^{-1}\Big(1 + V(-\Delta + i\mu)^{-1}\Big)^{-1}.$$

L'opérateur tout à droite est borné et $(-\Delta+i\mu)^{-1}$ est compact, par les théorèmes 27 et 44. Comme la multiplication d'un opérateur compact par un opérateur borné est encore compact, on conclut bien que $-\Delta + V$ est à résolvante compacte.

Par l'exercice 80 ou par la même preuve que celle utilisée dans le corollaire 85, le spectre est minoré. Ainsi, les valeurs propres ne peuvent tendre que vers $+\infty$. □

13 Opérateurs périodiques et théorie de Floquet-Bloch

Nous étudions ici les opérateurs de Schrödinger périodiques, c'est-à-dire sous la forme $-\Delta + V(x)$ où V est une fonction périodique. Pour cela, il est utile de rappeler la définition de la transformée de Bloch, qui permet de diagonaliser ces opérateurs, tout comme la transformée de Fourier a permis de diagonaliser le Laplacien dans $\mathbb{R}^d$. Pour plus de détails concernant cette théorie, nous renvoyons par exemple à [20, Section XIII.6].

13.1 Théorie de Floquet-Bloch

Une interprétation possible de la transformée de Fourier est que la famille $(e^{ip\cdot x})_{p\in\mathbb{R}^d}$ forme une sorte de "base" de $L^2(\mathbb{R}^d)$. Bien sûr aucune des exponentielles $e^{ip\cdot x}$ n'est dans $L^2(\mathbb{R}^d)$ et la formule de reconstruction

$$f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{R^d} \widehat{f}(p) e^{ip\cdot x}\, dp$$

ne fait sens que si f est, par exemple, dans la classe de Schwartz $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$.

Une propriété importante des exponentielles $e^{ip\cdot x}$ est qu'elles sont des fonctions propres communes à tous les opérateurs de translation $(\tau_y f)(x) := f(x-y)$ (définis par exemple sur $L^\infty(\mathbb{R}^d)$). C'est pour cette raison que la transformée de Fourier est bien adapté à l'étude des opérateurs invariants par translations, comme le Laplacien.

On cherche une famille qui vérifie la même propriété lorsqu'on considère seulement les translations $(\tau_\ell)_{\ell\in\mathscr{L}}$ d'un réseau $\mathscr{L}$. On ne peut pas se contenter des $(e^{ik\cdot x})_{k\in\mathscr{L}^*}$ qui n'engendrent que les fonctions $\mathscr{L}$–périodiques, mais on peut considérer la famille à deux paramètres

$$(e^{i(k+\xi)\cdot x})_{\substack{k\in\mathscr{L}^* \\ \xi\in B}} \tag{68}$$

où B est par définition la cellule unité ouverte du réseau dual $\mathscr{L}^*$, appelée habituellement *zone de Brillouin*. Bien sûr, $k+\xi$ parcourt tout $\mathbb{R}^d$ (modulo la frontière de B) quand $k \in \mathscr{L}^*$ et $\xi \in B$. On cherche à décomposer f sur cette base. En partant de la transformée de Fourier habituelle, on écrit simplement

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} \widehat{f}(p) e^{ip\cdot x}\, dp \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \sum_{k\in\mathscr{L}^*} \int_B \widehat{f}(k+\xi) e^{i(k+\xi)\cdot x}\, dp, \end{aligned}$$

ce qui nous amène à poser

$$f_\xi(x) := \frac{1}{|C|^{1/2}} \sum_{k\in\mathscr{L}^*} \widehat{f}(k+\xi) e^{i(k+\xi)\cdot x}. \tag{69}$$

La constante

$$\frac{1}{|C|^{1/2}} = \frac{|B|^{1/2}}{(2\pi)^{d/2}}$$

est choisie pour que $e^{i(k+\xi)\cdot x}|C|^{-1/2}$ soit normalisée dans $L^2(C)$. Les manipulations précédentes sont justifiées lorsque $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$. Il est important de noter que la fonction f_ξ définie en (69) vérifie la condition de Born-von Karman

$$f_\xi(x+\ell) = f_\xi(x) e^{i\xi\cdot\ell}, \qquad \forall \ell \in \mathscr{L},$$

et seules ses valeurs sur la cellule unité C du réseau $\mathscr{L}$ sont alors importantes. Du coup, on peut aussi chercher quelle est la fonction dont les coefficients de Fourier valent $|C|^{-1/2}\widehat{f}(k+\xi)$, et on trouve une autre formule pour f_ξ :

$$\boxed{f_\xi(x) := \frac{1}{|C|^{1/2}} \sum_{k\in\mathscr{L}^*} \widehat{f}(k+\xi) e^{i(k+\xi)\cdot x} = \frac{1}{|B|^{1/2}} \sum_{\ell\in\mathscr{L}} f(\ell+x) e^{-i\xi\cdot\ell},} \tag{70}$$

puisque

$$\begin{aligned} \widehat{f}(k+\xi) &= \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} f(x) e^{-i(k+\xi)\cdot x}\, dx \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \sum_{\ell\in\mathscr{L}} \int_C f(\ell+y) e^{-i(k+\xi)\cdot(\ell+y)}\, dy \\ &= \frac{1}{|B|^{1/2}} \int_C \left(\sum_{\ell\in\mathscr{L}} f(\ell+y) e^{-i\xi\cdot\ell} \right) \frac{e^{-i(k+\xi)\cdot y}}{|C|^{1/2}}\, dy. \end{aligned}$$

La famille de fonction (f_ξ) introduite en (70) s'appelle la *transformée de Bloch* de f et elle est telle que

$$f(x) = \frac{1}{|B|^{1/2}} \int_B f_\xi(x)\, d\xi.$$

Cette formule de reconstruction est similaire à celle qui donne $f(x)$ en fonction de $\widehat{f}(p)e^{ip\cdot x}$. Mais, contrairement à la transformée de Fourier où $\widehat{f}(p)$ est juste un nombre complexe, $f_\xi(x)$ est ici une *fonction de* $x \in C$, qui ne se factorise pas sous une forme simple similaire à $\widehat{f}(p)e^{ip\cdot x}$.

Théorème 88 (Parseval)**.** *Pour tout $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, on a la formule de Parseval*

$$\int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^2 \, dx = \int_B \left(\int_C |f_\xi(y)|^2 \, dy \right) d\xi, \tag{71}$$

qui permet d'étendre la transformée de Bloch en une unique isométrie

$$f \in L^2(\mathbb{R}^d) \mapsto (f_\xi) \in L^2(B, L^2(C)).$$

Démonstration. Pour $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ on écrit

$$\begin{aligned}
\int_B \left(\int_C |f_\xi(y)|^2 \, dy \right) d\xi &= \frac{1}{|B|} \sum_{\ell, \ell' \in \mathscr{L}} \int_B e^{i\xi \cdot (\ell' - \ell)} \, d\xi \int_C \overline{f(\ell' + y)} f(\ell + y) \, dy \\
&= \sum_{\ell \in \mathscr{L}} \int_C |f(\ell + y)|^2 \, dy \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^2 \, dx.
\end{aligned}$$

□

Nous voyons donc que la transformée de Bloch a des propriétés similaires à la transformée de Fourier sur L^2. Dans cet espace on ne voit pas les conditions au bord, alors que pourtant la fonction f_ξ vérifie la condition de Born-von Karman au bord de la cellule unité C, lorsque $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$. Cette condition au bord n'est visible que si on travaille avec des espaces un peu plus réguliers comme les espaces de Sobolev. Dans l'énoncé suivant, nous appelons

$$\begin{aligned}
H^k_{\mathrm{BvK},\xi}(C) := \Big\{ f \in H^k(C) \ : \ & \partial_n^j f(x + \ell) = \partial_n^j f(x) e^{i\xi \cdot \ell}, \\
& j = 0, ..., k-1, \ x \in \partial C, \ x + \ell \in \partial C \Big\}
\end{aligned}$$

la fermeture de l'espace des fonctions C^∞ vérifiant la condition de Born-von Karman, pour la norme de H^k. On a ainsi par exemple

$$H^k_{\mathrm{BvK},\xi}(C) = D(-\Delta_{\mathrm{BvK},\xi}),$$

le domaine du Laplacien de Born-von Karman étudié à la section 4. La norme de $H^k_{\mathrm{BvK},\xi}(C)$ est juste celle de $H^k(C)$.

Théorème 89 (Parseval pour les espaces de Sobolev)**.** *Pour tout $f \in H^k(\mathbb{R}^d)$, on a $f_\xi \in H^k_{\mathrm{BvK},\xi}(C)$ pour presque tout ξ, avec la formule de Parseval*

$$\|f\|^2_{H^k(\mathbb{R}^d)} \, dx = \int_B \left(\int_C \|f_\xi\|^2_{H^k_{\mathrm{BvK},\xi}(C)} \, dy \right) d\xi. \tag{72}$$

Démonstration. Il suffit de remarquer que $(\partial^\alpha f)_\xi = \partial^\alpha f_\xi$ pour toute fonction $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ et tout $\xi \in B$. Puis on applique la formule de Parseval (71) sans oublier de noter que f vérifie la condition au bord de Born-von Karman. □

Au contraire de la transformée de Fourier où la dérivation est transformée en une multiplication par $i\xi$, c'est-à-dire $\widehat{\nabla f}(k) = ik\widehat{f}$, la dérivation reste une dérivation dans la transformée de Bloch.

Remarque 90. *La fonction $(\xi, x) \mapsto f_\xi(x)$ est $\mathscr{L}^*$–périodique en ξ et vérifie une condition de type Born-von Karman en x. Comme à la section 4, il peut être parfois intéressant de définir*

$$\tilde{f}_\xi(x) = f_\xi(x) e^{-ix\cdot\xi}$$

de sorte que $\tilde{f}_\xi$ soit maintenant périodique en x pour tout ξ. Ceci a pour effet de transformer la condition au bord en un potentiel électromagnétique, puisque

$$\widetilde{(\nabla f)}_\xi = (\nabla + i\xi)\tilde{f}_\xi.$$

Dans ce cas, $\xi \mapsto \tilde{f}_\xi(x)$ vérifie une condition de Born-von Karman. Il n'est pas possible d'utiliser une fonction qui soit périodique en x et en ξ en même temps.

13.2 Diagonalisation des opérateurs de Schrödinger périodiques

Nous étudions maintenant les opérateurs sous la forme $-\Delta + V(x)$ où $V(x)$ est une fonction périodique. Nous commençons par donner des conditions sur V pour qu'un tel opérateur soit auto-adjoint. Les résultats de la section 12 ne peuvent être appliqués directement car bien sûr une fonction périodique n'est jamais dans $L^p(\mathbb{R}^d)$.

Théorème 91 (Auto-adjonction des opérateurs périodiques)**.** *Soit V une fonction $\mathscr{L}$–périodique sur $\mathbb{R}^d$ et à valeurs réelles, telle que $V \in L^p(C)$ pour*

$$\begin{cases} p = 2 & si\ d = 1, 2, 3, \\ p > 2 & si\ d = 4, \\ p = \frac{d}{2} & si\ d \geq 5, \end{cases}$$

et où C est la cellule unité du réseau $\mathscr{L}$. Alors l'opérateur $-\Delta + V(x)$ est auto-adjoint sur $H^2(\mathbb{R}^d)$ et son spectre est minoré.

Démonstration. Comme précédemment, nous montrons que pour tout ε, il existe une constante C_ε telle que

$$\|Vf\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq \varepsilon \|\Delta f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} + C_\varepsilon \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}, \qquad \forall f \in H^2(\mathbb{R}^d), \tag{73}$$

et

$$\left| \int_{\mathbb{R}^d} V(x)|f(x)|^2\, dx \right| \leq \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla f(x)|^2\, dx + C_\varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^2\, dx, \quad \forall f \in H^1(\mathbb{R}^d). \tag{74}$$

Ces deux inégalités impliquent que l'opérateur $f \mapsto -\Delta f + Vf$ est auto-adjoint sur $D(-\Delta) = H^2(\mathbb{R}^d)$ et que son spectre est minoré.

Pour simplifier les notations, nous écrivons la preuve dans le cas où $\mathscr{L} = \mathbb{Z}^d$ et $C = (0, 1)$ est le cube unité. Soit alors χ une fonction à support compact qui vaut 1 sur C et s'annule en dehors de $(-1, 2)^d$. Nous introduisons $C_z := z + (0, 1)^d$, $C'_z = z + (-1, 2)^d$), et $\chi_z(x) = \chi(x - z)$. On a alors

$$\|Vf\|_{L^2(C_z)} \leq \|V\chi_z f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq \varepsilon \|\Delta(\chi_z f)\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} + C_\varepsilon \|\chi_z f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)},$$

où les constantes sont indépendantes de z. En effet, la preuve du théorème 81 nous informe qu'elles ne dépendent que de $\|V\mathbb{1}(|V| \geq R)\|_{L^{d/2}(C'_z)}$ qui est égal à $\|V\mathbb{1}(|V| \geq R)\|_{L^{d/2}(C')}$, par périodicité.

En écrivant

$$\Delta(\chi_z f) = \chi_z \Delta f + 2\nabla f \nabla \chi_z + f \Delta \chi_z$$

on trouve

$$\begin{aligned}\|Vf\|_{L^2(C_z)} \leq \varepsilon \|\chi\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \|\Delta f\|_{L^2(C'_z)} + 2\varepsilon \|\nabla \chi\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \|\nabla f\|_{L^2(C'_z)} \\ + \left(C_\varepsilon + \|\Delta \chi\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)}\right) \|f\|_{L^2(C'_z)}.\end{aligned}$$

L'estimée fait intervenir des normes de f sur le plus grand cube C'_z mais ceci ne pose pas de problème particulier. En effet, on peut maintenant écrire

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^d} V(x)^2 |f(x)|^2 \, dx &= \sum_{z \in \mathbb{Z}^d} \int_{C_z} V(x)^2 |f(x)|^2 \, dx \\ &\leq \sum_{z \in \mathbb{Z}^d} \bigg(\varepsilon^2 \int_{C'_z} |\Delta f(x)|^2 \, dx \\ &\qquad + C\varepsilon^2 \int_{C'_z} |\nabla f(x)|^2 \, dx + C \int_{C'_z} |f(x)|^2 \, dx \bigg) \\ &\leq 3^d \bigg(\varepsilon^2 \int_{\mathbb{R}^d} |\Delta f(x)|^2 \, dx \\ &\qquad + C\varepsilon^2 \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla f(x)|^2 \, dx + C \int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^2 \, dx \bigg),\end{aligned}$$

où le facteur 3^d vient de la présence du plus grand cube $C'_z = z + (-1, 2)^d$, ce qui a pour effet de compter 3^d fois chacun des cubes $C_z = z + (0, 1)^d$. Comme

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\nabla f(x)|^2 \, dx = \int_{\mathbb{R}^d} |\xi|^2 |\widehat{f}(\xi)|^2 \, d\xi \leq \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d} (1 + |\xi|^2)^2 |\widehat{f}(\xi)|^2 \, d\xi,$$

nous avons bien démontré (73). L'inégalité (74) suit encore de la remarque 79 mais on peut en donner une preuve directe très similaire à celle vue ici. □

Exercice 92. *Vérifier que la preuve précédente fonctionne sous l'hypothèse que $V \in L^p_{\mathrm{unif}}(\mathbb{R}^d)$, ce qui signifie que*

$$\sup_{z \in \mathbb{Z}^d} \|V\|_{L^p(C_z)} < \infty,$$

mais avec la condition plus forte que $p > d/2$ en dimension $d \geq 5$.

Nous sommes maintenant prêts à diagonaliser les opérateurs de Schrödinger périodiques. La propriété la plus importante est qu'un tel opérateur commute avec la transformée de Floquet-Bloch, c'est-à-dire que

$$\Big((-\Delta + V)f\Big)_\xi(x) = -\Delta f_\xi(x) + V(x) f_\xi(x). \tag{75}$$

Le fait que $(\Delta f)_\xi = \Delta f_\xi$ a déjà été vu au théorème 89, tandis que la propriété $(Vf)_\xi = V f_\xi$ est évidente à partir de la définition (70), puisque $V(x+\ell) = V(x)$. Le résultat principal est résumé dans l'énoncé suivant.

Théorème 93 (Diagonalisation des opérateurs de Schrödinger périodiques)**.** *Soit V une fonction $\mathscr{L}$–périodique sur $\mathbb{R}^d$ à valeurs réelles, telle que $V \in L^p(C)$ pour*

$$\begin{cases} p = 2 & \text{si } d = 1, 2, 3, \\ p > 2 & \text{si } d = 4, \\ p = \frac{d}{2} & \text{si } d \geq 5, \end{cases}$$

et où C est la cellule unité du réseau $\mathscr{L}$. On note $(-\Delta + V)_\xi$ l'opérateur défini par $(-\Delta + V)_\xi f = -\Delta f + Vf$ sur le domaine $H^2_{\mathrm{BvK},\xi}(C) = D(-\Delta_{\mathrm{BvK},\xi}) \subset L^2(C)$.

(i) *Pour tout $\xi \in B$, l'opérateur $(-\Delta + V)_\xi$ est auto-adjoint et à résolvante compacte.*

(ii) *Son spectre est composé d'une suite ordonnée de valeurs propres $\lambda_n(\xi)$ comptées avec multiplicité, qui tendent vers $+\infty$ quand $n \to \infty$.*

(iii) *Pour chaque $n \geq 1$, $\xi \mapsto \lambda_n(\xi)$ est une fonction continue sur $\overline{B}$.*

(iv) *Le spectre de l'opérateur $-\Delta + V(x)$ défini au théorème 91 vaut*

$$\sigma(-\Delta + V)_{H^2(\mathbb{R}^d)} = \bigcup_{n \geq 1} \lambda_n(\overline{B}), \tag{76}$$

où la bande $\lambda_n(\overline{B}) = \left[\min_{\overline{B}} \lambda_n \, , \, \max_{\overline{B}} \lambda_n \right]$ est l'image de la fonction continue λ_n sur le compact $\overline{B}$.

Le théorème précise que le spectre de l'opérateur $-\Delta + V$ défini sur tout l'espace $\mathbb{R}^d$ peut s'obtenir à partir des valeurs propres des opérateurs $(-\Delta+V)_\xi$ définis sur l'ouvert borné C avec la condition de Born-von Karman, en faisant varier ξ dans la zone de Brillouin B. Plus précisément, le spectre est l'union de bandes qui sont les images des valeurs propres $\lambda_n(\xi)$ lorsque ξ varie dans B, comme représenté à la figure 6.

En physique de la matière condensée, les opérateurs du type $-\Delta+V$ décrivent des matériaux cristallins infinis et purs (sans défaut donc périodiques), dans lesquels les électrons peuvent se déplacer. En général on n'étudie pas un seul électron mais une infinité d'électrons, répartis périodiquement dans le réseau. À cause du principe de Pauli, ces derniers doivent "occuper toutes les énergies situées en dessous d'un niveau E". Sans donner plus de détails sur ce que signifie précisément cette contrainte, l'énergie E en question est trouvée en résolvant l'équation implicite

$$N = \int_B \sum_{n \geq 1} \mathbb{1}(\lambda_n(\xi) \leq E) \, d\xi,$$

où l'entier N est le nombre d'électrons dans chaque cellule unité [3]. On remarquera que la somme est finie puisque les $\lambda_n(\xi)$ tendent vers l'infini. Si

$$\max \lambda_N < \min \lambda_{N+1},$$

alors on peut prendre pour E n'importe quelle constante entre ces deux nombres. On dit qu'il y a un trou spectral et ceci correspond physiquement à un matériau qui est un *isolant*. À la figure 6, c'est par exemple le cas de $N = 1$ et $N = 3$ avec les énergies E_1 et E_3, au dessus des bandes 1 et 3. En revanche, si

$$\min \lambda_{N+1} \leq \max \lambda_N,$$

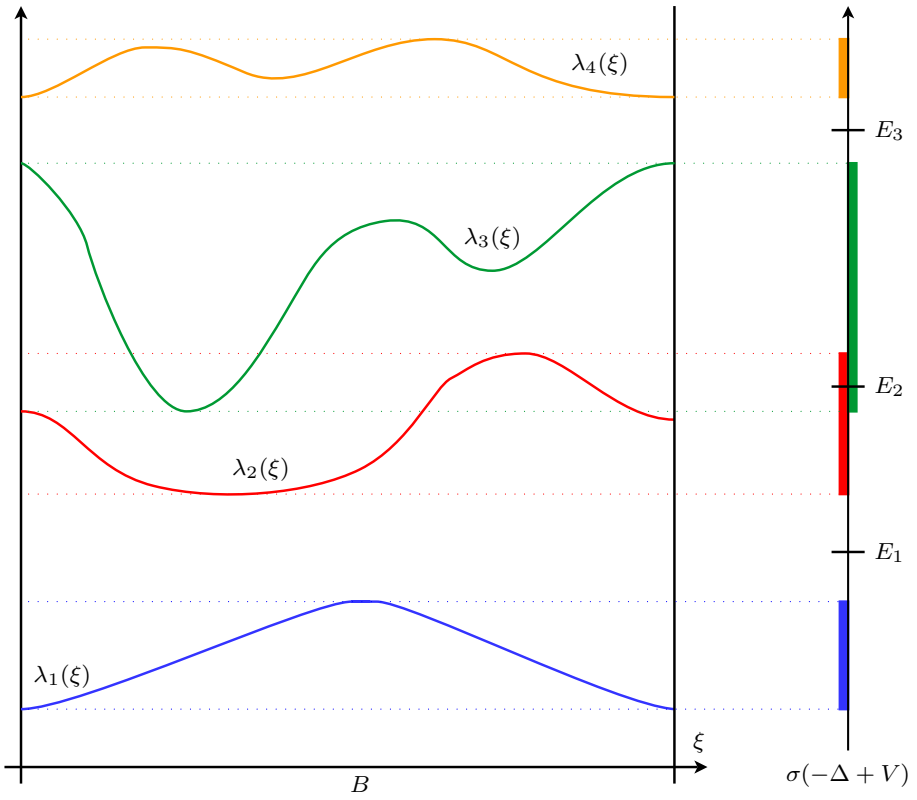


FIGURE 6 – Représentation schématique des valeurs propres $\lambda_n(\xi)$ de l'opérateur $(-\Delta + V)_\xi$ sur C avec la condition au bord de Born-von Karman, et lien avec le spectre de l'opérateur $-\Delta + V$ sur $\mathbb{R}^d$.

la valeur de E tombera dans le spectre de $-\Delta+V$, ce qui correspond à un *métal* et est illustré pour $N = 2$ avec l'énergie E_2 la figure 6. Dans un isolant, exciter les électrons pour les faire accéder aux énergies de la bande suivante coûte la valeur du trou spectral, alors que dans un métal, les électrons peuvent accéder au spectre au dessus de E en fournissant une quantité infime d'énergie. C'est ce qui explique les propriétés de conduction très différentes de métaux comparés aux isolants.

En utilisant l'analyticité de l'application $\xi \mapsto -|\nabla + i\xi|^2$ (en un sens approprié), il est possible de montrer que le spectre de $-\Delta + V$ ne contient *aucune valeur propre* [20]. En fait on peut montrer qu'une valeur propre correspondrait à avoir un $\lambda_n(\xi)$ constant sur un ensemble de mesure non nulle, ce qui est interdit par l'analyticité.

Il est cependant assez étonnant qu'une toute petite perturbation aléatoire puisse créer des valeurs propres en très grand nombre. Par exemple, tirons au hasard de façon indépendante et identiquement distribuée une perturbation $\delta(x)$ du potentiel $V(x)$ dans chaque cellule unité. Ceci correspond à prendre un potentiel aléatoire sous la forme

$$V'(\omega, x) = V(x) + \sum_{z \in \mathscr{L}} \omega_z \delta(x - z)$$

où les $(\omega_z)_{z\in\mathscr{L}}$ sont i.i.d. et suivent une loi de Bernouilli, c'est-à-dire $\omega_z = 1$ avec probabilité p et $\omega_z = 0$ avec probabilité $1-p$. Le spectre de l'opérateur perturbé $-\Delta+V'(\omega,x)$ n'est alors composé *que de valeurs propres* en dimension $d = 1$, ceci quelle que soit la taille de la fonction $\delta \neq 0$! En dimension $d \geq 2$, l'extrémité des bandes n'est composée que de valeurs propres. Ce phénomène appelé *localisation d'Anderson* [22] montre qu'un matériau avec des petits défauts aléatoires se comporte de façon très différente d'un matériau périodique parfait. Cependant, si la nature du spectre peut changer radicalement, le spectre ne bouge pas beaucoup en tant qu'ensemble et commencer par le cas périodique fournit déjà une bonne idée de la forme du spectre.

Nous passons maintenant à la preuve du théorème 93.

Démonstration. Sous les hypothèses mentionnées pour V, l'opérateur $-\Delta+V$ est auto-adjoint sur $H^2(\mathbb{R}^d)$ par le théorème 91. De même, pour tout $\xi \in B$, l'opérateur $(-\Delta+V)_\xi$ est auto-adjoint sur $H^2_{\mathrm{BvK},\xi}(C)$ qui est aussi le domaine du Laplacien de Born-von Karman, et à résolvante compacte, par le corollaire 87.

Pour prouver la continuité de $\lambda_n(\xi)$, on utilise la formulation de Courant-Fischer (37) du théorème 60, et la transformation $f(x) = \tilde{f}(x)e^{i\xi\cdot x}$ pour obtenir

$$\begin{aligned}\lambda_n(\xi) &= \min_{\substack{V\subset H^1_{\mathrm{BvK},\xi}(C)\\ \dim(V)=n}} \max_{\substack{f\in V\\ \int_C |f|^2=1}} \left\{ \int_C |\nabla f(x)|^2\,dx + \int_C V(x)|f(x)|^2\,dx \right\} \\ &= \min_{\substack{V\subset H^1_{\mathrm{per}}(C)\\ \dim(V)=n}} \max_{\substack{\tilde{f}\in V\\ \int_C |\tilde{f}|^2=1}} \left\{ \int_C |\nabla \tilde{f}(x) + i\xi\tilde{f}(x)|^2\,dx + \int_C V(x)|\tilde{f}(x)|^2\,dx \right\},\end{aligned} \tag{77}$$

où $H^1_{\mathrm{per}}(C) = H^1_{\mathrm{BvK},0}(C)$ est le sous-espace de $H^1(C)$ composé des fonctions périodiques au bord de C. La preuve de la continuité par rapport à ξ est alors très similaire à celle que nous avons utilisée au théorème 66 pour montrer la continuité dans le cas des valeurs propres de Robin. Nous la laissons en exercice.

Il reste à montrer l'assertion principale du théorème que $\sigma(-\Delta+V) = \cup_{n\geq 1}\lambda_n(\overline{B})$. Nous commençons par l'inclusion $\supset$ et considérons donc $n \geq 1$ et $\xi_0 \in \overline{B}$, et un vecteur propre normalisé $f_{\xi_0} \in H^2_{\mathrm{BvK},\xi_0}(C)$ de valeur propre $\lambda_n(\xi_0)$ pour l'opérateur $(-\Delta+V)_{\xi_0}$:

$$-\Delta f_{\xi_0}(x) + V(x)f_{\xi_0}(x) = \lambda_n(\xi_0)f_{\xi_0}(x).$$

On introduit alors la fonction test

$$g_\varepsilon(x) = \varepsilon^{d/2} f_{\xi_0}(x)\chi(\varepsilon x) \in H^2(\mathbb{R}^d)$$

où χ est une fonction C^∞ positive à support compact, telle que $\int \chi^2 = 1$, et où $f_{\xi_0}(x)$ est ici vue comme une fonction $H^2_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^d)$ définie sur tout $\mathbb{R}^d$ (et vérifiant la condition de Born-von Karman $f_{\xi_0}(x+\ell) = f_{\xi_0}(x)e^{ix\cdot\ell}$). La norme de g_ε vaut

$$\int_{\mathbb{R}^d} |g_\varepsilon|^2 = \varepsilon^d \int_{\mathbb{R}^d} |f_{\xi_0}(x)|^2 |\chi(\varepsilon x)|^2\,dx.$$

Il est très classique que cette intégrale converge vers

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \varepsilon^d \int_{\mathbb{R}^d} |f_{\xi_0}(x)|^2\chi(\varepsilon x)^2\,dx = \left(\frac{1}{|C|}\int_C |f_{\xi_0}(x)|^2\,dx\right)\left(\int_{\mathbb{R}^d}\chi(x)^2\,dx\right) = \frac{1}{|C|}.$$

En effet, si g est périodique localement intégrable et $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, on a

$$\varepsilon^d \int_{\mathbb{R}^d} g(x)\varphi(\varepsilon x)\,dx = \frac{(2\pi)^{d/2}}{|C|^{1/2}} \sum_{k\in\mathscr{L}^*} c_k(g)\,\overline{\widehat{\varphi}(k/\varepsilon)}$$
$$\underset{\varepsilon\to 0}{\longrightarrow} \frac{(2\pi)^{d/2}}{|C|^{1/2}} c_0(g)\,\widehat{\varphi}(0) = \frac{1}{|C|}\left(\int_C g(x)\,dx\right)\left(\int_{\mathbb{R}^d}\varphi(x)\,dx\right), \quad (78)$$

puisque la transformée de Fourier d'une fonction périodique est un peigne de Dirac. Ainsi, modulo un facteur $|C|$, notre fonction g_ε est normalisée à la limite. On peut maintenant calculer

$$\big(-\Delta + V - \lambda_n(\xi_0)\big)g_\varepsilon = -2\varepsilon^{1+d/2}\nabla f_{\xi_0}(x)\cdot\nabla\chi(\varepsilon x) - \varepsilon^{2+d/2} f_{\xi_0}(x)\Delta\chi(\varepsilon x)$$

qui implique

$$\big\|\big(-\Delta + V - \lambda_n(\xi_0)\big)g_\varepsilon\big\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \le 2\varepsilon^{1+d/2}\,\|\nabla f_{\xi_0}(x)\cdot\nabla\chi(\varepsilon x)\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}$$
$$+\,\varepsilon^{2+d/2}\,\|f_{\xi_0}(x)\Delta\chi(\varepsilon x)\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}\,.$$

Les deux termes sont respectivement d'ordre ε et ε^2 puisque, d'après (78),

$$\left\|\varepsilon^{d/2}\nabla f_{\xi_0}\cdot\nabla\chi(\varepsilon\cdot)\right\|^2_{L^2(\mathbb{R}^d)} \underset{\varepsilon\to 0}{\longrightarrow} \frac{1}{|C|}\left(\int_C |\nabla f_{\xi_0}|^2\right)\left(\int_{\mathbb{R}^d}|\nabla\chi|^2\right)$$

et

$$\left\|\varepsilon^{d/2} f_{\xi_0}\Delta\chi(\varepsilon\cdot)\right\|^2_{L^2(\mathbb{R}^d)} \underset{\varepsilon\to 0}{\longrightarrow} \frac{1}{|C|}\left(\int_C |f_{\xi_0}|^2\right)\left(\int_{\mathbb{R}^d}|\Delta\chi|^2\right).$$

La convergence vers 0 de $\big\|\big(-\Delta + V - \lambda_n(\xi_0)\big)g_\varepsilon\big\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}$ avec $\|g_\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \to |C|^{-1}$ implique que $\lambda_n(\xi_0)$ appartient au spectre de $-\Delta+V$ par le theorème 12.

Il reste donc à prouver l'inclusion réciproque. Pour cela on peut utiliser la formule (75) et la formule de Parseval (71) qui fournissent l'égalité

$$\|(-\Delta + V - \mu)f\|^2_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \int_B \|(-\Delta+V)_\xi f_\xi - \mu f_\xi\|^2_{L^2(C)}\,d\xi$$

pour tout $f \in H^2(\mathbb{R}^d)$. Si μ n'appartient pas à l'union des $\lambda_n(\overline{B})$, alors il existe un $\eta > 0$ tel que $|\lambda_n(\xi) - \mu| \ge \eta$ pour tout $\xi \in \overline{B}$ et tout $n \ge 1$, car les λ_n sont continus et tendent vers l'infini quand $n \to \infty$. Comme l'opérateur $(-\Delta + V)_\xi$ est diagonalisable dans une base orthonormée, on a

$$\|(-\Delta+V)_\xi f_\xi - \mu f_\xi\|^2_{L^2(C)} = \sum_{n\ge 1}(\lambda_n(\xi)-\mu)^2|\langle f_\xi, e_n(\xi,\cdot)\rangle|^2 \ge \eta^2\|f_\xi\|^2_{L^2(C)}$$

où les $e_n(\xi,\cdot)$ sont une base orthonormée de fonctions propres de $(-\Delta+V)_\xi$. On conclut donc que pour $\mu \notin \cup\lambda_n(\overline{B})$, on a

$$\|(-\Delta+V-\mu)f\|^2_{L^2(\mathbb{R}^d)} \ge \eta^2\int_B \|f_\xi\|^2_{L^2(C)}\,d\xi = \eta^2\,\|f\|^2_{L^2(\mathbb{R}^d)}\,.$$

Par le théorème 12, ceci montre bien que $\mu \notin \sigma(-\Delta+V)$, ce qui termine la preuve. □

Exercice 94. *En utilisant la formule* (77)*, montrer la continuité de* $\lambda_n(\xi)$*.*

14 Introduction aux méthodes numériques

Dans les sections précédentes, nous nous sommes intéressés à la résolution du problème avec second membre

$$(A + a)v = w, \tag{79}$$

où a est choisi de sorte que $A + a > 0$, et du problème aux valeurs propres

$$Av = \lambda v. \tag{80}$$

Ici A est un opérateur auto-adjoint borné inférieurement, sur un espace de Hilbert $\mathfrak{H}$, et nous avons insisté tout particulièrement sur le cas du Laplacien $A = -\Delta$, avec des conditions appropriées au bord $\partial\Omega$. Nous expliquons maintenant comment discrétiser ces deux problèmes pour aboutir à une méthode numérique permettant de calculer une approximation de la solution v.

14.1 Discrétisation et estimation d'erreur

Nous commençons par des estimées pour un opérateur auto-adjoint A quelconque sur un espace de Hilbert $\mathfrak{H}$, de domaine $D(A)$. On suppose comme avant que A est minoré et à résolvante compacte. Soit alors $Q(A)$ son domaine de forme, défini en (34). Pour simplifier les énoncés suivants, nous allons supposer que l'opérateur A est positif. On peut toujours s'y ramener en remplaçant partout A par $A+a$ avec a assez grand, puisque A est supposé borné inférieurement. Lorsque $A > 0$, la forme polaire φ_A définit un produit scalaire sur $Q(A)$, et $\sqrt{q_A}$ définit une norme.

Soit $V_h \subset Q(A)$ un sous-espace de dimension finie. Typiquement, V_h est un espace d'éléments finis, tandis que $\mathfrak{H}$ est l'espace $L^2(\Omega)$ et $Q(A)$ est $H^1(\Omega)$ ou $H^1_0(\Omega)$. Le paramètre $h \to 0$ contrôle alors la taille des éléments finis. Soit $(f_j)_{1\leq j\leq J}$ une base de V_h (ce sont par exemple les fonctions de base d'une méthode d'éléments finis), où $J := \dim(V_h)$. On peut donc écrire tout vecteur $v \in V_h$ sous la forme

$$v = \sum_{j=1}^{J} \alpha_j f_j.$$

La forme quadratique peut se calculer de la façon suivante :

$$q_A(v) = \varphi_A(v, v) = \sum_{j=1}^{J}\sum_{k=1}^{J} \overline{\alpha_j}\alpha_k \varphi_A(f_j, f_k) = \alpha^* \mathcal{K}_h \alpha \tag{81}$$

où $\mathcal{K}_h$ est la matrice hermitienne $J \times J$ définie par

$$(\mathcal{K}_h)_{jk} = \varphi_A(f_j, f_k),$$

appelée *matrice de rigidité*. Pour la suite il est intéressant d'introduire aussi la *matrice de masse* définie par

$$(\mathcal{M}_h)_{jk} = \langle f_j, f_k\rangle_{\mathfrak{H}}$$

et qui permet de réécrire pour tout $v \in V_h$

$$\|v\|^2_{\mathfrak{H}} = \langle v, v\rangle_{\mathfrak{H}} = \sum_{j=1}^{J}\sum_{k=1}^{J} \overline{\alpha_j}\alpha_k \langle f_j, f_k\rangle_{\mathfrak{H}} = \alpha^* \mathcal{M}_h \alpha.$$

La terminologie "matrices de masse et de rigidité" est liée à la mécanique des solides. La matrice $\mathcal{K}_h$ est aussi la "restriction de A à l'espace V_h" au sens où $(\mathcal{K}_h)_{jk} = \langle f_j, Af_k\rangle_{\mathfrak{H}}$ lorsque $V_h \subset D(A)$. Notons que $\mathcal{M}_h$ est aussi la matrice de Gram des f_j et elle est donc toujours hermitienne définie positive, ce qui permet de définir $(\mathcal{M}_h)^{\pm 1/2}$ (si $A > 0$ alors $\mathcal{K}_h$ est aussi définie positive).

Si l'opérateur A est réel et si l'espace V_h est invariant par conjugaison complexe (engendré par des vecteurs réels, par exemple), alors les matrices $\mathcal{K}_h$ et $\mathcal{M}_h$ sont symétriques réelles et on peut se restreindre partout à des vecteurs réels $\alpha \in \mathbb{R}^J$, ce qui divise le nombre de variables par deux.

Il est utile d'introduire l'opérateur de projection orthogonale $\Pi_h : Q(A) \to V_h$ sur le sous-espace V_h, associé au produit scalaire φ_A, et qui est caractérisé par la propriété

$$\forall w \in V_h, \quad \varphi_A(\Pi_h v, w) = \varphi_A(v, w), \tag{82}$$

pour tout $v \in Q(A)$. Plus explicitement, si on choisit comme précédemment une base $f_1, ..., f_J$ de V_h et qu'elle est maintenant orthonormale pour φ_A, c'est-à-dire vérifie $\varphi_A(f_j, f_k) = \delta_{jk}$ (on peut toujours s'y ramener en diagonalisant la matrice $\mathcal{K}_h$), alors l'opérateur Π_h peut s'écrire

$$\Pi_h v = \sum_{j=1}^{J} \varphi_A(f_j, v)\, f_j. \tag{83}$$

Comme pour toute projection orthogonale, on a le théorème de Pythagore

$$q_A(v) = q_A(\Pi_h v) + q_A(v - \Pi_h v), \tag{84}$$

et la caractérisation habituelle que $\Pi_h v$ est le vecteur de V_h le plus proche de v pour la norme associée à la forme quadratique de A :

$$q_A(v - \Pi_h v) = \min_{w \in V_h} q_A(v - w). \tag{85}$$

14.1.1 Problème avec second membre

Nous commençons par discuter de la discrétisation du problème

$$\begin{cases} Av = w, \\ v \in D(A), \end{cases} \tag{86}$$

où w est un vecteur donné dans $\mathfrak{H}$. D'après le théorème 50 de Lax-Milgram, on sait que l'unique solution $v \in D(A)$ de ce problème est également l'unique minimiseur dans $Q(A)$ du problème variationnel

$$\min_{u \in Q(A)} \frac{1}{2} q_A(u) - \Re\langle u, w\rangle_{\mathfrak{H}},$$

ainsi que l'unique solution dans $Q(A)$ de la formulation faible

$$\varphi_A(u, v) = \langle u, w\rangle_{\mathfrak{H}}, \qquad \forall u \in Q(A).$$

Pour calculer une approximation de v, on se donne un vecteur $w_h \in V_h$ qui approche correctement w (il n'est pas nécessaire de savoir *a priori* comment w_h est construit) et on résout le problème de minimisation approché dans V_h

$$\min_{u \in V_h} \frac{1}{2} q_A(u) - \Re\langle u, w_h\rangle_{\mathfrak{H}},$$

dont l'unique solution v_h vérifie

$$\varphi_A(u, v_h) = \langle u, w_h \rangle_{\mathfrak{H}}, \qquad \forall u \in V_h. \tag{87}$$

En écrivant $v_h = \sum_{j=1}^{J} \alpha_j f_j$ et $w_h = \sum_{j=1}^{J} \beta_j f_j$ où on rappelle que les f_j forment une base de V_h, on trouve que le vecteur des coefficients $\alpha = (\alpha_1, ..., \alpha_J)^*$ doit résoudre l'équation

$$\mathcal{K}_h \alpha = \mathcal{M}_h \beta, \tag{88}$$

dont l'unique solution est bien sûr $\alpha = (\mathcal{K}_h)^{-1}\mathcal{M}_h\beta$. On se demande maintenant comment le vecteur v_h obtenu approche la solution exacte v du problème (86).

Proposition 95 (Problème avec second membre)**.** *Soit A un opérateur défini positif et à résolvante compacte, $w \in \mathfrak{H}$ un vecteur fixe, $V_h \subset Q(A)$ un espace de dimension finie et $w_h \in V_h$. L'unique solution v_h du problème avec second membre discrétisé* (87) *vérifie*

$$q_A(v - v_h) \leq q_A(v - \Pi_h v) + \frac{\|w - w_h\|_{\mathfrak{H}}^2}{\lambda_1(A)} \tag{89}$$

où $v = A^{-1}w$.

On voit donc que la différence entre v et v_h est reliée aux propriétés d'approximation de v par un élément de V_h. Plus V_h est "proche" de $D(A)$, donc de v, plus on s'attend à ce que le vecteur $v - \Pi_h v$ soit petit. Pour aller plus loin dans l'estimation de $v - v_h$, il n'est plus nécessaire d'utiliser la forme particulière du problème ; disposer de propriétés d'approximation de $D(A)$ par V_h suffit. Nous reviendrons à cette question plus loin dans le cas particulier des éléments finis. Enfin, il faut noter que seule la norme de $w - w_h$ dans $\mathfrak{H}$ apparaît à droite de (89), il n'est pas nécessaire que w soit correctement approché pour la norme de q_A.

Démonstration. D'après les deux caractérisations faibles, on a pour tout $u \in V_h$

$$\varphi_A(u, v - v_h) = \langle u, w - w_h \rangle_{\mathfrak{H}}$$

et donc

$$\varphi_A(u, \Pi_h v - v_h) = \varphi_A(u, \Pi_h(v - v_h)) = \varphi_A(u, v - v_h) = \langle u, w - w_h \rangle_{\mathfrak{H}}.$$

En prenant $u = \Pi_h v - v_h$ et en utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on en déduit que

$$q_A(\Pi_h v - v_h) \leq \|\Pi_h v - v_h\|_{\mathfrak{H}} \|w - w_h\|_{\mathfrak{H}}.$$

En utilisant l'inégalité

$$\forall v \in Q(A), \qquad q_A(v) \geq \lambda_1(A) \|v\|_{\mathfrak{H}}^2,$$

qui fournit $\|\Pi_h v - v_h\|_{\mathfrak{H}} \leq \sqrt{q_A(\Pi_h v - v_h)}/\sqrt{\lambda_1(A)}$, on arrive à

$$\sqrt{q_A(\Pi_h v - v_h)} \leq \frac{\|w - w_h\|_{\mathfrak{H}}}{\sqrt{\lambda_1(A)}}.$$

Il reste à utiliser le théorème de Pythagore

$$q_A(v - v_h) = q_A(v - \Pi_h v) + q_A(\Pi_h v - v_h)$$

pour conclure. □

Corollaire 96. *Si $\Pi_h v \to v$ fortement dans $Q(A)$ pour tout vecteur $v \in D(A)$ et si $w_h \to w$ fortement dans $\mathfrak{H}$, alors la solution v_h du problème approché* (87) *converge vers v pour la norme de $Q(A)$.*

14.1.2 Problème aux valeurs propres

Nous passons maintenant à la recherche pratique des éléments propres de A, une question plus ardue que le cas avec second membre discuté précédemment. On réalise une approximation interne de la formule de Courant-Fischer (37), consistant à résoudre le problème variationnel

$$\lambda_{k,h}(A) = \min_{\substack{V \subset V_h \\ \dim(V)=k}} \max_{\substack{v \in V \\ \|v\|_{\mathfrak{H}}=1}} q_A(v) \tag{90}$$

avec, bien sûr, $1 \leq k \leq \dim(V_h)$. Comme l'ensemble des espaces de dimension k inclus dans V_h est contenu dans l'ensemble de ceux inclus dans $Q(A)$, le minimum est réalisé sur un ensemble plus petit que dans (37) et il est alors clair que

$$\lambda_{k,h}(A) \geq \lambda_k(A)$$

pour tout $k \leq \dim(V_h)$. On est donc certain d'approcher la véritable valeur propre de A par le dessus.

En utilisant les matrices $\mathcal{K}_h$ et $\mathcal{M}_h$, le problème (90) peut se réécrire pour des vecteurs de $\mathbb{C}^J$ sous la forme

$$\lambda_{k,h}(A) = \min_{\substack{V \subset \mathbb{C}^J \\ \dim(V)=k}} \max_{\substack{\alpha \in V \\ \alpha^* \mathcal{M}_h \alpha = 1}} \alpha^* \mathcal{K}_h \alpha. \tag{91}$$

En faisant le changement de variable $\alpha' = \mathcal{M}_h^{1/2}\alpha$ et d'après le principe de Courant-Fischer pour les matrices hermitiennes $J \times J$, nous voyons que $\lambda_{k,h}(A)$ n'est rien d'autre que la $k$ième valeur propre de la matrice $\mathcal{M}_h^{-1/2}\mathcal{K}_h\mathcal{M}_h^{-1/2}$. En pratique, calculer $\mathcal{M}_h^{-1/2}$ peut être trop coûteux, et il est parfois préférable de ne pas faire le changement de variable. Ainsi, on est ramené à résoudre le *problème aux valeurs propres généralisé*

$$\mathcal{K}_h \alpha = \lambda_{k,h}(A)\, \mathcal{M}_h \alpha, \qquad \alpha \in \mathbb{C}^J \setminus \{0\}. \tag{92}$$

En revenant dans l'espace V_h, on voit qu'une autre manière d'écrire ce problème consiste à chercher $v_{k,h} \in V_h \setminus \{0\}$ qui satisfait

$$\varphi_A(u, v_{k,h}) = \lambda_{k,h}(A)\, \langle u, v_{k,h} \rangle_{\mathfrak{H}}, \qquad \forall u \in V_h, \tag{93}$$

comme pour (87).

Nous allons maintenant estimer la différence entre les valeurs propres du problème continu (80) et les valeurs propres du problème approché (92). Afin de mesurer la précision de l'approximation par l'espace V_h, on introduit pour tout sous-espace vectoriel $W \subset Q(A)$ le nombre

$$\varepsilon_h(W) = \sup_{\substack{v \in W \\ \|v\|_{\mathfrak{H}}=1}} \sqrt{q_A(v - \Pi_h v)} = \sup_{v \in W \setminus \{0\}} \frac{\sqrt{q_A(v - \Pi_h v)}}{\|v\|_{\mathfrak{H}}}. \tag{94}$$

Il est clair que ε_h est croissant par rapport à l'inclusion des espaces : si $W \subset W'$, alors $\varepsilon_h(W) \leq \varepsilon_h(W')$. Le résultat est alors le suivant.

Théorème 97 (Estimée sur les valeurs propres approchées)**.** *Soit W_k un sous-espace propre associé aux k premières valeurs propres de l'opérateur A, supposé défini positif et à résolvante compacte. Si $\varepsilon_h(W_k) < \sqrt{\lambda_1(A)}$, on a alors*

$$\lambda_k(A) \leq \lambda_{k,h}(A) \leq \lambda_k(A) + \frac{\varepsilon_h(W_k)^2}{\left(1 - \dfrac{\varepsilon_h(W_k)}{\sqrt{\lambda_1(A)}}\right)^2}. \tag{95}$$

Remarquons que l'estimée (95) se détériore lorsque k augmente, puisque la fonction $\varepsilon_h(W_k)$ dépend de l'espace W_k et donc de sa dimension. L'intérêt d'une telle estimée est qu'elle permet d'obtenir une information quantitative de l'erreur obtenue en calculant $\lambda_{k,h}(A)$, à condition d'être capable d'avoir des bornes sur $\varepsilon_h(W_k)$.

Démonstration. On utilise le principe de Courant-Fischer (37) avec $W_{k,h} = \Pi_h W_k$ qui est la projection sur V_h de l'espace W_k. On a évidemment $W_{k,h} \subset V_h$ et $\dim W_{k,h} \leq k$. En utilisant l'inégalité

$$\forall v \in Q(A), \qquad q_A(v) \geq \lambda_1(A)\ \|v\|_{\mathfrak{H}}^2\,,$$

on voit que pour tout $v \in W_k$, on a

$$\Big|\ \|v\|_{\mathfrak{H}} - \|\Pi_h v\|_{\mathfrak{H}}\ \Big| \leq \|v - \Pi_h v\|_{\mathfrak{H}} \leq \frac{\sqrt{q_A(v - \Pi_h v)}}{\sqrt{\lambda_1(A)}} \leq \frac{\varepsilon_h(W_k)}{\sqrt{\lambda_1(A)}}\|v\|_{\mathfrak{H}}. \tag{96}$$

On obtient donc

$$\|\Pi_h v\|_{\mathfrak{H}} \geq \left(1 - \frac{\varepsilon_h(W_k)}{\sqrt{\lambda_1(A)}}\right)\|v\|_{\mathfrak{H}}\,. \tag{97}$$

Comme par hypothèse $\varepsilon_h(W_k) < \sqrt{\lambda_1(A)}$, ceci démontre que l'application $v \in W_k \mapsto \Pi_h v \in W_{k,h}$ est injective, et donc que $\dim(W_{k,h}) = k$.

Soit maintenant Π_{W_k} le projecteur orthogonal sur les k premiers vecteurs propres de A, pour le produit scalaire φ_A, qui est tel que

$$q_A(w) = q_A(\Pi_{W_k} w) + q_A(w - \Pi_{W_k} w)$$

et est caractérisé par l'inégalité

$$q_A(w - \Pi_{W_k} w) \leq q_A(w - z), \qquad \forall z \in W_k. \tag{98}$$

Comme W_k est composé de vecteurs propres de A, Π_{W_k} est aussi orthogonal pour le produit scalaire de $\mathfrak{H}$ et on a également

$$\|w\|_{\mathfrak{H}}^2 = \|\Pi_{W_k} w\|_{\mathfrak{H}}^2 + \|w - \Pi_{W_k} w\|_{\mathfrak{H}}^2 \geq \|\Pi_{W_k} w\|_{\mathfrak{H}}^2$$

Soit $w = \Pi_h v$ un vecteur quelconque de $W_{k,h}$, tel que $\|w\|_{\mathfrak{H}} = 1$. Le vecteur $v \in W_k$ n'est pas forcément normalisé mais on a par l'inégalité (97)

$$\|v\|_{\mathfrak{H}} \leq \frac{1}{1 - \frac{\varepsilon_h(W_k)}{\sqrt{\lambda_1(A)}}}.$$

En utilisant l'inégalité (98) avec $z = v \in W_k$, nous en déduisons donc que

$$\begin{aligned} q_A(w) = q_A(\Pi_{W_k} w) + q_A(w - \Pi_{W_k} w) &\leq \frac{q_A(\Pi_{W_k} w)}{\|\Pi_{W_k} w\|^2_{\mathfrak{H}}} + q_A(\Pi_h v - v) \\ &\leq \lambda_k(A) + \varepsilon_h(W_k)^2 \, \|v\|^2_{\mathfrak{H}} \\ &\leq \lambda_k(A) + \frac{\varepsilon_h(W_k)^2}{\left(1 - \frac{\varepsilon_h(W_k)}{\sqrt{\lambda_1(A)}}\right)^2}. \end{aligned}$$

Ceci conclut la preuve, par la caractérisation de Courant-Fischer (37). □

Nous avons prouvé l'estimée

$$\lambda_k(A) \leq \lambda_{k,h}(A) \leq \lambda_k(A) + O\Big(\varepsilon_h(W_k)^2\Big). \tag{99}$$

Comme précédemment, la différence entre $\lambda_{k,h}$ et λ_k est reliée aux propriétés d'approximation de W_k par V_h, puisqu'on s'attend à ce que $\varepsilon_h(W_k) \to 0$ quand $h \to 0$.

Nous passons maintenant aux estimées concernant les vecteurs propres. Nous commençons par un lemme très simple qui fournit la convergence des vecteurs propres, à des sous-suites près.

Corollaire 98 (Convergence des vecteurs propres)**.** *On suppose que $q_A(\Pi_h u - u) \to 0$ lorsque $h \to 0$, pour tout $u \in Q(A)$. Alors on a $\lambda_{k,h}(A) \to \lambda_j(A)$ pour tout $k \geq 1$. Par ailleurs, soit $k \geq 1$ et $v_{k,h} \in V_h$ des vecteurs propres normalisés approchés, c'est-à-dire tel que $\varphi_A(v, v_{k,h}) = \lambda_{k,h}(A)\langle v, v_{k,h}\rangle$ pour tout $v \in V_h$. Alors on a $v_{k,h_n} \to v_k$ fortement dans $\mathfrak{H}$ et faiblement dans $Q(A)$, pour des sous-suites $h_n \to 0$, où v_k est un vecteur propre de A (qui peut dépendre de la sous-suite), associé à la valeur propre $\lambda_k(A)$.*

Démonstration. L'hypothèse que $q_A(\Pi_h u - u) \to 0$ lorsque $h \to 0$ implique immédiatement que $\varepsilon_h(W_k) \to 0$ pour tout k, puisque W_k est de dimension finie. On a donc $\lambda_{k,h} \to \lambda_k$ pour tout $k \geq 1$, d'après le théorème 97. En prenant $u = v_{k,h}$ dans (93), on trouve immédiatement que $(v_{k,h})_h$ est borné dans $Q(A)$. Comme les valeurs propres de A tendent vers l'infini, l'injection $Q(A) \hookrightarrow \mathfrak{H}$ est compacte (l'écrire en exercice). Quitte à extraire une sous-suite $h_n \to 0$, on peut donc supposer que $v_{k,h} \rightharpoonup v_k$ faiblement dans $Q(A)$ (c'est-à-dire $\varphi_A(u, v_{k,h_n}) \to \varphi_A(u, v_k)$ pour tout $u \in Q(A)$), et que $v_{k,h_n} \to v_k$ fortement dans $\mathfrak{H}$. Si $u \in Q(A)$, en utilisant le fait que $q_A(u - \Pi_h u) \to 0$ et que $v_{k,h}$ est borné dans $Q(A)$, on trouve que $\varphi_A(u - \Pi_h u, v_{k,h}) \to 0$. Or $\varphi_A(\Pi_h u, v_{k,h}) = \lambda_{k,h}\langle \Pi_h u, v_{k,h}\rangle \to \lambda_k\langle u, v_k\rangle$ et ainsi on trouve que $\varphi_A(u, v_k) = \lambda_k\langle u, v_k\rangle$ pour tout $u \in Q(A)$. D'après la caractérisation du théorème 49, ceci signifie que $v_k \in D(A)$ et que $Av_k = \lambda_k \, v_k$, ce qu'il fallait démontrer. □

Exercice 99. *Lorsque A est à résolvante compacte, montrer que l'injection $Q(A) \hookrightarrow \mathfrak{H}$ est compacte.*

Si la valeur propre λ_k est dégénérée, la limite v_k peut dépendre de la sous-suite. Une manière d'exprimer la convergence est d'utiliser les projecteurs spectraux associés (c'est-à-dire de regarder la convergence des espaces propres).

Théorème 100 (Estimée sur les projecteurs spectraux)**.** *Soit $A > 0$ un opérateur à résolvante compacte comme précédemment. Soient $0 = k_0 < k_1 < \cdots$ une suite strictement croissante d'indices choisis de sorte que $\lambda_{k_j}(A)$ soit exactement de multiplicité $k_j - k_{j-1}$:*

$$\lambda_1(A) = \cdots = \lambda_{k_1}(A) < \lambda_{k_1+1}(A) = \cdots = \lambda_{k_2}(A) < \cdots .$$

Pour $j \geq 1$, soit P_{k_j} le projecteur orthogonal sur $\ker(A - \lambda_{k_j}(A))$, qui est exactement de rang $k_j - k_{j-1}$. Pour h assez petit de sorte que $\lambda_{k_{j-1},h}(A) < \lambda_{k_j,h} < \lambda_{k_{j+1},h}(A)$, soit $P_{k_j,h}$ le projecteur orthogonal sur la somme directe des espaces approchés correspondants à $\lambda_{k_{j-1}+1,h}(A), ..., \lambda_{k_j,h}(A)$. Alors on a

$$\left\|P_{k_j} - P_{k_j,h}\right\| \leq \sqrt{2k_j}\, \frac{\varepsilon_h(W_{k_j})}{1 - \frac{\varepsilon_h(W_{k_j})}{\sqrt{\lambda_1(A)}}} \times \\ \times \left(\frac{1}{\sqrt{\lambda_{k_j}(A) - \lambda_{k_{j-1}}(A)}} + \frac{1}{\sqrt{\lambda_{k_{j+1}}(A) - \lambda_{j_k}(A)}} \right). \quad (100)$$

Si $\lambda_\ell(A)$ est une valeur propre non dégénérée, on a pour u_ℓ et $u_{\ell,h}$ des vecteurs propres normalisés exacts et approchés, associés respectivement à λ_ℓ et $\lambda_{\ell,h}$, et choisis tels que $\langle u_{\ell,h}, u_\ell \rangle_{\mathfrak{H}} > 0$,

$$\sqrt{q_A(u_\ell - u_{\ell,h})} \leq \frac{\varepsilon_h(W_\ell)}{1 - \frac{\varepsilon_h(W_\ell)}{\sqrt{\lambda_1(A)}}} \left(1 + 2\sqrt{\ell}\, \sqrt{\frac{\lambda_\ell(A)}{\lambda_\ell(A) - \lambda_{\ell-1}(A)}} \right. \\ \left. + 2\sqrt{\ell}\, \sqrt{\frac{\lambda_\ell(A)}{\lambda_{\ell+1}(A) - \lambda_\ell(A)}} \right). \quad (101)$$

Plusieurs remarques sont nécessaires. Tout d'abord, nous voyons que les bornes sur les espaces et vecteurs propres explosent lorsque la valeur propre précédente ou la suivante se rapproche de celle étudiée, ce qui est normal puisque l'espace doit alors grandir et inclure les nouveaux vecteurs à la limite. Par ailleurs, l'ordre de convergence des valeurs propres en $O(\varepsilon_h^2)$, trouvé au théorème 97 est le double de celui des vecteurs propres en $O(\varepsilon_h)$ trouvé ici, un phénomène courant dans les méthodes de calcul des valeurs propres et vecteurs propres d'une matrice. D'autre part, contrairement à l'estimée (95) sur les valeurs propres dont la seule dépendance en k était contenue dans $\varepsilon_h(W_k)$, les estimées ci-dessus contiennent des préfacteurs qui divergent plus vite avec le numéro de la valeur propre étudiée. Ceci est cependant dû à notre méthode de preuve. Enfin, nous avons seulement énoncé une estimée sur la norme d'opérateur dans $\mathfrak{H}$ pour $P_{k_j} - P_{k_j,h}$ car celle-ci est plus simple, mais il est également possible d'obtenir une estimée dans l'espace $Q(A)$. Le résultat du théorème 100 est illustré à la figure 7.

Démonstration. On utilise l'inégalité (42) qui fournit une estimée sur la norme d'opérateur de la différence des projections, en fonction de la somme des valeurs propres. On introduit $\mathcal{P}_\ell$ et $\mathcal{P}_{\ell,h}$ les projecteurs orthogonaux sur les espaces engendrés respectivement par $v_1, ..., v_\ell$ et $v_{1,h}, ..., v_{\ell,h}$ et qui sont tels que $P_{k_j} =$

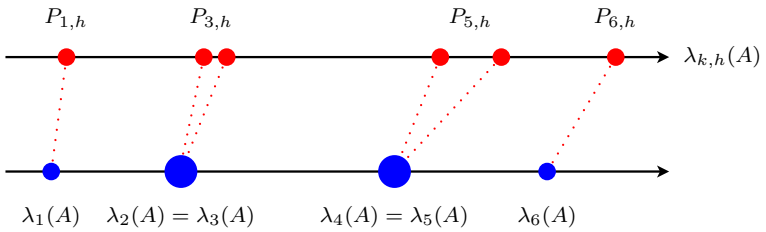


FIGURE 7 – Illustration de la convergence énoncée dans le théorème 100, en supposant pour simplifier que les valeurs propres approchées $\lambda_{k,h}(A)$ sont toutes simples.

$\mathcal{P}_{k_j} - \mathcal{P}_{k_{j-1}}$ et $P_{k_j,h} = \mathcal{P}_{k_j,h} - \mathcal{P}_{k_{j-1},h}$. D'après (42) et (95) et en utilisant la croissance de ε_h par rapport à l'inclusion, on obtient

$$\begin{aligned}\left\|\mathcal{P}_{k_j,h} - \mathcal{P}_{k_j}\right\|^2 &\leq \frac{2}{\lambda_{k_{j+1}}(A) - \lambda_{k_j}(A)} \sum_{\ell=1}^{k_j} \big(\lambda_{\ell,h}(A) - \lambda_\ell(A)\big) \\ &\leq \frac{2k_j}{\lambda_{k_{j+1}}(A) - \lambda_{k_j}(A)} \frac{\varepsilon_h(W_{k_j})^2}{\left(1 - \frac{\varepsilon_h(W_{k_j})}{\sqrt{\lambda_1(A)}}\right)^2}\end{aligned}$$

et

$$\left\|\mathcal{P}_{k_{j-1},h} - \mathcal{P}_{k_{j-1}}\right\|^2 \leq \frac{2k_{j-1}}{\lambda_{k_j}(A) - \lambda_{k_{j-1}}(A)} \frac{\varepsilon_h(W_{k_j})^2}{\left(1 - \frac{\varepsilon_h(W_{k_j})}{\sqrt{\lambda_1(A)}}\right)^2}.$$

L'inégalité triangulaire fournit alors l'estimée (100).

Si $\ell = k_j$ est tel que λ_ℓ est de multiplicité 1 et $\langle u_\ell, u_{\ell,h}\rangle_{\mathfrak{H}} \in]0,1[$, on utilise la série d'inégalités

$$\begin{aligned}\frac{\|u_\ell - u_{\ell,h}\|_{\mathfrak{H}}^2}{2} &= 1 - \langle u_\ell, u_{\ell,h}\rangle_{\mathfrak{H}} \\ &\leq 1 - \langle u_\ell, u_{\ell,h}\rangle_{\mathfrak{H}}^2 \\ &= \left\|u_\ell - \langle u_\ell, u_{\ell,h}\rangle_{\mathfrak{H}} u_{\ell,h}\right\|_{\mathfrak{H}}^2 \\ &= \|(P_\ell - P_{\ell,h})u_\ell\|_{\mathfrak{H}}^2 \\ &\leq \|P_\ell - P_{\ell,h}\|^2,\end{aligned}$$

qui fournit immédiatement une estimée sur la norme de $\mathfrak{H}$. Pour obtenir une inégalité faisant intervenir la forme quadratique de A, on utilise les deux équations aux valeurs propres pour u_ℓ et $u_{\ell,h}$, et on trouve

$$\begin{aligned}q_A(u_\ell - u_{\ell,h}) &= q_A(u_\ell) + q_A(u_{\ell,h}) - 2\Re\,\varphi_A(u_\ell, u_{\ell,h}) \\ &= \lambda_\ell(A) + \lambda_{\ell,h}(A) - 2\lambda_\ell(A)\langle u_\ell, u_{\ell,h}\rangle_{\mathfrak{H}} \\ &= -\lambda_\ell(A) + \lambda_{\ell,h}(A) + 2\lambda_\ell(A)\big(1 - \langle u_\ell, u_{\ell,h}\rangle_{\mathfrak{H}}\big) \\ &= -\lambda_\ell(A) + \lambda_{\ell,h}(A) + \lambda_\ell(A)\,\|u_\ell - u_{\ell,h}\|_{\mathfrak{H}}^2,\end{aligned}$$

ce qui fournit l'inégalité

$$\sqrt{q_A(u_\ell - u_{\ell,h})} \leq \frac{\varepsilon_h(W_\ell)}{1 - \frac{\varepsilon_h(W_\ell)}{\sqrt{\lambda_\ell(A)}}} + \sqrt{\lambda_\ell(A)}\sqrt{2}\,\|P_\ell - P_{\ell,h}\|$$

et conclut la preuve. □

14.2 Laplacien de Dirichlet dans une base d'éléments finis de Lagrange

Précisons maintenant comment les estimées abstraites de la section précédente peuvent être utilisées dans le cas où $A = -\Delta_{\mathrm{R},0}$ est le Laplacien de Dirichlet et V_h est construit à partir d'éléments finis. Rappelons que la première valeur propre du Laplacien de Dirichlet est strictement positive, ce qui signifie que $-\Delta_{\mathrm{R},0}$ est défini positif. La forme quadratique associée

$$q_{-\Delta_{\mathrm{R},0}}(f) = \int_\Omega |\nabla f(x)|^2\,dx$$

est alors exactement le carré de la norme de $H_0^1(\Omega)$.

Supposons maintenant que Ω est un ouvert borné connexe de $\mathbb{R}^d$, qui satisfait les hypothèses du théorème 28. Une suite $(\mathcal{T}_h)$ est une suite de *maillages triangulaires réguliers* de Ω si pour chaque h, $\mathcal{T}_h = (K_i)$ où les K_i sont des tétraèdres (en dimension arbitraire d un tétraèdre est une intersection de $d+1$ demi-espaces) vérifiant les conditions suivantes :

(i) $\Omega_h := \cup K_i$ est connexe et inclus dans Ω,

(ii) l'intersection de deux tétraèdres K_i et K_j est soit vide, soit un tétraèdre de dimension $m \leq d-1$ dont tous les sommets sont aussi des sommets de K_i et K_j,

(iii) on a

$$\begin{cases} \max\limits_i \operatorname{diam}(K_i) = h, \\ \forall i, \quad \operatorname{diam}(K_i) \leq C \max\limits_{B_r \subseteq K_i} r, \\ \mathrm{d}(\partial\Omega, \Omega_h) \leq Ch^2. \end{cases}$$

Les deux premières estimées de l'hypothèse (iii) signifient que chaque K_i est de volume d'ordre h^d (il ne peut pas être aplati ou s'aplatir quand $h \to 0$). La dernière estimée signifie que $\partial\Omega_h$ est à une distance h^2 de $\partial\Omega$, de sorte que le domaine approché $\Omega_h = \cup K_i$ finit par couvrir tout Ω. L'estimée en h^2 est celle qui est obtenue lorsque tous les coins de Ω_h appartiennent à $\partial\Omega$, et que Ω est de classe C^1 (figure 8).

La situation la plus simple est quand Ω est lui même un polyèdre, ce qui permet de choisir des pavages de tétraèdres recouvrant exactement Ω, c'est-à-dire tels que $\Omega_h = \Omega$. Lorsque Ω est un ouvert lisse (éventuellement par morceaux), on doit approcher la frontière par les tétraèdres, une approximation géométrique qui va induire une erreur numérique que nous discuterons plus bas.

Introduisons alors l'espace d'approximation

$$V_{0,h}^k := \left\{ u \in C^0(\overline{\Omega_h}) \mid u_{|\partial\Omega_h} = 0,\ u_{|K_i} \text{ est un polynôme de degré } k \right\}.$$

Pour chaque tel maillage, on peut définir une suite de points $(a_i)_{i=1}^p \in \Omega$ appelés nœuds ($p = \dim V_{0,h}^k$) et des fonctions $\varphi_i \in V_{0,h}^k \subset H_0^1(\Omega, \mathbb{R})$ telles que $\varphi_i(a_j) =$

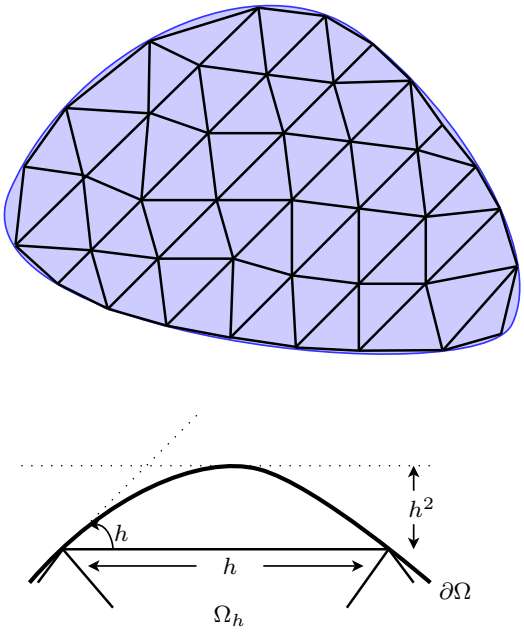


FIGURE 8 – *Haut :* Éléments finis en dimension 2. *Bas :* Illustration du fait que $\mathrm{d}(\partial\Omega, \Omega_h) \leq Ch^2$. L'angle relatif aux points de contact est d'ordre h puisque $\partial\Omega$ possède une tangente qui est parallèle à la face du triangle et que le bord est C^1 par hypothèse.

δ_{ij}. Pour toute fonction régulière f on pose alors

$$(r_h f)(x) = \sum_{i=1}^{p} f(a_i)\varphi_i(x).$$

Cette définition requiert que f soit au moins continue, ce qui est garanti lorsque $f \in H^k(\Omega)$ avec $k > d/2$.

Le résultat suivant est classique, voir [5, 6, 19].

Théorème 101 (Approximation par éléments finis)**.** *Soit $(\mathcal{T}_h)$ une suite de maillages réguliers comme ci-dessus, avec Ω un ouvert connexe dont la frontière est composée d'hypersurfaces de classe C^{k+1} qui s'intersectent transversalement de sorte que Ω soit strictement convexe au voisinage des singularités de $\partial\Omega$. On suppose que $k+1 > d/2$. Alors pour tout $f \in H^{k+1}(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$, l'interpolée $r_h f$ est bien définie et satisfait*

$$\|f - r_h f\|_{H_0^1(\Omega)} \leq Ch^\alpha \|f\|_{H^{k+1}(\Omega)}, \tag{102}$$

où l'exposant α vaut

$$\alpha = \begin{cases} 3k/d & \text{si } d/2 - 1 < k < d/2, \\ 3/2 & \text{si } k > d/2, \\ 3/2 - \varepsilon & \text{si } k = d/2, \text{ avec } \varepsilon > 0, \\ k & \text{si } \Omega \text{ est polyédrique et } \Omega = \Omega_h. \end{cases} \tag{103}$$

Le théorème signifie que

$$\|1 - r_h\|_{H^{k+1}(\Omega)\cap H_0^1(\Omega)\to H_0^1(\Omega)} \le Ch^\alpha,$$

dès que $k+1 > d/2$ ou, dit autrement, que l'opérateur r_h permet d'approcher toute fonction de $H^{k+1}(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ à partir d'éléments finis, avec une erreur uniforme d'ordre h^α.

Notons la différence importante entre les ouverts polyédriques pour lesquels l'erreur d'ordre h^k provient uniquement de l'erreur d'approximation locale de f par un polynôme (c'est-à-dire essentiellement de la formule de Taylor), et le cas d'un ouvert lisse pour lequel l'erreur est principalement due à l'approximation géométrique de $\partial\Omega$. Par exemple, si ∇f est bornée, $\int_{\Omega\setminus\Omega_h} |\nabla f|^2$ est d'ordre $|\Omega \setminus \Omega_h| = O(h^3)$ et

$$\|f - r_h\|_{H^1(\Omega)} \le \|\nabla f\|_{L^2(\Omega\setminus\Omega_h)} = O(h^{3/2}).$$

Si ∇f n'est pas bornée quand $f \in H^{k+1}(\Omega)$, c'est-à-dire si $k \le d/2$, il faut utiliser les inégalités de Hölder et de Sobolev pour retrouver les exposants apparaissant dans (103). Si on désire améliorer cette erreur, il faut utiliser des éléments finis K_i dont la frontière est aussi déterminée par une équation polynomiale d'ordre k, ce qui complique grandement l'implémentation numérique.

L'opérateur r_h n'est pas directement relié à la projection orthogonale $\Pi_{0,h}^k$: $H_0^1(\Omega) \to V_{0,h}^k$ par rapport au produit scalaire de $H_0^1(\Omega)$, définie comme à la section précédente. Cependant, comme la projection fournit par définition le point de $V_{0,h}^k$ le plus proche pour la norme $H_0^1(\Omega)$ (inégalité (85)), on a bien sûr

$$\left\|f - \Pi_{0,h}^k f\right\|_{H_0^1(\Omega)} \le \|f - r_h f\|_{H_0^1(\Omega)}, \quad \forall f \in H^{k+1}(\Omega) \cap H_0^1(\Omega). \tag{104}$$

On conclut donc, en particulier, que $\Pi_{0,h}^k$ vérifie la même estimée que r_h

$$\left\|f - \Pi_{0,h}^k f\right\|_{H_0^1(\Omega)} \le Ch^\alpha \|f\|_{H^{k+1}(\Omega)\cap H_0^1(\Omega)}. \tag{105}$$

Corollaire 102. *Soit W un sous-espace quelconque de $H^{k+1}(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ avec $k+1 > d/2$, et $\varepsilon_h(W)$ défini comme en (94). Alors on a*

$$\varepsilon_h(W) \le Ch^\alpha \sup_{\substack{v\in W \\ \|v\|_{L^2(\Omega)}=1}} \|v\|_{H^{k+1}(\Omega)\cap H_0^1(\Omega)}, \tag{106}$$

où α est défini en (103).

Pour un domaine Ω de classe C^{k+1} avec $k+1 > d/2$ les fonctions propres sont dans $H^{k+1}(\Omega)$, d'après le corollaire 73 et on en déduit immédiatement des théorèmes 97 et 100 que les valeurs propres et les projecteurs spectraux sont respectivement approchés à l'ordre $h^{2\alpha}$ et h^α. Nous voyons que la vitesse de convergence est limitée par l'approximation géométrique du bord. Si la frontière de Ω est composée d'hypersurfaces qui s'intersecte transversalement, les fonctions propres peuvent ne pas être lisses et la vitesse a sa valeur minimale, typiquement h ou $h^{3/2}$.

Dans un ouvert polyédrique, on peut choisir des éléments finis de sorte que $\Omega = \Omega_h$, ce qui permet d'approcher toute fonction suffisamment lisse avec

une très faible erreur lorsque k est grand. Mais malheureusement les fonctions propres ne sont pas toujours très lisses, comme nous avons vu à la section 11 ! La vitesse d'approximation va dépendre des différents angles et coins, qui déterminent leur régularité maximale. Par exemple, pour un ouvert polygonal en dimension deux, la vitesse de convergence dépendra du plus grand des angles φ_i tel que π/φ_i est non entier (théorème 77).

Notons enfin que même si les fonctions propres ne sont pas suffisamment lisses, il est possible de prouver la convergence par une technique d'approximation, sans estimée de convergence. C'est par exemple le cas en dimension $d \geq 4$ si les fonctions propres ne sont que dans $H^2(\Omega)$.

Ces différents résultats sont résumés dans le théorème suivant.

Théorème 103 (Convergence des éléments propres)**.** *Soit Ω un ouvert connexe satisfaisant les hypothèses du théorème 28 et $(\mathcal{T}_h)$ une suite de maillages réguliers comme ci-dessus. Soient $\lambda_{m,h}$ les valeurs propres du problème approché* (90) *pour le Laplacien de Dirichlet $-\Delta_{\mathrm{R},0}$, de valeurs propres λ_m. Alors on a*

$$\lim_{h\to 0} |\lambda_m - \lambda_{m,h}| = 0$$

pour tout $m \geq 1$. Par ailleurs, si λ_m est valeur propre simple, alors il existe des fonctions propres u_m et $u_{m,h}$ associées telles que

$$\lim_{h\to 0} \|u_m - u_{m,h}\|_{H^1_0(\Omega)} = 0.$$

Si le sous-espace engendré par $(u_1, \dots, u_m)$ est inclus dans $H^{k+1}(\Omega)$ avec $k+1 > d/2$ et que la frontière de Ω est composée d'hypersurfaces de classe C^{k+2}, alors on a les estimées

$$|\lambda_m - \lambda_{m,h}| \leq C_m h^{2\alpha}. \tag{107}$$

Si λ_m est simple, alors

$$\|u_m - u_{m,h}\|_{H^1_0(\Omega)} \leq C'_m h^{\alpha}. \tag{108}$$

La puissance α est donnée par la formule (103).

En dimensions $d = 1, 2, 3$, on a toujours $2 > d/2$ et ainsi les estimées (107) et (108) sont valables avec $k = 1$. Dans le cas d'un ouvert suffisamment régulier, on trouve ainsi les vitesses h^3 et $h^{3/2}$, respectivement pour les valeurs et fonctions propres.

Il est possible de déterminer la valeur des constantes C_m et C'_m apparaissant dans (107) et (108). Considérons par exemple le cas des dimensions $d = 2, 3$ et de $k = 1$. Soit $W_m = \mathrm{vect}(u_1, \dots, u_m)$ l'espace engendré par les m premiers vecteurs propres. Alors toute fonction $w \in W_m$ peut s'écrire $w = \sum_{i=1}^m \alpha_i u_i$ et on a bien sûr

$$\|w\|^2_{L^2(\Omega)} = \sum_{i=1}^m |\alpha_i|^2, \qquad \|\Delta w\|^2_{L^2(\Omega)} = \sum_{i=1}^m \lambda_i^2 |\alpha_i|^2 \leq \lambda_m^2 \|w\|^2_{L^2(\Omega)},$$

puisque les u_i sont des fonctions propres de $-\Delta_{\mathrm{R},0}$. Par régularité elliptique (théorème 28) nous avons

$$\|w\|_{H^2(\Omega)} \leq C_{\mathrm{RE}} \big(\|w\|_{L^2(\Omega)} + \|\Delta w\|_{L^2(\Omega)} \big),$$

de sorte que

$$\sup_{\substack{w\in W_m\\ \|w\|_{L^2(\Omega)}=1}} \|w\|_{H^2(\Omega)\cap H_0^1(\Omega)} \le (1+\lambda_m)C_{\rm RE}.$$

Si $C_{\rm EF}$ est la constante du théorème 101 qui donne l'erreur dans $H^2(\Omega)$, alors on conclut à l'aide du corollaire 102 que

$$\varepsilon_h(W_m) \le h^{3/2}(1+\lambda_m)C_{\rm EF}C_{\rm RE}.$$

Il suffit alors d'insérer les estimées des théorèmes 97 et 100 pour en déduire que

$$C_m = 2(1+\lambda_m)^2(C_{\rm EF})^2(C_{\rm RE})^2$$

et

$$C'_m = 2(1+\lambda_m)C_{\rm EF}C_{\rm RE}\left(1+2\sqrt{m}\,\sqrt{\frac{\lambda_m}{\lambda_m-\lambda_{m-1}}}+2\sqrt{m}\,\sqrt{\frac{\lambda_m}{\lambda_{m+1}-\lambda_m}}\right)$$

conviennent dès que

$$h^{3/2} \le \frac{\sqrt{\lambda_1}}{2(1+\lambda_m)C_{\rm EF}C_{\rm RE}}.$$

Bien sûr les valeurs propres exactes λ_i sont inconnues mais on peut utiliser l'estimée (95) pour remplacer les λ_i par leur approximation courante $\lambda_{i,h}$ calculée numériquement. Encore plus simplement, on peut utiliser l'inégalité

$$C_1\, m^{2/d} \le \lambda_m \le C_2 m^{2/d}$$

trouvée en (48), où $C_1 > 0$ ne dépend que du plus grand cube que l'on peut placer dans Ω et C_2 du diamètre de Ω (exercice 65). On trouve ainsi que $C_m = O(m^{4/d})$ et que $C'_m = O(m^{3/d+1/2})$. Ceci est donné à titre indicatif, le comportement en m n'est pas du tout optimal. Par ailleurs, les constantes $C_{\rm EF}$ et $C_{\rm RE}$ dépendent de manière complexe des propriétés du domaine Ω et elles ne sont généralement pas explicitées dans les ouvrages. On peut néanmoins avoir des estimations concrètes pour des domaines simples (disque, carré, etc).

Dans cette section nous avons considéré le cas du Laplacien de Dirichlet qui est un peu plus facile (grâce à l'inclusion $H_0^1(\Omega_h) \subset H_0^1(\Omega)$ si $\Omega_h \subset \Omega$). Il existe des résultats similaires pour le Laplacien de Robin, dont l'écriture est évidente lorsque $\Omega = \Omega_h$, mais qui requièrent un peu plus de travail si Ω n'est pas polyédrique.

14.3 Opérateurs de Schrödinger périodiques dans une base d'ondes planes

Nous finissons par le cas plus simple de l'opérateur $A = -|\nabla + i\xi|^2 + V$ avec des conditions périodiques au bord de la cellule unité C d'un réseau $\mathscr{L}$. Ici ξ est un vecteur quelconque fixé de la zone de Brillouin $\overline{B}$, où B est la cellule unité du réseau dual $\mathscr{L}^*$. Par le théorème 93 (et la transformation $f(x) = \tilde{f}(x)e^{i\xi\cdot x}$), en calculant le spectre $\lambda_n(\xi)$ de $-|\nabla + i\xi|^2 + V$ pour plusieurs valeurs ξ dans la zone de Brillouin, on obtiendra une approximation du spectre de l'opérateur $-\Delta + V$ défini dans tout l'espace. Ici nous ne discutons que de la résolution du problème aux valeurs propres pour une seule valeur de ξ.

Nous supposons que $V \in L^p(C)$ où p satisfait

$$\begin{cases} p = 2 & \text{si } d = 1, 2, 3, \\ p > 2 & \text{si } d = 4, \\ p = \frac{d}{2} & \text{si } d \geq 5. \end{cases} \tag{109}$$

comme au corollaire 87, ce qui garantie que A est auto-adjoint sur $H^2_{\text{per}}(C)$, et à résolvante compacte. La forme quadratique associée à A vaut

$$q_A(f) = \int_C |\nabla f(x) + i\xi f(x)|^2 \, dx + \int_C V(x)|f(x)|^2 \, dx$$

et, par (67), on a

$$\begin{aligned}(1-\varepsilon) \int_C |\nabla f(x)|^2 \, dx - C \int_C |f(x)|^2 \, dx \\ \leq q_A(f) \leq (1+\varepsilon) \int_C |\nabla f(x)|^2 \, dx + C \int_C |f(x)|^2 \, dx.\end{aligned}$$

On voit donc que l'espace $\mathcal{Q}(A)$ n'est rien d'autre que $H^1_{\text{per}}(C)$. Quitte à ajouter une constante à V on peut donc, sans perte de généralité, supposer que la forme quadratique q_A est positive et équivalente à la norme de $H^1_{\text{per}}(C)$.

On travaille dans l'espace V_h engendré par les ondes planes $e^{ik\cdot x}$ avec $k \in \mathscr{L}^*$ vérifiant $|k| \leq h^{-1}$. C'est-à-dire, on ne garde que les fréquences dans une boule de rayon $1/h$. Comme l'opérateur $-|\nabla + i\xi|^2$ est déjà diagonalisé dans cette base, il nous suffira d'étudier les propriétés d'approximation de la fonction $V(x)$ par les séries de Fourier tronquées. À cause de l'équivalence des normes, on a

$$\begin{aligned}\sqrt{q_A(f - \Pi_h f)} &= \min_{f_h \in V_h} \sqrt{q_A(f - f_h)} \\ &\leq C \min_{f_h \in V_h} \|f - f_h\|_{H^1_{\text{per}}(C)} = C\|f - \Pi'_h f\|_{H^1_{\text{per}}(C)}\end{aligned}$$

où Π_h est le projecteur associé à q_A alors que Π'_h est celui associé à la norme de $H^1_{\text{per}}(C)$, qui consiste juste à tronquer la série de Fourier de f pour ne garder que les fréquences $|k| \leq 1/h$.

Lemme 104. *Si $f \in H^r_{\text{per}}(C)$ avec $r \geq 2$, alors on a*

$$\|f - \Pi'_h f\|_{H^1_{\text{per}}(C)} \leq h^{r-1} \|f\|_{H^r_{\text{per}}(C)}.$$

Démonstration. Puisque $\Pi'_h f$ consiste juste à tronquer la série de Fourier de f, on a

$$\begin{aligned}\|f - \Pi'_h f\|^2_{H^1_{\text{per}}(C)} &= \sum_{\substack{k \in \mathscr{L}^* \\ |k| > 1/h}} (1 + |k|^2)|c_k(f)|^2 \\ &\leq \frac{1}{(1+h^{-2})^{r-1}} \sum_{\substack{k \in \mathscr{L}^* \\ |k| > 1/h}} (1 + |k|^2)^r |c_k(f)|^2 \\ &= \frac{h^{2r-2}}{(1+h^2)^{r-1}} \|f - \Pi'_h f\|^2_{H^r_{\text{per}}(C)},\end{aligned}$$

où $c_k(f)$ est le $k$ième coefficient de Fourier de f. □

En appliquant les théorèmes 97 et 100, on en déduit alors immédiatement le résultat suivant.

Théorème 105 (Convergence des éléments propres)**.** *Soit $C \subset \mathbb{R}^d$ la cellule unité d'un réseau périodique $\mathscr{L}$, $V \in L^p(C)$ une fonction à valeurs réelles avec p comme en* (109)*, et ξ un vecteur quelconque de la zone de Brillouin $\overline{B}$. On pose*

$$V_h = \text{Vect } \left\{ e^{ik\cdot x},\ k \in \mathscr{L}^*,\ |k| \leq 1/h \right\}$$

et on considère l'opérateur $A = -|\nabla + i\xi|^2 + V(x)$ qui est auto-adjoint sur $H^2_{\text{per}}(C)$. Alors on a pour tout $m \geq 1$

$$|\lambda_m - \lambda_{m,h}| \leq C_m h^{2r-2}. \tag{110}$$

Si λ_m est simple, alors

$$\|u_m - u_{m,h}\|_{H^1_{\text{per}}(C)} \leq C'_m h^{r-1} \tag{111}$$

où $r \geq 2$ est la plus grande puissance telle que les m premiers vecteurs propres de A sont dans $H^m_{\text{per}}(C)$.

Remarque 106. *La plus grande puissance r possible dépend de la régularité de la fonction V. Si la fonction V a toutes ses dérivées $\partial^\alpha V$ dans $L^p(C)$ avec p vérifiant* (109) *pour tout multi-indice $|\alpha| \leq \ell$, et si $\partial^\alpha V$ vérifie la condition de périodicité au bord de C pour tout $|\alpha| \leq \ell - 1$, alors on peut montrer en dérivant l'équation aux valeurs propres que les fonctions propres sont dans $H^{2+\ell}_{\text{per}}(C)$.*

A Rappels sur les espaces de Sobolev

Les espaces de Sobolev jouent un rôle essentiel dans l'analyse des équations aux dérivées partielles. Ils permettent de formuler des problèmes variationnels ou dépendant du temps dans un sens "faible" qui est cependant plus restrictif qu'au sens des distributions. Il est donc plus proche des solutions "fortes". Par ailleurs, comme nous avons expliqué à la section 2, les espaces de Sobolev apparaissent naturellement comme domaines du Laplacien, vu en tant qu'opérateur auto-adjoint.

Nous donnons ici les outils principaux sans preuve et renvoyons aux livres [17, 10, 2, 1, 11] pour plus de détails. Alors que les espaces de Sobolev sur tout l'espace $\mathbb{R}^d$ sont des objets assez simples (grâce à l'utilisation possible de la transformée de Fourier), le cas des domaines bornés est beaucoup plus technique et difficile. La régularité de la frontière joue en effet un rôle important. Heureusement, les mathématiciens ont travaillé d'arrache pied dans les années 50–70 pour arriver à des énoncés satisfaisants, et que nous pouvons maintenant utiliser.

A.1 Définition

Soit Ω un ouvert de $\mathbb{R}^d$. L'espace de Sobolev $H^k(\Omega)$ est défini par

$$H^k(\Omega) = \Big\{ f \in L^2(\Omega) \text{ tels que } \partial^\alpha f \in L^2(\Omega), \text{ pour tout multi-indice } |\alpha| \leq k \Big\}. \tag{112}$$

Ici $\partial^\alpha f = \partial^{\alpha_1}_{x_1} \cdots \partial^{\alpha_d}_{x_d} f$ pour $\alpha = (\alpha_1, ..., \alpha_d)$ est la dérivée au sens des distributions de la fonction f dans Ω, et $|\alpha| = \alpha_1 + \cdots + \alpha_d$. Dans la définition de

$H^k(\Omega)$ on demande donc que toutes les dérivées de f au sens des distributions, d'ordre inférieur à k, s'identifient à des fonctions de $L^2(\Omega)$. On peut montrer que $H^k(\Omega)$ est un espace de Hilbert, muni du produit scalaire

$$\langle f, g\rangle_{H^k(\Omega)} := \sum_{|\alpha|\leq k} \langle \partial^\alpha f, \partial^\alpha g\rangle_{L^2(\Omega)}. \tag{113}$$

L'espace de Sobolev $W^{k,p}(\Omega)$ est défini de façon similaire en remplaçant $L^2(\Omega)$ par $L^p(\Omega)$ partout. C'est alors un espace de Banach mais dans ce cours nous n'utilisons que le cas le plus simple de l'espace de Hilbert $H^k(\Omega)$.

L'espace $H^k_0(\Omega)$ est défini comme la fermeture de $C^\infty_c(\Omega)$ pour la norme de $H^k(\Omega)$. C'est un sous-espace fermé qui est en général différent de $H^k(\Omega)$. Intuitivement, il contient les fonctions qui s'annulent au bord, alors que les fonctions de $H^k(\Omega)$ peuvent prendre n'importe quelle valeur au bord. Pour l'instant nous n'avons cependant pas encore discuté du bord de Ω. Le résultat suivant précise que $H^k(\Omega)$ est lui même la fermeture de $C^\infty(\Omega)$ pour sa norme.

Théorème 107 (Meyers-Serrin)**.** *Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un ouvert borné. Alors $C^\infty(\Omega)$ est dense dans $H^k(\Omega)$ pour la norme induite par le produit scalaire* (113)*.*

La preuve du théorème est difficile lorsque Ω est quelconque, mais plus simple si Ω est suffisamment régulier.

A.2 Espace de Sobolev sur l'intervalle $]0,1[$

Pour toute fonction $f \in L^1(]0,1[)$ dont la dérivée au sens des distributions est aussi dans $L^1(]0,1[)$ on a pour presque tous $x, y \in]0,1[$

$$f(x) = f(y) + \int_y^x f'(t)\,dt, \tag{114}$$

et donc, en intégrant par rapport à y,

$$f(x) = \int_0^1 f(y)\,dy + \int_0^1 \int_y^x f'(t)\,dt\,dy. \tag{115}$$

La fonction à droite est continue sur $]0,1[$ et admet des limites à gauche et à droite en 1 et en 0, respectivement. Ainsi f coincide presque partout avec une fonction continue sur $[0,1]$, et on a l'estimée

$$\sup_{x\in[0,1]} |f(x)| \leq \|f\|_{L^1(]0,1[)} + \|f'\|_{L^1(]0,1[)}\,.$$

Si $f \in L^2(]0,1[)$ et $f' \in L^2(]0,1[)$ alors ces fonctions sont *a fortiori* dans $L^1(]0,1[)$ et f est donc continue sur $[0,1]$. Mais on peut obtenir de meilleures estimées. Par exemple, on peut écrire

$$|f(x)|^2 - |f(y)|^2 = 2\Re \int_y^x \overline{f(t)} f'(t)\,dt.$$

Si $f \in H^1(]0,1[)$ alors f et f' sont par hypothèse dans $L^2(]0,1[)$ donc leur produit est bien dans $L^1(]0,1[)$ par l'inégalité de Cauchy-Schwarz. En intégrant sur $]0,1[$ par rapport à y, on obtient la relation

$$|f(x)|^2 = 2\Re \int_0^1 \left(\int_y^x \overline{f(t)} f'(t)\,dt \right) dy + \int_0^1 |f(y)|^2\,dy.$$

pour presque tout $x \in]0,1[$. La fonction de droite est uniformément bornée par rapport à x, puisque

$$\int_0^1 \left(\int_y^x |\overline{f(t)} f'(t)| \, dt \right) dy \leq \|f\|_{L^2(]0,1[)} \, \|f'\|_{L^2(]0,1[)} \, . \tag{116}$$

Elle est même continue et admet une limite quand x tend vers 0 par la droite ou vers 1 par la gauche. Donc $f \in C^0([0,1])$ et

$$\sup_{[0,1]} |f|^2 \leq \|f\|_{L^2(]0,1[)} \, \|f'\|_{L^2(]0,1[)} + \|f\|^2_{L^2(]0,1[)} \, . \tag{117}$$

Quand on prend la racine carrée, la dérivée apparait avec une puissance $1/2$, ce qui peut être utile dans certaines applications. En fait, f est même Höldérienne d'exposant $1/2$ puisqu'on peut écrire également, en revenant à (114)

$$|f(x) - f(y)| \leq \left| \int_y^x |f'(t)| \, dt \right| \leq |x-y|^{1/2} \, \|f'\|_{L^2(]0,1[)} \, .$$

Ainsi, nous avons montré que les fonctions de $H^1(]0,1[)$ sont Höldériennes d'exposant $1/2$ et uniformément bornées sur $[0,1]$.

De la même manière, les fonctions $f \in H^2(]0,1[)$ sont de classe $C^1([0,1])$ et leur dérivée f' est Höldérienne d'exposant $1/2$. En itérant l'argument, nous avons donc montré le lemme suivant.

Lemme 108 (Restriction au bord pour $H^k(]0,1[)$)**.** *Pour $k \geq 1$, on a l'injection continue*

$$H^k(]0,1[) \subset C^{k-1}([0,1]).$$

L'application de restriction au bord

$$f \in H^k(]0,1[) \mapsto \big(f(0), ..., f^{(k-1)}(0), f(1), ..., f^{(k-1)}(1)\big) \in \mathbb{C}^{2k} \tag{118}$$

est donc continue.

Évidemment, en prenant pour f un polynôme de degré suffisamment élevé, il est clair que l'application de restriction au bord (118) est aussi surjective.

Pour le théorème de régularité elliptique sur $]0,1[$, voir le lemme 19.

Exercice 109 (Lien avec les séries de Fourier sur l'intervalle $]0,1[$)**.** *Pour $f \in L^2(]0,1[)$ on appelle $c_n(f) = \int_0^1 f(t) e^{-2i\pi nt} \, dt$ son nième coefficient de Fourier. On rappelle que $(e^{2i\pi nt})_{n\in\mathbb{Z}}$ forme une base orthonormée de $L^2(]0,1[)$. Calculer $c_n(f)$ pour $f(x) = x$. Si $f \in H^1(]0,1[)$, a-t-on toujours $\sum_{n\in\mathbb{Z}} n^2 |c_n(f)|^2 < \infty$? On appelle*

$$H^1_{\text{per}}(]0,1[) = \left\{ f \in H^1(]0,1[) \ : \ \sum_{n\in\mathbb{Z}} n^2 |c_n(f)|^2 < \infty \right\}.$$

Donner une caractérisation de cet espace en fonction des valeurs au bord $f(0)$ et $f(1)$.

On rappelle que $(\cos(\pi nt))_{n\geq 0}$ et $(\sin(\pi nt))_{n\geq 1}$ forment deux bases orthonormées de $L^2(]0,1[)$. Penser en effet à l'application

$$f \in L^2(]0,1[) \mapsto f(x) \mathbb{1}_{]0,1[}(x) \pm f(-x) \mathbb{1}_{]-1,0[}(x) \in L^2(]-1,1[)$$

définie par parité ou imparité. On appelle

$$d_n^+(f) = \int_0^1 \cos(\pi n t) f(t)\, dt, \qquad d_n^-(f) = \int_0^1 \sin(\pi n t) f(t)\, dt$$

les coefficients de Fourier correspondants. Montrer que

$$H^1(]0,1[) = \left\{ f \in L^2(]0,1[) \ : \sum_{n\geq 0} n^2 |d_n^+(f)|^2 < \infty \right\}.$$

Calculer $d_n^\pm(f)$ pour $f(x) = x$ et en déduire que ce résultat ne se généralise pas à $d_n^-(f)$ ou à $H^k(]0,1[)$ pour $k \geq 2$.

A.3 Espace de Sobolev sur $\mathbb{R}^d$

Comme on a

$$\widehat{\partial^\alpha f}(p) = \prod_{j=1}^d (ip_j)^{\alpha_j} \widehat{f}(p),$$

on déduit de la formule de Parseval qu'une fonction f appartient à $H^k(\mathbb{R}^d)$ si et seulement si sa transformée de Fourier $\widehat{f}$ est telle que $|p|^k \widehat{f}(p)$ appartient à $L^2(\mathbb{R}^d)$. Ainsi,

$$H^k(\mathbb{R}^d) = \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}^d) \ : \ \int_{\mathbb{R}^d} (1+|p|^2)^k |\widehat{f}(p)|^2\, dp < \infty \right\}. \tag{119}$$

De plus, on voit que $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$ et $\Delta^k f \in L^2(\mathbb{R}^d)$ impliquent immédiatement que toutes les autres dérivées d'ordre $\leq 2k$ sont également dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, une propriété appelée *régularité elliptique* déjà rencontrée aux sections 3 et 5.

La définition de $H^k(\mathbb{R}^d)$ à l'équation (119) s'étend immédiatement au cas où k n'est pas entier.

A.4 Trace, relèvement, prolongement

Nous avons déjà vu qu'il était possible de définir la trace au bord d'un intervalle pour une fonction $f \in H^1(]0,1[)$, cette trace étant juste le vecteur composé des deux valeurs $f(0)$ et $f(1)$ de la fonction continue f. En dimension supérieure, la situation est un peu plus délicate. Il est possible de définir la trace au bord, mais c'est un objet défini presque partout (dans $L^2(\partial\Omega)$) car en général f ne s'identifie pas à une fonction continue. Le théorème principal est le suivant.

Théorème 110 (Trace)**.** *Soit Ω un ouvert borné de $\mathbb{R}^d$ dont la frontière est Lipschitzienne. Alors il existe une unique application continue*

$$\begin{array}{ccc} H^1(\Omega) & \to & L^2(\partial\Omega) \\ f & \mapsto & f_{|\partial\Omega} \end{array} \tag{120}$$

qui coincide avec la restriction au bord lorsque $f \in H^1(\Omega) \cap C^0(\overline{\Omega})$. De plus, on a

$$\|f\|^2_{L^2(\partial\Omega)} \leq C \|f\|_{L^2(\Omega)} \|f\|_{H^1(\Omega)} \tag{121}$$

où la constante C ne dépend que de Ω.

Plus généralement, si Ω est de classe $C^{k-1,1}$ (ou l'union d'un nombre fini de telles sous-variétés qui s'intersectent transversalement)[3]*, il existe une unique application continue*

$$\begin{array}{ccc} H^k(\Omega) & \to & L^2(\partial\Omega)^k \\ f & \mapsto & \left(f_{|\partial\Omega}, ..., \partial_n^{k-1} f_{|\partial\Omega}\right) \end{array} \tag{122}$$

qui coincide avec la restriction au bord lorsque $f \in H^k(\Omega) \cap C^k(\overline{\Omega})$, où $\partial_n = n \cdot \nabla$ désigne la dérivée dans la direction de la normale sortante n sur $\partial\Omega$, avec

$$\sum_{j=0}^{k-1} \left\|\partial_n^j f_{|\partial\Omega}\right\|_{L^2(\partial\Omega)} \leq C \|f\|_{H^{k-1}(\Omega)} \|f\|_{H^k(\Omega)}.$$

Finalement, on a $f \in H_0^k(\Omega)$ (la fermeture de $C_c^\infty(\Omega)$ dans $H^k(\Omega)$) si et seulement si $f \in H^k(\Omega)$ et toutes ses traces s'annulent : $f_{|\partial\Omega} = \cdots = \partial_n^{k-1} f_{|\partial\Omega} = 0$.

Pour la preuve de l'inégalité (121), voir par exemple [11, Thm. 1.5.1.10]. L'idée est d'appliquer la formule de Green

$$2\Re \int_\Omega \overline{u}\, F \cdot \nabla u = \int_\Omega F \cdot \nabla |u|^2 = -\int_\Omega |u|^2 \mathrm{div} F + \int_{\partial\Omega} |u|^2 F \cdot n$$

pour un champ de vecteur $F \in C^1(\overline{\Omega})$ tel que $F \cdot n \geq 1$ sur $\partial\Omega$ (une régularisation de n lui même). Le fait que (121) fasse intervenir les deux normes L^2 et H^1 est très utile. Nous l'avons déjà rencontré dans le cas de la dimension 1 à l'équation (117) et l'avons utilisé dans la preuve du théorème 30.

Il est légitime de se demander quel espace parcourt $f_{|\partial\Omega}$ lorsque f parcourt $H^k(\Omega)$, et il se trouve que ce dernier est toujours plus petit que $L^2(\partial\Omega)$ (en dimension $d \geq 2$). Dit autrement, l'application de trace (120) n'est *pas* surjective sur $L^2(\partial\Omega)$, son image est strictement incluse dans $L^2(\partial\Omega)$. Cependant, son image est dense car on peut "relever" n'importe quelle condition au bord suffisamment lisse donnée à l'avance.

Théorème 111 (Relèvement lisse)**.** *Si Ω est de classe $C^{k-1,1}$ et $g_j \in C^{k-1-j}(\partial\Omega)$ pour $j = 0, ..., k-1$, alors il existe une fonction $f \in H^k(\Omega)$ telle que $\partial_n^j f_{|\Omega} = g_j$.*

Le résultat est le même si $\partial\Omega$ est l'union de plusieurs surfaces lisses, auquel cas il faut prendre les g_j à support dans les faces en question. L'idée de la construction est assez simple. On utilise d'abord des partitions de l'unité de façon à se ramener au cas où les g_j ont un petit support. Alors, sur ce support la frontière $\partial\Omega$ est presque plate. Par exemple si $k = 2$ et $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ est exactement égal au demi espace $\{x_d > 0\}$ au voisinage du support de g_0 et g_1, alors on peut simplement prendre

$$f(x_1, ..., x_d) = \Big(g_0(x_1, ..., x_{d-1}) - x_d g_1(x_1, ..., x_{d-1})\Big)\eta(x_1, ..., x_d)$$

où η est une fonction C^∞ à support compact, qui localise au voisinage de la frontière. Le cas général s'en déduit par l'utilisation de cartes locales.

3. On rappelle qu'une fonction est de classe $C^{k-1,1}$ lorsque qu'elle est C^{k-1} et sa $(k-1)$ème dérivée est Lipschitzienne. Pour un domaine Ω cela signifie que sa frontière $\partial\Omega$ est localement le graphe d'une fonction de classe $C^{k-1,1}$.

Il est en fait possible d'identifier précisément l'image de la restriction au bord. L'espace de Sobolev fractionnaire est défini par sa norme

$$\|f\|^2_{H^s(\partial\Omega)} = \int_{\partial\Omega}\int_{\partial\Omega} \frac{|f(x)-f(y)|^2}{|x-y|^{2s+2d-2}}\,dx\,dy$$

pour $0 < s < 1$, et par la condition que les dérivées d'ordre $[s]$ appartiennent à $H^{s-[s]}$ si $s > 1$. On peut montrer que $\partial_n^j f_{|\partial\Omega}$ décrit tout $H^{k-j-1/2}(\partial\Omega)$ quand f décrit $H^k(\Omega)$ et que Ω est de classe $C^{k-1,1}$ (voir par exemple [11, Thm 1.5.1.2]). Bien sûr, l'application ne peut pas être injective car on peut changer la fonction f à l'intérieur de Ω à sa guise sans changer ses valeurs au bord. Cependant, il est possible de construire un relèvement qui est continu pour les normes en question.

Théorème 112 (Relèvement)**.** *Soit Ω un ouvert de classe $C^{k-1,1}$. Il existe une application continue*

$$R : (g_0, ..., g_{k-1}) \in \prod_{j=0}^{k-1} H^{k-j-1/2}(\partial\Omega) \mapsto f \in H^k(\Omega)$$

telle que $\partial_n^j f = g_j$ et

$$\|f\|_{H^k(\Omega)} \leq C \sum_{j=0}^{k-1} \|g_j\|_{H^{k-j-1/2}(\partial\Omega)}\,. \tag{123}$$

La fonction f peut être construite de sorte qu'elle soit à support aussi proche que l'on veut du bord, mais la constante C explose lorsque la distance voulue décroit. Tel quel le théorème n'est pas vrai si Ω est l'union de faces qui sont des sous-variétés de classe $C^{k-1,1}$ car, si les fonctions g_j sont bien dans $H^{k-j-1/2}(F_i)$ pour chaque face F_i, il peut y avoir des conditions de compatibilité supplémentaires sur les arêtes, en fonction de la dimension d et de la valeur de k. Par exemple en dimension $d = 3$, les fonctions de $H^2(\Omega)$ sont toutes continues sur $\overline{\Omega}$, ce qui implique des conditions de continuité sur les arêtes pour $f_{|\partial\Omega}$, sans qu'il n'y ait aucune condition particulière pour $\partial_n f_{|\partial\Omega}$.

Il est possible d'utiliser le théorème 112 pour étendre une fonction de $H^k(\Omega)$ en une fonction de $H^k(\mathbb{R}^d)$: on applique le résultat sur le complémentaire $\mathbb{R}^d \setminus \Omega$ (ou un voisinage de $\partial\Omega$ dans ce complémentaire), de sorte que les restrictions au bord de la fonction sur $\mathbb{R}^d \setminus \Omega$ coincident toutes avec celles de f. En utilisant la formule de Green, on peut alors vérifier que la compatibilité de toutes les restrictions est suffisante pour que la fonction ainsi construite soit dans $H^k(\mathbb{R}^d)$.

Cependant, cette construction basée sur la continuité des traces et le prolongement hors de Ω nécessite des hypothèses fortes sur le domaine Ω, puisqu'il est nécessaire de connaitre les espaces exacts dans lesquels vivent les traces de f. Il est en fait possible d'étendre une fonction de $H^k(\Omega)$ sans utiliser les traces, ce qui requiert alors une très faible régularité pour Ω (voir par exemple [11, Thm 1.4.3.1]).

Théorème 113 (Prolongement)**.** *Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un ouvert borné, dont la frontière est Lipschitzienne. Alors il existe une application linéaire continue*

$$f \in H^k(\Omega) \mapsto \tilde{f} \in H^k(\mathbb{R}^d)$$

telle que $\tilde{f}\mathbb{1}_\Omega = f$ *et*

$$\|\tilde{f}\|_{H^k(\mathbb{R}^d)} \leq C\|f\|_{H^k(\Omega)} \tag{124}$$

Ce résultat est très important pour pouvoir étendre facilement à un domaine borné des propriétés prouvées dans $\mathbb{R}^d$. Nous en verrons un exemple à la section suivante. Une fois de plus, on peut demander que l'extension soit à support aussi proche que l'on veut de la frontière de Ω, mais la constante C diverge lorsque la distance tend vers 0.

A.5 Injections de Sobolev et compacité de Rellich

Nous arrivons maintenant aux injections de Sobolev, qui précisent que les fonctions de $H^k(\Omega)$ sont en fait dans $L^p(\Omega)$ avec $p > 2$, l'injection étant compacte lorsque Ω est borné. Mais commençons plutôt par le cas de tout l'espace.

Théorème 114 (Inégalité de Sobolev)**.** *Soit $d \geq 3$. Il existe une constante $C = C(d)$ telle que, pour tout $f \in H^1(\mathbb{R}^d)$, on ait*

$$\int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^{p^*}\, dx \leq C \left(\int_{\mathbb{R}^d} |\nabla f(x)|^2\, dx \right)^{p^*/2} \tag{125}$$

avec

$$p^* = \frac{2d}{d-2}.$$

La valeur de p^* est imposée par l'invariance des deux termes de l'inégalité (125) par les dilatations d'espace.

Exercice 115. *Vérifier que la puissance p^* est la seule pour laquelle les deux termes de* (125) *ont le même comportement en λ, lorsque f est remplacée par $f(\lambda x)$ pour $\lambda > 0$.*

Ainsi, on a une injection $H^1(\mathbb{R}^d) \hookrightarrow L^{p^*}(\mathbb{R}^d)$ continue et, par le théorème de Hölder, on déduit immédiatement l'inégalité de Gagliardo-Nirenberg

$$\|f\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \leq \|f\|^{1-\theta}_{L^2(\mathbb{R}^d)} \|f\|^{\theta}_{L^{p^*}(\mathbb{R}^d)} \leq C \|f\|^{1-\theta}_{L^2(\mathbb{R}^d)} \|\nabla f\|^{\theta}_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq C \|f\|_{H^1(\mathbb{R}^d)} \tag{126}$$

avec

$$\frac{1}{p} = \frac{1-\theta}{2} + \frac{\theta}{p^*}.$$

Nous fournissons une preuve très simple de l'inégalité de Sobolev (125) issue de [4].

Démonstration. Soit $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ et $K := \|\nabla f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}$. On écrit d'abord

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^{\frac{2d}{d-2}}\, dx &= \frac{d-2}{d+2} \int_{\mathbb{R}^d} \int_0^\infty \lambda^{\frac{2d}{d-2}-1} \mathbb{1}(|f(x)| \geq \lambda)\, d\lambda\, dx \\ &= \frac{d-2}{d+2} \int_0^\infty \lambda^{\frac{2d}{d-2}-1} |\{x \ : \ |f(x)| \geq \lambda\}|\, d\lambda. \end{aligned} \tag{127}$$

Il faut maintenant estimer $|\{x \ : \ |f(x)| \geq \lambda\}|$ pour tout λ. On écrit $f = v + w$ avec $\widehat{v}(k) = \widehat{f}(k)\chi(|k|/a)$, où a est un paramètre dépendant de λ qui sera fixé

plus tard et $0 \leq \chi \leq 1$ une fonction à support compact telle que $\chi_{|[0,1]} \equiv 1$ et $\chi_{|[2,\infty)} \equiv 0$. On utilise alors que

$$|\{|f(x)| \geq \lambda\}| \leq |\{|v(x)| \geq \lambda/2\}| + |\{|w(x)| \geq \lambda/2\}|$$

et on choisit a de sorte que $\|v\|_{L^\infty} \leq \lambda/2$, ce qui donne $|\{|v(x)| \geq \lambda/2\}| = 0$. En fait, on a

$$\begin{aligned}
\|v\|_{L^\infty} &\leq (2\pi)^{-d} \int_{|k|\leq a} |\widehat{f}(k)|\, dk \\
&\leq (2\pi)^{-d} \left(\int_{|k|\leq a} \frac{dk}{|k|^2} \right)^{1/2} \left(\int_{|k|\leq a} |k|^2 |\widehat{f}(k)|^2 dk \right)^{1/2} \\
&\leq C\, a^{\frac{d-2}{2}}\, \|\nabla f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = C\, K\, a^{\frac{d-2}{2}}, \qquad (128)
\end{aligned}$$

qui suggère de prendre $a^{\frac{d-2}{2}} = \lambda/(2CK) \iff a = C'(\lambda/K)^{\frac{2}{d-2}}$. Il reste à estimer le terme impliquant w, pour lequel nous écrivons

$$|\{|w(x)| \geq \lambda/2\}| \leq \frac{1}{\lambda^2} \int_{\mathbb{R}^d} |w|^2 \leq \frac{1}{\lambda^2} \int_{|k|\geq a} |\widehat{f}|^2.$$

En insérant dans (127), on obtient

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^{\frac{2d}{d-2}}\, dx &\leq C \int_0^\infty \lambda^{\frac{2d}{d-2}-1} \frac{1}{\lambda^2} \int_{|k|\geq a} |\widehat{f}|^2\, d\lambda \\
&\leq C \int_0^\infty \lambda^{\frac{6-d}{d-2}} \int_{|k|\geq C'(\lambda/K)^{\frac{2}{d-2}}} |\widehat{f}|^2\, dk\, d\lambda \\
&= CK^{\frac{4}{d-2}} \int |k|^2 |\widehat{f}|^2\, dk = CK^{\frac{2d}{d-2}}.
\end{aligned}$$

Nous avons prouvé l'inégalité pour $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ mais le cas général suit par densité. □

Remarque 116. *Comme la norme L^2 de f n'apparait pas dans l'inégalité* (125)*, l'hypothèse $f \in H^1(\mathbb{R}^d)$ est un peu trop forte. Il est seulement nécessaire de supposer que $\nabla f \in L^2(\mathbb{R}^d)$ et que f tend vers 0 à l'infini au sens faible, c'est-à-dire que $\{x \in \mathbb{R}^d \ : \ |f(x)| \geq \lambda\}$ soit de mesure finie pour tout $\lambda > 0$. Cette hypothèse est nécessaire car sinon on pourrait prendre f constante, pour laquelle l'inégalité* (125) *est évidemment fausse. On vérifiera que la preuve ci-dessus utilise seulement cette propriété de convergence vers 0.*

Exercice 117. *En utilisant la même preuve que celle du théorème 114, montrer que lorsque $s < d/2$ (s non nécessairement entier), on a*

$$\int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^{p^*}\, dx \leq C \left(\int_{\mathbb{R}^d} |k|^{2s} |\widehat{f}(k)|^2\, dk \right)^{p^*/2} \qquad (129)$$

avec

$$p^* = \frac{2d}{d-2s}.$$

En dimension 1 on peut utiliser la formule

$$|f(x)|^2 = 2\Re \int_{-\infty}^{x} \overline{f(t)}\, f'(t)\, dt$$

qui démontre aisément que $H^1(\mathbb{R}) \hookrightarrow L^\infty(\mathbb{R})$ (en fait on a même injection dans l'espace $C_0^0(\mathbb{R})$ des fonctions continues qui tendent vers 0 à l'infini) et donc $H^1(\mathbb{R}) \hookrightarrow L^p(\mathbb{R})$ pour tout $2 \leq p \leq \infty$ par l'inégalité de Hölder. En dimension deux, on n'a pas d'injection continue dans $L^\infty(\mathbb{R}^2)$, mais par contre l'injection continue dans $L^p(\mathbb{R}^2)$ est vraie pour tout $2 \leq p < \infty$. Le théorème général est le suivant.

Théorème 118 (Injections de Sobolev dans $\mathbb{R}^d$)**.**
• *Si $2k < d$, on a l'injection continue*

$$H^k(\mathbb{R}^d) \hookrightarrow L^p(\mathbb{R}^d), \qquad \forall 2 \leq p \leq \frac{2d}{d-2k}. \tag{130}$$

• *Si $2k = d$, on a*

$$H^k(\mathbb{R}^d) \hookrightarrow L^p(\mathbb{R}^d), \qquad \forall 2 \leq p < \infty. \tag{131}$$

• *Si $2k > d$, on a*

$$H^k(\mathbb{R}^d) \hookrightarrow C_b^{\ell,\theta}(\mathbb{R}^d) \tag{132}$$

où ℓ est l'unique entier tel que $0 \leq \ell < k - d/2 < \ell + 1$ et $\theta = k - \ell - d/2$.

Nous voudrions insister sur le fait que les injections "sous-critiques" (c'est-à-dire par exemple pour $p < 2d/(d-2k)$ lorsque $k < d/2$) ne sont pas très difficiles. Il est bien plus difficile de montrer celle pour $p = 2d/(d-2k)$, ce que nous avons vu au théorème 114 pour $k = 1$ en dimension $d \geq 3$ (mais la preuve est la même pour $k < d/2$ comme vu à l'exercice 117). Et en fait, le cas critique implique immédiatement celles pour $p < 2d/(d-2k)$, par l'inégalité de Hölder :

$$\begin{aligned}\|f\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \leq \|f\|^{\theta}_{L^2(\mathbb{R}^d)} \|f\|^{1-\theta}_{L^{p^*}(\mathbb{R}^d)} &\leq C \|f\|^{\theta}_{L^2(\mathbb{R}^d)} \left(\int_{\mathbb{R}^d} |\xi|^{2k} |\widehat{f}(\xi)|^2 \, d\xi \right)^{\frac{1-\theta}{2}} \\ &\leq C \int_{\mathbb{R}^d} (1+|\xi|^2)^k |\widehat{f}(\xi)|^2 \, dx = C \|f\|_{H^k(\mathbb{R}^d)},\end{aligned}$$

avec

$$\frac{1}{p} = \frac{\theta}{2} + \frac{1-\theta}{p^*}.$$

Expliquons rapidement comment on peut démontrer les inégalités dans le cas sous-critique. D'après la caractérisation avec la transformée de Fourier, une fonction f appartient à $H^k(\mathbb{R}^d)$ si et seulement si elle peut s'écrire en Fourier

$$\widehat{f}(\xi) = \frac{\widehat{g}(\xi)}{(1+|\xi|^2)^{k/2}}$$

avec $g \in L^2(\mathbb{R}^d)$. De plus la norme L^2 de g est équivalente à la norme H^k de f. En variables d'espace, la formule peut s'écrire

$$f(x) = \int_{\mathbb{R}^d} h_k(x-y) g(y)\, dy$$

où h_k est la fonction telle que

$$\widehat{h_k}(\xi) = \frac{(2\pi)^{d/2}}{(1+|\xi|^2)^{k/2}}.$$

Ainsi, nous sommes ramenés à prouver que si $g \in L^2(\mathbb{R}^d)$, alors $h_k * g$ appartient à $L^p(\mathbb{R}^d)$ pour $2 \leq p \leq 2d/(d-2k)$ si $k < d/2$, et appartient à des espaces de fonctions plus lisses sinon. Dans le cas sous-critique, ceci suit simplement des propriétés élémentaires de la convolution alors que dans le cas de $p = 2d/(d-2k)$, c'est l'inégalité de Hardy-Littlewood-Sobolev qui est équivalente à l'inégalité de Sobolev [17].

Il n'est pas dificile de vérifier que h_k décroit plus vite que tout polynôme à l'infini, ce qui est dû au fait que sa transformée de Fourier est très régulière (en fait, analytique). Par exemple,

$$\left|(\nabla_\xi)^\ell \frac{1}{(1+|\xi|^2)^{k/2}}\right| \leq \frac{C}{(1+|\xi|^2)^{\frac{k+\ell}{2}}}$$

qui appartient à $L^1(\mathbb{R}^d)$ pour $\ell > d-k$, et implique donc que $|x|^\ell h_k(x)$ appartient à $L^\infty(\mathbb{R}^d)$ pour $\ell > d-k$, puisque la transformée de Fourier inverse d'une fonction L^1 est bornée. Par contre, h_k n'est en général pas continue en 0, sauf si sa transformée de Fourier est intégrable, ce qui demande que $k > d$. C'est le comportement en 0 de la fonction h_k qui détermine précisément les exposants autorisés dans les inégalités de Sobolev. Un peu d'analyse harmonique (phase stationnaire) fournit

$$h_k(x) \begin{cases} \underset{x\to 0}{\sim} \dfrac{C_{d,k}}{|x|^{d-k}}, & \text{pour } k < d, \\ \underset{x\to 0}{\sim} C_{d,k} \log|x|, & \text{pour } k = d, \end{cases} \tag{133}$$

alors que h_k est continue en 0 lorsque $k > d$, comme nous l'avons déjà dit. On déduit donc de cette discussion que

$$h_k \in \begin{cases} L^p(\mathbb{R}^d), \quad 1 \leq p < \frac{d}{d-k}, & \text{pour } k < d, \\ L^p(\mathbb{R}^d), \quad 1 \leq p < \infty, & \text{pour } k = d, \\ L^1(\mathbb{R}^d) \cap L^\infty(\mathbb{R}^d), & \text{pour } k > d. \end{cases} \tag{134}$$

Il reste alors à utiliser l'inégalité de Young

$$\|f * g\|_{L^r(\mathbb{R}^d)} \leq \|f\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \|g\|_{L^q(\mathbb{R}^d)}, \qquad \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1 + \frac{1}{r}, \tag{135}$$

pour conclure la preuve du théorème 118 dans les cas sous-critiques.

Exercice 119. *En utilisant l'inégalité de Young et les informations* (134) *sur la fonction h_k, montrer que*

$$H^k(\mathbb{R}^d) \hookrightarrow \begin{cases} L^p(\mathbb{R}^d), \quad 2 \leq p < \frac{2d}{d-2k} & \textit{pour } k < d/2 \\ L^p(\mathbb{R}^d), \quad 2 \leq p < \infty & \textit{pour } k = d/2 \\ L^2(\mathbb{R}^d) \cap L^\infty(\mathbb{R}^d) \cap C^0(\mathbb{R}^d), & \textit{pour } k > d/2. \end{cases}$$

On rappelle aussi que si $r = \infty$ dans (135)*, on a même que $f * g$ est une fonction continue bornée. Réfléchir également aux injections de Morrey* (132)*.*

Exercice 120. *Démontrer* (133).

Exercice 121. *En utiisant*

$$\|f\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \leq \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} |\widehat{f}(\xi)|\, d\xi$$

et l'inégalité de Cauchy-Schwarz, retrouver directement l'estimée $\|f\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \leq C\,\|f\|_{H^k(\mathbb{R}^d)}$ *pour* $k > d/2$.

Dans le cas $k = d/2$, *faire une preuve similaire en utilisant l'inégalité de* Hausdorff-Young *qui stipule que*

$$\|f\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \leq C\|\widehat{f}\|_{L^q(\mathbb{R}^d)} \tag{136}$$

pour $1 \leq q \leq 2$ *et* $p^{-1} + q^{-1} = 1$.

Si Ω est un ouvert borné, on peut utiliser le théorème 113 qui perment d'étendre toute fonction de $H^k(\Omega)$ dans $\mathbb{R}^d$ et on en déduit immédiatement un résultat similaire au théorème 118.

Théorème 122 (Injections de Sobolev dans Ω)**.** *Soit* $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ *un ouvert borné dont la frontière est Lipschitzienne.*
• *Si* $2k < d$, *on a l'injection continue*

$$H^k(\Omega) \hookrightarrow L^{\frac{2d}{d-2k}}(\Omega).$$

• *Si* $2k = d$, *on a*

$$H^k(\Omega) \hookrightarrow L^p(\Omega), \qquad \forall 2 \leq p < \infty.$$

• *Si* $2k > d$, *on a*

$$H^k(\Omega) \hookrightarrow C_b^{\ell,\theta}(\overline{\Omega})$$

où ℓ *est l'unique entier tel que* $0 \leq \ell < k - d/2 < \ell + 1$ *et* $\theta = k - \ell - d/2$.

Dans le cas d'un ouvert borné, l'injection est en fait compacte, ce qui est une information importante pour passer à la limite forte localement lorqu'on a une suite qui converge faiblement dans un espace de Sobolev.

Théorème 123 (Rellich)**.** *Pour tout ouvert borné* Ω, *l'injection*

$$H^k(\mathbb{R}^d) \hookrightarrow L^2(\Omega)$$

est compacte pour tout $k \geq 1$.

Par l'inégalité de Hölder, on déduit immédiatement que les injections

$$H^k(\mathbb{R}^d) \hookrightarrow L^p(\Omega)$$

sont compactes pour $2 \leq p < 2d/(d-2k)$ lorsque $2k < d$ et pour $2 \leq p < \infty$ dans les autres cas. De la même façon, on a des injections compactes

$$H^k(\Omega) \hookrightarrow L^p(\Omega)$$

lorsque Ω est borné.

Nous donnons maintenant la preuve du théorème 123.

Démonstration. Soit Ω un ouvert borné et (f_n) une suite de fonctions de $H^k(\mathbb{R}^d)$, qui converge faiblement vers $f \in H^k(\mathbb{R}^d)$, $f_n \rightharpoonup f$. On doit montrer que $\mathbb{1}_\Omega f_n \to \mathbb{1}_\Omega f$ fortement dans $L^2(\Omega)$. D'après la discussion suivant le théorème 118, on peut écrire $f_n = h_k * g_n$ où (g_n) est une suite bornée dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. On a en fait $g_n \rightharpoonup g$ faiblement dans $L^2(\mathbb{R}^d)$ où $\widehat{g}(\xi) = (1+|\xi|^2)^{k/2}\widehat{f}(\xi)$. Nous devons donc finalement montrer que si $g_n \rightharpoonup g$ faiblement dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, alors $\mathbb{1}_\Omega(h_k * g_n) \to \mathbb{1}_\Omega(h_k * g)$ fortement dans $L^2(\Omega)$.

La preuve est facile dans le cas où $h_k \in L^2(\mathbb{R}^d)$, ce qui correspond précisément à $k > d/2$. En effet, par la définition de la convergence faible dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, on a

$$h_k * g_n(x) = \int_{\mathbb{R}^d} h_k(x-y)g_n(y)\,dy \to \int_{\mathbb{R}^d} h_k(x-y)g(y)\,dy$$

pour tout x fixé. Or on a également $\|h_k * g_n\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \leq \|h_k\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}\|g_n\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}$ qui est uniformément borné. Donc la fonction $\mathbb{1}_\Omega(h_k * g_n)$ est uniformément bornée sur l'ensemble borné Ω. Par le théorème de convergence dominée, la convergence presque partout implique la convergence forte, comme nous voulions.

La preuve ne fonctionne pas telle quelle lorsque $k \leq d/2$. L'idée est alors de décomposer

$$\frac{(2\pi)^{d/2}}{(1+|\xi|^2)^{k/2}} = \frac{(2\pi)^{d/2}}{(1+|\xi|^2)^{k/2}}\chi(\xi/R) + \frac{(2\pi)^{d/2}}{(1+|\xi|^2)^{k/2}}(1-\chi(\xi/R)) := \widehat{a_R}(\xi) + \widehat{b_R}(\xi),$$

où χ est une fonction C^∞ à support compact valant 1 sur la boule $B(0,1)$. Nous avons alors $a_R \in L^2(\mathbb{R}^d)$ et

$$\left|\widehat{b_R}(\xi)\right| \leq \frac{(2\pi)^{d/2}}{(1+R^2)^{k/2}}.$$

On peut écrire

$$\|\mathbb{1}_\Omega\, h_k * (g_n - g)\|_{L^2(\Omega)} \leq \|\mathbb{1}_\Omega\, a_R * (g_n - g)\|_{L^2(\Omega)} + \|\mathbb{1}_\Omega\, b_R * (g_n - g)\|_{L^2(\Omega)}$$

et

$$\begin{aligned}\|\mathbb{1}_\Omega\, b_R * (g_n - g)\|_{L^2(\Omega)} &\leq \|b_R * (g_n - g)\|_{L^2(\Omega)} \\ &= (2\pi)^{-d/2}\|\widehat{b_R}\,(\widehat{g_n} - \widehat{g})\|_{L^2(\Omega)} \leq \frac{\|\widehat{g_n} - \widehat{g}\|_{L^2(\Omega)}}{(1+R^2)^{k/2}}.\end{aligned}$$

Puisque g_n est bornée dans L^2, pour tout $\varepsilon > 0$ donné on peut trouver R de sorte que

$$\|\mathbb{1}_\Omega\, b_R * (g_n - g)\|_{L^2(\Omega)} \leq \varepsilon/2.$$

Pour cette valeur de R, on a

$$\|\mathbb{1}_\Omega\, a_R * (g_n - g)\|_{L^2(\Omega)} \to 0$$

quand $n \to \infty$ d'après l'argument précédent, puisque $a_R \in L^2(\mathbb{R}^d)$. On a alors $\|\mathbb{1}_\Omega\, a_R * (g_n - g)\|_{L^2(\Omega)} \leq \varepsilon/2$ pour n assez grand, ce qui termine la preuve. □

Références

[1] R. A. Adams and J. J. F. Fournier, *Sobolev spaces*, vol. 140 of Pure and Applied Mathematics (Amsterdam), Elsevier/Academic Press, Amsterdam, second ed., 2003.

[2] H. Brezis, *Analyse fonctionnelle, Théorie et applications*, Dunod, sciences sup ed., 1994.

[3] É. Cancès, C. Le Bris, and Y. Maday, *Méthodes mathématiques en chimie quantique. Une introduction*, vol. 53 of Collection Mathématiques et Applications, Springer, 2006.

[4] J.-Y. Chemin and C.-J. Xu, *Inclusions de Sobolev en calcul de Weyl-Hörmander et champs de vecteurs sous-elliptiques*, Ann. Sci. École Norm. Sup. (4), 30 (1997), pp. 719–751.

[5] P. G. Ciarlet, *Basic error estimates for elliptic problems*, Handbook of numerical analysis, 2 (1991), pp. 17–351.

[6] P. G. Ciarlet, *The finite element method for elliptic problems*, vol. 40 of Classics in Applied Mathematics, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 2002. Reprint of the 1978 original [North-Holland, Amsterdam ; MR0520174 (58 #25001)].

[7] M. Dauge, *Elliptic boundary value problems on corner domains*, vol. 1341 of Lecture Notes in Mathematics, Springer-Verlag, Berlin, 1988. Smoothness and asymptotics of solutions.

[8] M. Dauge and J.-L. Steux, *Problème de Dirichlet pour le laplacien dans un polygone curviligne*, J. Differential Equations, 70 (1987), pp. 93–113.

[9] E. Davies, *Spectral theory and differential operators*, vol. 42 of Cambridge Studies in Advanced Mathematics, Cambridge University Press, Cambridge, 1995.

[10] L. C. Evans, *Partial differential equations*, vol. 19 of Graduate Studies in Mathematics, American Mathematical Society, Providence, RI, second ed., 2010.

[11] P. Grisvard, *Elliptic problems in nonsmooth domains*, vol. 24 of Monographs and Studies in Mathematics, Pitman (Advanced Publishing Program), Boston, MA, 1985.

[12] B. Helffer and K. Pankrashkin, *Tunneling between corners for Robin Laplacians*, J. London Math. Soc., 91 (2015), pp. 225–248.

[13] T. Kato, *Perturbation theory for linear operators*, Springer, second ed., 1995.

[14] V. A. Kozlov, V. G. Maz′ya, and J. Rossmann, *Elliptic boundary value problems in domains with point singularities*, vol. 52 of Mathematical Surveys and Monographs, American Mathematical Society, Providence, RI, 1997.

[15] A. Lacey, J. Sabina, and J. Ockendon, *Multidimensional reaction diffusion equations with nonlinear boundary conditions*, SIAM Journal on Applied Mathematics, 58 (1998), pp. 1622–1647.

[16] M. Levitin and L. Parnovski, *On the principal eigenvalue of a Robin problem with a large parameter*, Mathematische Nachrichten, 281 (2008), pp. 272–281.

[17] E. H. Lieb and M. Loss, *Analysis*, vol. 14 of Graduate Studies in Mathematics, American Mathematical Society, Providence, RI, 2nd ed., 2001.

[18] J.-L. Lions and E. Magenes, *Problèmes aux limites non homogènes et applications. Vol. 1*, Travaux et Recherches Mathématiques, No. 17, Dunod, Paris, 1968.

[19] P.-A. Raviart and J.-M. Thomas, *Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles*, Collection Mathématiques Appliquées pour la Maîtrise. [Collection of Applied Mathematics for the Master's Degree], Masson, Paris, 1983.

[20] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics. IV. Analysis of operators*, Academic Press, New York, 1978.

[21] H.-J. Stöckmann, *Chladni meets napoleon*, The European Physical Journal-Special Topics, 145 (2007), pp. 15–23.

[22] P. Stollmann, *Caught by disorder*, vol. 20 of Progress in Mathematical Physics, Birkhäuser Boston, Inc., Boston, MA, 2001. Bound states in random media.