



HAL
open science

Quelques contributions à l'analyse mathématique de l'équation de Gross-Pitaevskii et du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock

Philippe Gravejat

► **To cite this version:**

Philippe Gravejat. Quelques contributions à l'analyse mathématique de l'équation de Gross-Pitaevskii et du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock. Equations aux dérivées partielles [math.AP]. Université Paris Dauphine - Paris IX, 2011. tel-00706916

HAL Id: tel-00706916

<https://theses.hal.science/tel-00706916v1>

Submitted on 11 Jun 2012

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Université Paris Dauphine

**Quelques contributions à l'analyse mathématique
de l'équation de Gross-Pitaevskii
et du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock**

Thèse d'habilitation à diriger des recherches

présentée par

Philippe Gravejat

Soutenue le 8 décembre 2011 devant le jury composé de

Fabrice Béthuel	Professeur	Université Pierre et Marie Curie
Thierry Cazenave	Directeur de recherches	Université Pierre et Marie Curie
Maria Esteban	Directrice de recherches	Université Paris Dauphine
Patrick Gérard	Professeur	Université Paris Sud Orsay
Frank Merle	Professeur	Université de Cergy-Pontoise
Éric Séré	Professeur	Université Paris Dauphine
Jakob Yngvason	Professeur	Universität Wien

Rapporteurs

Thierry Cazenave	Directeur de recherches	Université Pierre et Marie Curie
Walter Craig	Professeur	McMaster University
Jakob Yngvason	Professeur	Universität Wien

Remerciements

Je remercie très chaleureusement Éric Séré d'avoir accepté de coordonner cette thèse d'habilitation. Je lui suis également profondément reconnaissant de m'avoir présenté, dès mon arrivée à l'Université Paris Dauphine, les sujets de recherche qui le passionnent, et d'avoir facilité, tant par sa gentillesse que par sa disponibilité, la découverte de modèles, alors nouveaux pour moi, dont l'analyse forme une grande part de ce mémoire. Je tiens à associer à ce chaleureux remerciement Mathieu Lewin avec lequel nous avons partagé tant de conversations mathématiques tout aussi enthousiastes que fertiles.

Je suis profondément redevable à Fabrice Béthuel, qui avec beaucoup de bienveillance, a guidé mes premiers pas dans la recherche mathématique, puis m'a accompagné dans l'exploration des sujets aux si multiples aspects auxquels il m'avait introduit. Je tiens à lui exprimer toute ma gratitude pour les nombreux conseils tant sur le plan mathématique que sur le plan humain qu'il a pu me prodiguer. Gratitude à laquelle je souhaite associer Jean-Claude Saut et Didier Smets avec lesquels nous avons partagé tant de discussions conviviales, mais néanmoins fécondes, que ce soit dans les confortables locaux de nos différentes universités, ou autour des tables alléchantes d'un Heuriger viennois.

Je suis particulièrement honoré que Thierry Cazenave, Walter Craig et Jakob Yngvason aient accepté la lourde tâche de rapporter ce mémoire, et je remercie très chaleureusement Maria Esteban, Patrick Gérard et Frank Merle de m'avoir fait l'honneur et le plaisir de participer à mon jury.

Un grand merci à mes collègues, mathématiciens comme non mathématiciens, de l'Université Paris Dauphine, de l'École Normale Supérieure et de l'École Polytechnique qui ont permis que ce travail se déroule tant dans d'excellentes conditions scientifiques, que dans la meilleure des ambiances. Un petit mot en particulier pour Patrick Bernard, Daniel Han-Kwan et Gaétan Chenevier qui ont su s'accommoder de ma présence, au moins quotidienne, au cours de ces dernières années. Toute ma reconnaissance aussi, à Josiane Fouquet qui a su m'initier aux arcanes de la responsabilité pédagogique de la licence Mi2e, et qui m'a épaulé avec la plus grande des efficacités lorsque j'en avais la charge.

Je tiens également à remercier David Chiron, Laurent di Menza, Mihai Maris, Frédéric Rousset et, une nouvelle fois, Didier Smets, qui ont accepté d'être membre du projet ANR ArDyPitEq, et qui m'ont depuis secondé avec diligence dans sa conduite. Conduite qui n'aurait pas été possible sans l'aide de Stéphanie Birouste et Valérie Fleurette, et le concours, toujours dans la bonne humeur, de César Faivre.

Je souhaite enfin exprimer ma complète reconnaissance envers mes amis et ma famille qui par leur affectueuse sollicitude ont contribué à l'achèvement de ce mémoire. Je ne doute pas qu'ils sauront prendre quelque plaisir à sa minutieuse lecture, et tirer les plus riches enseignements de sa soutenance.

Table des matières

Résumé	3
Abstract	3
Liste des travaux présentés	5
Introduction	7
I L'équation de Gross-Pitaevskii	21
I.1 Introduction	21
I.1.1 Le problème de Cauchy et la dynamique dispersive en temps long	21
I.1.2 Les ondes progressives	24
I.1.3 Quelques régimes asymptotiques pour l'équation de Gross-Pitaevskii	30
I.2 Les ondes progressives minimisantes	40
I.2.1 Le problème de minimisation de l'énergie de Ginzburg-Landau à moment scalaire fixé	41
I.2.2 La limite transsonique en dimension deux	52
I.2.3 La stabilité orbitale en dimension un	58
I.3 Le régime ondes longues vers l'équation de Korteweg-de Vries	64
II Le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock	73
II.1 Introduction	73
II.1.1 La dérivation du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock	73
II.1.2 L'analyse mathématique du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock	79
II.2 La construction des états fondamentaux du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit	85
II.3 La renormalisation de la charge pour le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit	93
Bibliographie	98

Résumé

Ce mémoire présente plusieurs contributions quant à l'analyse mathématique de l'équation de Gross-Pitaevskii et du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock.

Au sujet de l'équation de Gross-Pitaevskii, l'analyse commence par la construction variationnelle des ondes progressives minimisantes. La preuve de la stabilité orbitale du soliton noir en dimension un, et la description de la limite transsonique des ondes progressives minimisantes vers les états fondamentaux de l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1) en dimension deux, viennent compléter cette construction. L'analyse s'achève par la dérivation rigoureuse du régime ondes longues vers l'équation de Korteweg-de Vries en dimension un.

Quant au modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock, il s'agit de construire les états fondamentaux du modèle réduit, puis de préciser le processus de renormalisation de leur charge, lequel autorise le calcul d'un développement asymptotique de la densité de charges du vide polarisé, qui est cohérent avec les développements perturbatifs de l'électrodynamique quantique.

Abstract

This dissertation is devoted to the mathematical analysis of the Gross-Pitaevskii equation on one hand, and of the Bogoliubov-Dirac-Fock model on the other hand.

Concerning the Gross-Pitaevskii equation, the analysis begins by the variational construction of the minimizing travelling waves. This construction is completed by the proof of the orbital stability of the black soliton in dimension one, as well as the description of the transonic limit of the minimizing travelling waves towards the solitary waves for the Kadomtsev-Petviashvili equation (KP1) in dimension two. The rigorous derivation of the long wave regime towards the Korteweg-de Vries equation in dimension one concludes the analysis.

The description of the Bogoliubov-Dirac-Fock model focuses on the construction of the ground states for the reduced model. Their charge renormalization next provides an asymptotic expansion of the charge density of the polarized vacuum, which agrees with the perturbative expansions given by the quantum electrodynamics.

Liste des travaux présentés *

Articles

- [1] F. Béthuel, P. Gravejat et J.-C. Saut. On the KP I transonic limit of two-dimensional Gross-Pitaevskii travelling waves. *Dynamics of PDE*, 5 (3) : 241-280, 2008.
- [2] F. Béthuel, P. Gravejat, J.-C. Saut et D. Smets. Orbital stability of the black soliton to the Gross-Pitaevskii equation. *Indiana Math. Univ. J.*, 57 (6) : 2611-2642, 2008.
- [3] F. Béthuel, P. Gravejat et J.-C. Saut. Travelling waves for the Gross-Pitaevskii equation II. *Comm. Math. Phys.*, 285 (2) : 567-651, 2009.
- [4] P. Gravejat, M. Lewin et É. Séré. Ground state and charge renormalization in a nonlinear model of relativistic atoms. *Comm. Math. Phys.*, 286 (1) : 179-215, 2009.
- [5] F. Béthuel, P. Gravejat, J.-C. Saut et D. Smets. On the Korteweg-de Vries long-wave approximation of the Gross-Pitaevskii equation I. *Int. Math. Res. Not.*, 2009 : 2700-2748, 2009.
- [6] F. Béthuel, P. Gravejat J.-C. Saut et D. Smets. On the Korteweg-de Vries long-wave approximation of the Gross-Pitaevskii equation II. *Comm. Partial Differential Equations*, 35 (1) : 113-164, 2010.
- [7] P. Gravejat, M. Lewin et É. Séré. Renormalization and asymptotic expansion of Dirac's polarized vacuum. *Comm. Math. Phys.*, 2011, in press.

Actes et revues

- [1] F. Béthuel, P. Gravejat et J.-C. Saut. Existence and properties of travelling waves for the Gross-Pitaevskii equation. In A. Farina and J.-C. Saut, editors, *Stationary and time dependent Gross-Pitaevskii equations*, volume 473 of *Contemp. Math.*, pages 55-104. Amer. Math. Soc., Providence, R.I., 2008.
- [2] F. Béthuel, P. Gravejat et J.-C. Saut. Ondes progressives pour l'équation de Gross-Pitaevskii. *Sémin. Équ. Dériv. Partielles 2007-2008*, Exp. N° XV : 30 pp., 2009.
- [3] F. Béthuel, R. Danchin, P. Gravejat, J.-C. Saut et D. Smets. Les équations d'Euler, des ondes et de Korteweg-de Vries comme limites asymptotiques de l'équation de Gross-Pitaevskii. *Sémin. Équ. Dériv. Partielles 2008-2009*, Exp. N° I : 12 pp., 2010.

*. Les articles issus de ma thèse de doctorat ne sont pas présentés dans ce mémoire.

Introduction

Ce mémoire présente différents aspects mathématiques de l'équation de Gross-Pitaevskii et du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock. Quoique fort différents dans leur nature, ainsi que dans les phénomènes physiques qu'ils décrivent, ces deux modèles partagent des points communs sur le plan mathématique. En particulier, les outils qui permettent de les aborder sont similaires comme nous pourrions le constater par la suite. Ce sont sur ces similarités que repose l'unité des résultats présentés dans ce mémoire.

La première partie de ce mémoire a trait à l'analyse de l'équation de Gross-Pitaevskii

$$i\partial_t\Psi + \Delta\Psi + \Psi(1 - |\Psi|^2) = 0. \quad (\text{GP})$$

La solution à valeurs complexes Ψ est définie sur l'espace $\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}$. L'équation de Gross-Pitaevskii est une équation de Schrödinger non linéaire défocalisante qui rend compte de phénomènes physiques variés. Originellement introduite pour modéliser la condensation de Bose-Einstein, ou la superfluidité [125, 72, 37], elle apparaît également en optique non linéaire où elle décrit les solitons sombres [95].

L'équation de Gross-Pitaevskii est hamiltonienne. Son hamiltonien est l'énergie de Ginzburg-Landau

$$E(\Psi) \equiv \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^N} |\nabla\Psi|^2 + \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^N} (1 - |\Psi|^2)^2 \equiv \int_{\mathbb{R}^N} e(\Psi). \quad (1)$$

L'analyse qui suit se limite aux solutions Ψ d'énergie finie. Cette restriction revient à considérer des solutions qui satisfont la condition

$$|\Psi(x)| \rightarrow 1, \text{ lorsque } |x| \rightarrow +\infty.$$

En raison de cette condition, l'étude de l'équation de Gross-Pitaevskii diffère de manière notable de l'analyse des solutions d'équations de Schrödinger non linéaires de limite nulle à l'infini. La dynamique de l'équation de Gross-Pitaevskii n'en demeure pas moins riche avec aussi bien la manifestation de phénomènes dispersifs que la présence d'objets non linéaires comme les ondes progressives.

Même si d'autres aspects de cette dynamique sont introduits dans ce mémoire, les deux thématiques principales que nous aborderons sont :

- la construction variationnelle et la description qualitative des ondes progressives pour l'équation de Gross-Pitaevskii, à savoir des solutions particulières de la forme

$$\Psi(x, t) \equiv u_c(x_1 - ct, \dots, x_N),$$

où la vitesse c est un nombre réel fixé.

- la description du régime ondes longues vers l'équation de Korteweg-de Vries en dimension un, équation qui s'écrit

$$\partial_t v + \partial_{xxx} v + v\partial_x v = 0, \quad (\text{KdV})$$

pour une fonction à valeurs réelles v définie sur l'espace $\mathbb{R} \times \mathbb{R}$.

Au sujet des ondes progressives, il s'agira de les construire comme solutions de l'équation d'Euler-Lagrange d'un problème de minimisation sous contrainte. Le profil u_c d'une onde progressive de vitesse c est en effet solution de l'équation

$$ic\partial_1 u_c - \Delta u_c - u_c(1 - |u_c|^2) = 0. \quad (\text{OPc})$$

Le terme $-\Delta u_c - u_c(1 - |u_c|^2)$ correspond à la différentielle de l'énergie de Ginzburg-Landau en la fonction u_c . Le terme $i\partial_1 u_c$ renvoie, quant à lui, à la différentielle du moment scalaire

$$p(\Psi) \equiv \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^N} \langle i\partial_1 \Psi, \Psi \rangle_{\mathbb{C}}, \quad (2)$$

première composante du moment vectoriel

$$\vec{P}(\Psi) \equiv \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^N} \langle i\nabla \Psi, \Psi \rangle_{\mathbb{C}},$$

quantité elle-aussi, au moins formellement, conservée le long du flot de l'équation de Gross-Pitaevskii. Ainsi l'équation (OPc) s'interprète comme l'équation d'Euler-Lagrange associée au problème de minimisation de l'énergie de Ginzburg-Landau à moment scalaire fixé. La vitesse c apparaît alors comme le multiplicateur de Lagrange de ce problème.

L'étude variationnelle de ce type de problèmes est classique. La principale difficulté réside ici dans le fait que le moment scalaire est mal défini dans l'espace d'énergie. Même le moment scalaire $p(u_c)$ d'une onde progressive u_c non constante d'énergie finie ne peut être défini par la formule (2). La description asymptotique de l'onde progressive u_c [61, 63, 64, 65, 66] assure que la quantité $\langle i\partial_1 u_c, u_c \rangle_{\mathbb{C}}$ n'est pas intégrable.

Pour contourner cette difficulté, il est possible de se restreindre à des domaines bornés sur lesquels la définition du moment scalaire n'est plus un problème. La construction de minimiseurs de l'énergie de Ginzburg-Landau à moment scalaire fixé découle alors d'arguments variationnels classiques. Il suffit ensuite de passer à la limite lorsque la taille des domaines considérées tend vers $+\infty$ pour résoudre le problème initial. C'est cette approche que nous avons mise en pratique dans [14] afin de construire les ondes progressives u_c qui minimisent l'énergie de Ginzburg-Landau à moment scalaire fixé. Cette construction fera l'objet d'une description plus approfondie au Paragraphe I.2.1.

D'autres approches, variationnelles [19, 18, 32, 115], ou non [104], sont possibles et se sont révélées tout aussi fructueuses. Rien ne garantit cependant que les ondes progressives ainsi construites partagent les propriétés qualitatives des ondes progressives minimisantes, définies comme les minimiseurs de l'énergie de Ginzburg-Landau à moment scalaire fixé.

La première de ces propriétés est leur stabilité orbitale le long du flot de l'équation de Gross-Pitaevskii, que nous avons établie en dimension un dans le cas du soliton noir [15]. Rappelons qu'en dimension un, l'équation (OPc) s'intègre explicitement, et que ses solutions non constantes sont données par la formule

$$u_c(x) \equiv \sqrt{1 - \frac{c^2}{2}} \operatorname{th}\left(\frac{\sqrt{2 - c^2}}{2} x\right) + i \frac{c}{\sqrt{2}}, \quad (3)$$

aux invariances près de l'équation, à savoir les translations et la multiplication par les constantes de module un. Dans cette formule, la vitesse c ne prend que les valeurs comprises dans l'intervalle $(-\sqrt{2}, \sqrt{2})$. La vitesse critique $c_s \equiv \sqrt{2}$ est la vitesse des ondes sonores pour l'équation de Gross-Pitaevskii. Nous reviendrons sur le calcul de cette valeur. Notons simplement qu'il n'existe pas en dimension un d'ondes progressives non constantes de vitesse supersonique. Le soliton noir, donné par la formule

$$u_0(x) \equiv \operatorname{th}\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right),$$

s'annule pour $x = 0$, tandis que les autres solutions, appelés solitons sombres, ne s'annulent pas. En optique non linéaire, la valeur du module $|u_c|$ fournit l'intensité lumineuse du milieu considéré, de sorte qu'une valeur nulle correspond à un milieu noir.

En dimension un, comme en dimension supérieure, les ondes progressives sont supposées jouer un rôle majeur dans la dynamique en temps long de l'équation de Gross-Pitaevskii. En particulier, les ondes progressives minimisantes sont supposées être stables le long du flot de l'équation. Cette notion de stabilité doit être prise avec précaution. En général, une petite perturbation d'une onde progressive ne reste pas proche de cette onde progressive en temps long. À titre d'exemple, deux ondes progressives u_{c_1} et u_{c_2} , données par la formule (3), pour deux vitesses c_1 et c_2 proches, sont très proches à l'instant initial. Mais, l'une est translatée à la vitesse c_1 , et l'autre, à la vitesse c_2 , de sorte qu'à l'instant t , l'une se concentre autour du point $c_1 t$, et l'autre, autour du point $c_2 t$. Aussi, pour des temps t assez longs, l'une n'est plus une perturbation de l'autre. La notion habituelle de stabilité n'est donc pas adaptée à une famille d'ondes progressives de la forme (3).

L'introduction de la notion de stabilité orbitale lève l'obstruction illustrée par l'exemple précédent. Pour un petit paramètre ε fixé, il s'agit de déterminer s'il est possible ou non de trouver un autre petit paramètre δ tel que si Ψ désigne une solution de donnée initiale Ψ_0 proche à δ près d'une onde progressive u_c pour une certaine distance d , alors

$$\sup_{t \in \mathbb{R}} \inf_{(a, \theta) \in \mathbb{R}^2} d(\Psi(\cdot, t), e^{i\theta} u_c(\cdot - a)) < \varepsilon. \quad (4)$$

En d'autres termes, les solutions associées à des données initiales proches d'une onde progressive u_c sont contraintes de rester proches, non pas de cette onde progressive, mais de la famille des ondes progressives de même vitesse c .

Le soliton noir u_0 , comme les autres solitons u_c , est orbitalement stable le long du flot de l'équation de Gross-Pitaevskii. Ces solitons sont des minimiseurs de l'énergie de Ginzburg-Landau à moment scalaire fixé. Comme les suites minimisantes de ces problèmes de minimisation sont compactes (aux invariances près), un argument classique [8, 28] permet de conclure quant à la stabilité orbitale des solitons. Une nouvelle fois, la preuve est rendue délicate par la nécessité de définir proprement le moment scalaire. Ce n'est que modulo π que nous avons pu définir cette quantité dans le cas du soliton noir, ce qui suffit néanmoins à établir la stabilité orbitale de ce soliton dans l'espace d'énergie [15]. Nous décrirons plus en détails cette démarche au Paragraphe I.2.3.

Le caractère minimisant des ondes progressives facilite aussi l'analyse de leur convergence à la limite transsonique vers les ondes solitaires pour l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1)

$$\partial_1 (\partial_t v + \partial_1^3 v + v \partial_1 v) - \Delta_{\perp} v = 0. \quad (\text{KP1})$$

La solution à valeurs réelles v est ici définie sur l'espace $\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}$. L'opérateur $\Delta_{\perp} \equiv \partial_2^2 + \dots + \partial_N^2$ désigne la partie du laplacien transverse à la variable x_1 .

L'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1) généralise l'équation de Korteweg-de Vries aux dimensions supérieures ou égales à deux. Elle décrit des ondes longues, dispersives, faiblement transverses et essentiellement unidirectionnelles, aussi bien en mécanique des fluides [91], que pour les matériaux ferromagnétiques [123], ou antiferromagnétiques [49].² C'est une équation hamiltonienne dont le hamiltonien vaut

$$E^{KP}(v) \equiv \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^N} \left((\partial_1 v)^2 + |\partial_1^{-1} \nabla_{\perp} v|^2 \right) - \frac{1}{6} \int_{\mathbb{R}^N} v^3. \quad (5)$$

2. À proprement parler, c'est la version généralisée de l'équation de Kadomtsev-Petviashvili dans laquelle la non-linéarité $v \partial_1 v$ est remplacée par une non-linéarité plus générale de la forme $v^p \partial_1 v$, qui apparaît pour décrire ces matériaux.

L'opérateur $\nabla_{\perp} \equiv (\partial_2, \dots, \partial_N)$ désigne la partie du gradient transverse à la variable x_1 , tandis que l'opérateur ∂_1^{-1} se définit à travers son action sur la transformée de Fourier d'une fonction v , laquelle est donnée par $\widehat{\partial_1^{-1}v}(\xi) \equiv \widehat{v}(\xi)/i\xi_1$ (lorsque cela peut avoir un sens). L'équation de Kadomtsev-Petviashvili possède des solutions de type ondes solitaires, qui s'écrivent comme les ondes progressives sous la forme

$$v(x, t) \equiv w_c(x_1 - ct, x_2, \dots, x_N),$$

pour une vitesse strictement positive c . Le profil w_c est solution de l'équation

$$-c\partial_1^2 w + \partial_1^4 w + \partial_1(w\partial_1 w) - \Delta_{\perp} w = 0. \quad (6)$$

Le changement d'échelles $w_c(x) \equiv cw_1(\sqrt{c}x_1, cx_2, \dots, cx_N)$ transforme une onde solitaire w_1 de vitesse 1 en une onde solitaire w_c de vitesse c . Comme pour l'équation de Gross-Pitaevskii, la construction de ces ondes solitaires peut reposer sur l'argument variationnel qui consiste à minimiser l'énergie E^{KP} sous la contrainte d'une norme L^2 fixée. C'est, en particulier, par cet argument qu'A. de Bouard et J.-C. Saut [39, 40] ont prouvé l'existence d'ondes solitaires de vitesse 1, donc de vitesse quelconque, en dimension deux.

Ce nouveau problème de minimisation est relié au problème de minimisation de l'énergie de Ginzburg-Landau à moment scalaire fixé, dans la limite transsonique, soit dans la limite où la vitesse c des ondes progressives u_c converge vers la vitesse des ondes sonores $c_s = \sqrt{2}$. Les ondes progressives u_c , lorsqu'elles sont minimisantes, forment, à la limite $c \rightarrow \sqrt{2}$, une suite minimisante pour le problème de minimisation associé à l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1). Cette simple remarque implique leur convergence vers une onde solitaire minimisante pour l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1). Nous dévoilerons au Paragraphe I.2.2 les dessous de cette implication que nous avons exploitée dans [13] pour décrire la limite transsonique des ondes progressives minimisantes en dimension deux.

Cette convergence n'est qu'un aspect de l'analyse plus générale des régimes ondes longues de l'équation de Gross-Pitaevskii, laquelle consiste à comprendre ce qu'il advient de petites perturbations de la solution constante égale à 1 lorsque sont négligées les composantes de type ondes courtes de leurs transformées de Fourier. Cette analyse passe par l'introduction de la forme hydrodynamique de l'équation de Gross-Pitaevskii. Lorsqu'une de ses solutions Ψ ne s'annule pas, elle se relève sous la forme $\Psi \equiv \sqrt{\rho} \exp i\varphi$. Cette transformation, introduite par E. Madelung [113], conduit au système d'équations aux dérivées partielles

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho v) = 0, \\ \rho(\partial_t v + v \cdot \nabla v) + \nabla \rho^2 = \rho \nabla \left(\frac{\Delta \rho}{\rho} - \frac{|\nabla \rho|^2}{2\rho^2} \right), \end{cases} \quad (7)$$

avec la notation $v \equiv 2\nabla\varphi$. Ce système est similaire à celui d'Euler compressible pour un fluide irrotationnel de pression $P(\rho) \equiv \rho^2$. La différence se situe au second membre de la seconde équation du système (7), lequel présente un terme non linéaire qu'il est courant de désigner sous l'appellation de pression quantique.

Considérer de petites perturbations de la solution constante 1 revient à introduire de nouvelles variables ρ_{δ} et v_{δ} définies par les expressions $\rho = 1 + \delta\rho_{\delta}$ et $v = \delta v_{\delta}$, où δ désigne un petit paramètre. Les fonctions ρ_{δ} et v_{δ} satisfont les équations

$$\begin{cases} \partial_t \rho_{\delta} + \operatorname{div}(v_{\delta}) = \mathcal{O}(\delta), \\ \partial_t v_{\delta} + 2\nabla \rho_{\delta} = \Delta \nabla \rho_{\delta} + \mathcal{O}(\delta), \end{cases} \quad (8)$$

dans lesquelles sont négligés tous les termes d'ordre au moins δ . La transformée de Fourier dans les variables d'espace de ces équations s'écrit

$$\begin{cases} \partial_t \widehat{\rho}_{\delta}(\xi) + i\langle \xi, \widehat{v}_{\delta}(\xi) \rangle_{\mathbb{R}^N} = \mathcal{O}(\delta), \\ \partial_t \widehat{v}_{\delta}(\xi) + 2i\xi \widehat{\rho}_{\delta}(\xi) = -i|\xi|^2 \xi \widehat{\rho}_{\delta}(\xi) + \mathcal{O}(\delta). \end{cases}$$

Dans le régime ondes longues où le nombre d'ondes ξ est petit, le terme $-i|\xi|^2\xi\widehat{\rho}_\delta(\xi)$ est négligeable devant le terme $2i\xi\widehat{\rho}_\delta(\xi)$. Aussi les fonctions ρ_δ et v_δ satisfont-elles de manière approchée l'équation des ondes libres

$$\begin{cases} \partial_t n + \operatorname{div}(w) = 0, \\ \partial_t w + 2\nabla n = 0. \end{cases} \quad (9)$$

La vitesse de cette équation des ondes libres est égale à $\sqrt{2}$, ce qui est cohérent avec l'affirmation que $\sqrt{2}$ est la vitesse des ondes sonores pour l'équation de Gross-Pitaevskii, autour de la solution constante 1, pour être précis. Les ondes sonores sont en effet les petites perturbations de type ondes planes autour de la solution constante égale à 1. Elles sont solutions de l'équation (9) dans le régime ondes longues considéré ici.

L'analyse mathématique du régime ondes longues décrit par l'équation (9) consiste à justifier de manière rigoureuse, qu'à la limite $\delta \rightarrow 0$, les fonctions ρ_δ et v_δ sont solutions de l'équation (9). Négliger les composantes ondes courtes des transformées de Fourier des fonctions ρ_δ et v_δ n'est pas si simple sur le plan quantitatif. Une façon alternative de procéder consiste à introduire les nouvelles variables

$$\rho_\delta(x, t) = n_\varepsilon(\varepsilon x, \varepsilon t), \text{ et } v_\delta(x, t) = w_\varepsilon(\varepsilon x, \varepsilon t),$$

où ε désigne un nouveau petit paramètre qui rend compte de l'approximation ondes longues. Suite à ces changements d'échelles, le système (8) s'écrit

$$\begin{cases} \partial_t n_\varepsilon + \operatorname{div}(w_\varepsilon) = \mathcal{O}(\delta), \\ \partial_t w_\varepsilon + 2\nabla n_\varepsilon = \varepsilon^2 \Delta \nabla n_\varepsilon + \mathcal{O}(\delta). \end{cases}$$

Si les paramètres δ et ε sont ajustés de façon à ce que $\delta = \sqrt{\varepsilon}$, alors les solutions n_ε et w_ε satisfont l'équation des ondes libres (9) à une erreur de l'ordre de $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ près.

L'apparition de l'équation des ondes libres comme équation limite de ce premier régime ondes longues est à l'origine de l'introduction d'une seconde approximation ondes longues, dont l'équation limite sera l'équation de Korteweg-de Vries en dimension un. Par la formule de d'Alembert, les solutions de l'équation (9) se comportent en effet comme deux fronts d'ondes en dimension un. L'un se propage vers la droite à une vitesse constante égale à $\sqrt{2}$, l'autre, vers la gauche à la même vitesse $\sqrt{2}$. Cette description est somme toute sommaire. Elle ne fournit aucun détail sur l'évolution des deux fronts d'ondes, qui rappelons-le, sont, à ε non nul, non pas solutions de l'équation des ondes libres, mais de l'équation de Gross-Pitaevskii. Afin de préciser cette évolution, il est naturel de se placer dans le repère fixe pour le front d'ondes considéré, qui se déplace soit vers la gauche, soit vers la droite, à vitesse constante égale à $\sqrt{2}$. Comme dans le cas de l'équation des ondes libres, la manière la plus simple de procéder est d'introduire les nouvelles variables

$$\rho(x, t) \equiv 1 - \frac{\varepsilon^2}{6} N_\varepsilon \left(\varepsilon(x + \sqrt{2}t), \frac{\varepsilon^3}{2\sqrt{2}} t \right), \text{ et } v(x, t) \equiv \frac{\varepsilon^2}{6\sqrt{2}} W_\varepsilon \left(\varepsilon(x + \sqrt{2}t), \frac{\varepsilon^3}{2\sqrt{2}} t \right), \quad (10)$$

dans le repère qui se déplace vers la gauche. Les fonctions N_ε et W_ε satisfont alors

$$\partial_x N_\varepsilon - \partial_x W_\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2} \left(\frac{1}{2} \partial_t N_\varepsilon + \frac{1}{3} N_\varepsilon \partial_x W_\varepsilon + \frac{1}{3} \partial_x N_\varepsilon W_\varepsilon \right) = 0, \quad (11)$$

et

$$\partial_x W_\varepsilon - \partial_x N_\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2} \left(\frac{1}{2} \partial_t W_\varepsilon + \partial_x \left(\frac{\partial_x^2 N_\varepsilon}{1 - \frac{\varepsilon^2}{6} N_\varepsilon} + \frac{1}{6} (W_\varepsilon)^2 \right) \right) + \frac{\varepsilon^4}{24} \partial_x \left(\frac{(\partial_x N_\varepsilon)^2}{(1 - \frac{\varepsilon^2}{6} N_\varepsilon)^2} \right) = 0. \quad (12)$$

La formule de d'Alembert montre que ce ne sont ni la fonction N_ε , ni la fonction W_ε , mais les quantités $U_\varepsilon \equiv (N_\varepsilon + W_\varepsilon)/2$ et $V_\varepsilon \equiv (N_\varepsilon - W_\varepsilon)/2$, qui se déplacent vers la gauche, respectivement, la droite, à vitesse $\sqrt{2}$. Dans ces deux variables, le système (11)-(12) se traduit par les équations

$$\partial_t U_\varepsilon + \partial_x^3 U_\varepsilon + U_\varepsilon \partial_x U_\varepsilon = \partial_x F_\varepsilon - \varepsilon^2 \partial_x R_\varepsilon, \quad (13)$$

et

$$\partial_t V_\varepsilon + \frac{8}{\varepsilon^2} \partial_x V_\varepsilon = \partial_x G_\varepsilon + \varepsilon^2 \partial_x R_\varepsilon, \quad (14)$$

où les quantités F_ε , G_ε et R_ε sont données par

$$F_\varepsilon \equiv \frac{1}{6} V_\varepsilon^2 - \partial_x^2 V_\varepsilon + \frac{1}{3} U_\varepsilon V_\varepsilon, \quad (15)$$

$$G_\varepsilon \equiv \partial_x^2 U_\varepsilon + \partial_x^2 V_\varepsilon + \frac{1}{2} V_\varepsilon^2 - \frac{1}{6} U_\varepsilon^2 - \frac{1}{3} U_\varepsilon V_\varepsilon,$$

et

$$R_\varepsilon = \frac{(U_\varepsilon + V_\varepsilon)(\partial_x^2 U_\varepsilon + \partial_x^2 V_\varepsilon)}{6(1 - \frac{\varepsilon^2}{6}(U_\varepsilon + V_\varepsilon))} + \frac{(\partial_x U_\varepsilon + \partial_x V_\varepsilon)^2}{12(1 - \frac{\varepsilon^2}{6}(U_\varepsilon + V_\varepsilon))^2}. \quad (16)$$

Le premier membre de l'équation (13) est exactement le premier membre de l'équation de Korteweg-de Vries. Lorsque les termes $\partial_x F_\varepsilon$ et $\varepsilon^2 \partial_x R_\varepsilon$ du second membre sont négligeables, la fonction U_ε satisfait de manière approchée l'équation de Korteweg-de Vries.

L'analyse quantitative de cette approximation passe par l'introduction d'un couple quelconque de données initiales U_ε^0 et V_ε^0 , bornées indépendamment de ε dans un espace fonctionnel X à préciser, puis la preuve que les solutions U_ε et V_ε du système (13)-(14) de données initiales U_ε^0 et V_ε^0 , et la solution \mathcal{U} de l'équation de Korteweg-de Vries de donnée initiale U_ε^0 , satisfont une estimation de la forme

$$\|U_\varepsilon(\cdot, t) - \mathcal{U}(\cdot, t)\|_X = \mathcal{O}(\varepsilon^\alpha), \quad (17)$$

sur un intervalle de temps $[0, T_\varepsilon]$ le plus grand possible. De manière typique, le temps maximal T_ε est de l'ordre de $\mathcal{O}(\varepsilon^{-\beta})$, où β est une constante strictement positive. Le nombre strictement positif α indique la précision de l'approximation qui est d'autant plus grande que α est grand.

La preuve d'une estimation du type (17) requiert que les termes au second membre de l'équation (13) soient négligeables à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$. Il n'y a, semble-t-il, aucune raison que le terme $\partial_x F_\varepsilon$ ne le soit. Ce terme disparaît néanmoins de l'équation (13) lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$. L'explication est à chercher du côté de l'équation (14). Le premier membre de cette équation correspond à un opérateur de transport de vitesse $8/\varepsilon^2$, si bien que la fonction V_ε est transportée à une vitesse infinie lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$. À la vue de la formule (15), il en va de même pour la fonction $\partial_x F_\varepsilon$. Aussi cette fonction disparaît-elle de l'équation (13), non pas parce que sa taille devient petite, mais parce qu'elle ne peut plus interagir avec la variable U_ε . Cette remarque est un ingrédient crucial dans l'analyse de la limite ondes longues vers l'équation de Korteweg-de Vries, que nous avons développée dans [16, 17], et sur laquelle nous reviendrons plus longuement au Paragraphe I.3.

La seconde partie de ce mémoire est consacrée à l'étude mathématique du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock. En mécanique quantique relativiste, ce modèle, introduit par P. Chaix et D. Iracane [30] (voir aussi [29, 81]), décrit la configuration électronique autour d'une densité de charges positives ν .

Comme l'équation de Gross-Pitaevskii, le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock est hamiltonien. Son hamiltonien est l'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock donnée par

$$\begin{aligned} E_\nu^{BDF}(Q) \equiv & \text{tr}(D^0 Q) - \alpha \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\nu(x) \rho_Q(y)}{|x-y|} dx dy + \frac{\alpha}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_Q(x) \rho_Q(y)}{|x-y|} dx dy \\ & - \frac{\alpha}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|Q(x, y)|^2}{|x-y|} dx dy. \end{aligned} \quad (18)$$

La signification de chacun des termes de cette expression n'est pas immédiate. La préciser requiert de rappeler comment sont décrits les électrons en mécanique quantique relativiste et non relativiste.

En mécanique quantique non relativiste, un électron est représenté par sa fonction d'ondes Ψ . La probabilité de trouver l'électron au point x est donnée par la mesure $|\Psi(x)|^2 dx$. En particulier, la fonction d'ondes Ψ est normée dans l'espace $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$. L'énergie cinétique de l'électron est

$$E_c(\Psi) \equiv \frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \Psi|^2,$$

où m désigne la masse de l'électron, et \hbar , la constante de Planck réduite. Soulignons que cette quantité est toujours positive.

Lorsqu'il s'agit de modéliser une structure électronique à N électrons autour d'une densité de charges positives ν , les électrons sont décrits par un état électronique $\Psi(x_1, \dots, x_N)$ défini sur $(\mathbb{R}^3)^N$. La probabilité de trouver l'électron i au point x_i est donnée par la mesure $|\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \dots dx_N$. La fonction Ψ reste normée dans $L^2((\mathbb{R}^3)^N, \mathbb{C})$, mais vérifie deux contraintes supplémentaires. En raison de l'indiscernabilité des électrons, la densité $|\Psi|^2$ dépend de manière symétrique des variables x_i . Comme les électrons sont des fermions qui vérifient le principe d'exclusion de Pauli, la fonction Ψ est antisymétrique par rapport aux permutations des variables x_i .

La structure électronique à N électrons autour de la densité de charges ν se calcule à partir du hamiltonien à N corps,³

$$H_\nu^N \equiv \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{x_i} + V_\nu(x_i) + \sum_{j>i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |x_i - x_j|} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\nu(x)\nu(y)}{|x - y|} dx dy, \quad (19)$$

lequel agit sur l'espace $L_a^2((\mathbb{R}^3)^N, \mathbb{C})$ des états électroniques (qui vérifient les deux contraintes de symétrie et d'antisymétrie mentionnées ci-dessus). Dans cette formule, e désigne la charge élémentaire d'un électron, tandis que ϵ_0 renvoie à la permittivité diélectrique du vide. Le premier terme de la formule (19) correspond à l'énergie cinétique des électrons. Le second est le potentiel de Coulomb V_ν , créé par la densité de charges ν , lequel vaut

$$V_\nu(x) \equiv -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\nu(y)}{|x - y|} dy.$$

Quant au troisième terme, il décrit les interactions électrostatiques coulombiennes entre les N électrons. Enfin, le dernier terme rend compte de l'énergie coulombienne propre de la densité de charges ν .⁴ L'énergie totale de l'état électronique Ψ est donnée par la quantité

$$E_\nu^N(\Psi) \equiv \langle \Psi, H_\nu^N(\Psi) \rangle_{L^2}.$$

Les structures électroniques sont les états propres du hamiltonien H_ν^N . L'état fondamental, ou stable, correspond à la valeur propre minimale. Il s'agit d'un minimiseur du problème

$$\mathcal{E}_\nu^N \equiv \inf \left\{ E_\nu^N(\Psi), \Psi \in L_a^2((\mathbb{R}^3)^N, \mathbb{C}) \text{ t.q. } \|\Psi\|_{L^2} = 1 \right\}.$$

3. Ici, comme dans la suite, sont omises toutes les interactions autres qu'électrostatiques. La densité de charges ν est traitée de manière classique. Elle renvoie aussi bien à un noyau ponctuel, auquel cas elle vaudra $\nu = Z\delta_R$, où Z désigne la charge du noyau et R , sa position, qu'à une molécule composée de plusieurs noyaux ponctuels, ou étalés. Nous renvoyons au Chapitre II pour des hypothèses précises sur la densité de charges ν .

4. Ce dernier terme est constant. Quitte à changer la référence prise pour le calcul de l'énergie des électrons, il peut être omis, ce qui sera le plus souvent le cas dans la suite.

Nous n'étudierons pas plus avant ce modèle à N corps que nous n'introduisons que pour mieux décrire le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock. Nous renvoyons à l'article de W. Hunziker et I.M. Sigal [84], ainsi qu'à l'ouvrage de M. Reed et B. Simon [127], pour de plus amples détails.

Mentionnons néanmoins que la manipulation du hamiltonien H_ν^N est délicate. Plusieurs approximations ont été avancées pour remédier à cette difficulté. L'approximation de Hartree-Fock [82, 51] restreint le hamiltonien H_ν^N aux états électroniques de type Hartree-Fock, lesquels s'écrivent comme des déterminants de Slater de taille N . Lorsque Ψ_1, \dots, Ψ_N sont des fonctions orthonormées de $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$, leur déterminant de Slater $\Psi_1 \wedge \dots \wedge \Psi_N$ est défini par la formule

$$\Psi_1 \wedge \dots \wedge \Psi_N(x_1, \dots, x_N) \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \det(\Psi_i(x_j)).$$

Les déterminants de Slater appartiennent à l'espace $L_a^2((\mathbb{R}^3)^N, \mathbb{C})$ des états électroniques à N électrons. Ce sont les états électroniques les moins corrélés. L'énergie d'un état Hartree-Fock $\Psi \equiv \Psi_1 \wedge \dots \wedge \Psi_N$ s'écrit

$$\begin{aligned} E_\nu^{HF}(\Psi) \equiv E_\nu^N(\Psi_1 \wedge \dots \wedge \Psi_N) &= \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \Psi_i|^2 \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\gamma_\Psi(x, y)|^2}{|x - y|} dx dy \\ &+ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{(\rho_\Psi(x) - \nu(x))(\rho_\Psi(y) - \nu(y))}{|x - y|} dx dy. \end{aligned}$$

Dans cette formule, γ_Ψ désigne l'opérateur de densité à un corps de l'état Hartree-Fock Ψ , lequel est défini par son noyau

$$\gamma_\Psi(x, y) \equiv \sum_{i=1}^N \Psi_i(x) \overline{\Psi_i(y)}.$$

En d'autres termes, γ_Ψ est le projecteur orthogonal sur le sous-espace de $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$ engendré par les fonctions Ψ_i . C'est sur cette manière alternative de représenter un état Hartree-Fock en tant que projecteur orthogonal que s'appuiera le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock. Quant à l'application ρ_Ψ , il s'agit de la densité de charges de l'état Hartree-Fock Ψ . Elle vaut

$$\rho_\Psi(x) \equiv \sum_{i=1}^N |\Psi_i(x)|^2 = \gamma_\Psi(x, x).$$

L'énergie de Hartree-Fock ne dépend en fait que de l'opérateur de densité à un corps γ_Ψ à travers l'expression alternative

$$\begin{aligned} E_\nu^{HF}(\Psi) &= \frac{\hbar^2}{2m} \text{tr}(-\Delta \gamma_\Psi) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{(\rho_\Psi(x) - \nu(x))(\rho_\Psi(y) - \nu(y))}{|x - y|} dx dy \\ &- \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\gamma_\Psi(x, y)|^2}{|x - y|} dx dy, \end{aligned} \tag{20}$$

où $\text{tr}(-\Delta \gamma_\Psi)$ désigne la trace de l'opérateur de rang fini $-\Delta \gamma_\Psi$. Le premier terme de cette formule est l'énergie cinétique de l'état Hartree-Fock, le second, son énergie électrostatique directe, et le dernier, son énergie électrostatique d'échange. Les modèles dits réduits correspondent au cas où le terme d'échange est omis. Remarquons la ressemblance entre les formules (18) et (20), en particulier, au niveau des termes d'interactions électrostatiques qui sont identiques, hormis la prise en compte de l'énergie électrostatique propre de la densité de charges ν , et l'adimensionnement préalable à l'écriture de la formule (18).

Comme pour le modèle à N corps, l'état Hartree-Fock fondamental décrit la configuration électronique de type Hartree-Fock la plus stable autour de la densité de charges ν . C'est un

minimiseur du problème

$$\mathcal{E}_\nu^{HF} \equiv \inf \left\{ E_\nu^{HF}(\Psi), \Psi = \Psi_1 \wedge \cdots \wedge \Psi_N, (\Psi_1, \dots, \Psi_N) \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})^N \text{ t.q. } \langle \Psi_i, \Psi_j \rangle_{L^2} = \delta_{i,j} \right\}.$$

Sous des hypothèses raisonnables sur la densité de charges ν , E.H. Lieb et B. Simon [103] ont montré l'existence d'un état fondamental Ψ^ν , qui est solution des équations

$$\forall i \in \{1, \dots, N\}, \mathcal{F}_{\Psi^\nu}(\Psi_i^\nu) + \sum_{j=1}^N \mu_{i,j} \Psi_j^\nu = 0. \quad (21)$$

Les nombres $\mu_{i,j}$ sont les multiplicateurs d'Euler-Lagrange de ce problème de minimisation. Quant à l'opérateur \mathcal{F}_{Ψ^ν} , c'est l'opérateur de Fock, ou de champ moyen, du système. Il est défini par

$$\mathcal{F}_{\Psi^\nu} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} (\rho_{\Psi^\nu} - \nu) * \frac{1}{|x|} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\gamma_{\Psi^\nu}(x, y)}{|x-y|}.$$

En particulier, les équations (21) sont auto-consistantes au sens où l'opérateur \mathcal{F}_{Ψ^ν} qui les définit, dépend de la solution Ψ^ν de ces équations. Nous ne nous étendrons pas plus sur l'approximation Hartree-Fock, que nous n'avons introduite que pour mettre en lumière sa similitude avec le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock, et faciliter l'introduction de ce modèle. Nous renvoyons aux articles d'E.H. Lieb et B. Simon [103], et P.-L. Lions [109], pour une description plus complète.

En mécanique quantique relativiste, un électron n'est plus représenté par une fonction d'ondes, mais, à la suite des travaux de P.A.M. Dirac [44, 45, 46], par un spineur Ψ , c'est-à-dire une application de $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$. La probabilité de trouver l'électron au point x est donnée par la mesure $|\Psi(x)|^2 dx$, de sorte que Ψ est normée dans $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$. L'énergie cinétique de l'électron est égale à

$$E_c(\Psi) \equiv \langle \Psi, D^0(\Psi) \rangle_{L^2},$$

où $D^0 \equiv -i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + mc^2 \boldsymbol{\beta}$ est l'opérateur de Dirac. Dans cette expression, la constante c désigne la vitesse de la lumière dans le vide, tandis que les matrices $\boldsymbol{\alpha} = (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\alpha}_3)$ et $\boldsymbol{\beta}$ sont les quatre matrices de Dirac données par

$$\boldsymbol{\alpha}_k = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma}_k \\ \boldsymbol{\sigma}_k & 0 \end{pmatrix} \text{ et } \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}.$$

Les matrices de Pauli $\boldsymbol{\sigma}_1$, $\boldsymbol{\sigma}_2$ et $\boldsymbol{\sigma}_3$ sont ici définies par

$$\boldsymbol{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ et } \boldsymbol{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Contrairement à l'opérateur cinétique non relativiste, $\hbar/2m(-\Delta)$, qui est positif, l'opérateur de Dirac a pour spectre

$$\sigma(D^0) =]-\infty, mc^2] \cup [mc^2, +\infty[.$$

Les électrons peuvent, semble-t-il, avoir une énergie cinétique négative. Afin de contourner cette difficulté, P.A.M. Dirac a suggéré que, dans le vide libre, c'est-à-dire en l'absence de toute interaction, des électrons virtuels occupent les niveaux d'énergie négatifs de l'opérateur D^0 . En termes plus mathématiques, cette interprétation, dite de la mer de Dirac, signifie que le vide libre n'est pas identifié à l'opérateur nul, mais au projecteur orthogonal $P_-^0 \equiv \chi_{]-\infty, 0]}(D^0)$ sur le spectre négatif de l'opérateur de Dirac. En présence d'une densité de charges ν , le vide est polarisé par les interactions entre la densité de charges et les électrons virtuels. Il est alors représenté par le projecteur orthogonal $P_-^\nu \equiv \chi_{]-\infty, 0]}(D^\nu)$ sur le spectre négatif de l'opérateur de Dirac avec potentiel extérieur,

$$D^\nu \equiv D^0 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \nu * \frac{1}{|\cdot|}.$$

Le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock apparaît pour modéliser une configuration électronique à N électrons autour de la densité de charges ν . Il prend non seulement en compte les interactions avec la densité de charges, mais aussi les interactions entre électrons réels et virtuels. Ce modèle est une approximation de l'électrodynamique quantique. Nous reviendrons plus en détails sur la teneur de cette approximation au Paragraphe II.1.1. Le principe est, quoi qu'il en soit, identique à celui de l'approximation de Hartree-Fock. Les états électroniques sont représentés par des opérateurs de densité à un corps Γ , réduit à des opérateurs orthogonaux dans le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock. Ces projecteurs tiennent compte des N électrons réels et des électrons virtuels de la mer de Dirac. Leur rang est en particulier infini.

L'énergie totale du système est donnée par l'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock (18). Dans cette expression, l'opérateur Q devrait renvoyer à l'opérateur de densité à un corps Γ . Si tel était le cas, toutes les quantités au second membre de la formule (18) seraient infinies, suite à la prise en compte des électrons virtuels. Cette formule n'aurait pas de sens. Une façon de dépasser cette nouvelle difficulté consiste à retrancher l'énergie du vide libre, qui est elle-aussi infinie. En d'autres termes, la référence prise pour le calcul des énergies est celle du vide libre. Soulignons que ce qui nous intéresse ici est la manière dont une densité de charges ν et N électrons perturbent le vide libre. Seule la différence d'énergie entre le vide libre et la configuration électronique à N électrons est pertinente. Nous reviendrons au Paragraphe II.1.1 sur la justification rigoureuse de ce processus de renormalisation, lequel conduit à l'énergie renormalisée (18) dans laquelle l'opérateur Q désigne la différence entre les deux projecteurs orthogonaux Γ et P_-^0 .⁵

Le premier terme de l'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock correspond à l'énergie cinétique de l'opérateur Q . Lorsque Q est un projecteur de rang fini sur un sous-espace engendré par une famille de spineurs orthonormés $(\Psi_i)_{1 \leq i \leq M}$, ce terme vaut en effet

$$\text{tr}(D^0 Q) = \sum_{i=1}^M \langle \Psi_i, D^0(\Psi_i) \rangle_{L^2}.$$

Le second terme de la formule (18) renvoie aux interactions électrostatiques entre les électrons et la densité de charges ν , le troisième et le quatrième, aux interactions électrostatiques directes et d'échange entre l'ensemble des électrons réels et virtuels. Ce terme d'échange est omis dans le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit. Afin de simplifier la présentation mathématique qui suit, nous avons imposé un choix d'unités physiques tel que les constantes \hbar , $4\pi\epsilon_0$ et c soient égales à 1. Avec ce choix d'unités, l'opérateur de Dirac D^0 est donné par $D^0 = -i\alpha \cdot \nabla + m\beta$. Nous supposons dans la suite que la masse m de l'électron est aussi normalisée à 1. Le nombre α désigne alors la constante de structure fine de Sommerfeld, qui vaut $\alpha \equiv e^2$ avec ce choix d'unités. C'est un petit paramètre de l'ordre de 0,0073. La fonction matricielle $Q(x, y)$ est le noyau de l'opérateur Q . La densité de charges ρ_Q est définie comme précédemment par

$$\rho_Q(x) \equiv \text{tr}_{\mathbb{C}^4}(Q(x, x)).$$

Dans le cas où Q est un projecteur de rang fini sur un sous-espace engendré par une famille de spineurs orthonormés $(\Psi_i)_{1 \leq i \leq M}$, ces deux quantités généralisent celles introduites dans le modèle de Hartree-Fock à travers les formules

$$Q(x, y) = \sum_{i=1}^M \Psi_i(x) \Psi_i(y)^* \text{ et } \rho_Q(x) = \sum_{i=1}^M |\Psi_i(x)|_{\mathbb{C}^4}^2,$$

5. En fait, ce n'est pas le projecteur orthogonal P_-^0 qui devrait apparaître ici, mais un projecteur orthogonal \mathcal{P}_-^0 qui prend en compte les interactions électrostatiques des électrons virtuels (voir le Paragraphe II.1.1). Afin de simplifier la présentation, nous en sommes restés dans cette introduction, au projecteur orthogonal P_-^0 , lequel est pertinent dans le cas du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit.

où $\Psi_i(y)^*$ est le vecteur ligne adjoint du vecteur colonne $\Psi_i(y)$.

La détermination du vide polarisé, de type Bogoliubov-Dirac-Fock, passe par la minimisation de l'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock sous la contrainte que l'opérateur Q soit la différence entre un projecteur orthogonal Γ et le projecteur du vide libre P_-^0 . Le vide polarisé est donc solution du problème

$$\mathcal{E}_\nu^{BDF} \equiv \inf \{ E_\nu^{BDF}(Q), Q = \Gamma - P_-^0 \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)) \text{ t.q. } \Gamma^* = \Gamma \text{ et } \Gamma^2 = \Gamma \}. \quad (22)$$

Comme dans le cas de l'approximation de Hartree-Fock, un minimiseur Q_ν de ce problème est solution d'une équation auto-consistante

$$Q_\nu = \chi_{]-\infty, 0]}(D^{Q_\nu}) - P_-^0,$$

où

$$D^{Q_\nu} \equiv D^0 + \alpha(\rho_{Q_\nu} - \nu) * \frac{1}{|x|} - \alpha \frac{Q_\nu(x, y)}{|x - y|}$$

est l'opérateur de Fock, ou de champ moyen, du système. Le vide polarisé est décrit par le projecteur $\Gamma_\nu^- \equiv Q_\nu + P_-^0$. Il satisfait à l'interprétation de la mer de Dirac puisqu'il s'agit du projecteur spectral sur le spectre négatif de l'opérateur D^{Q_ν} .

L'état fondamental à N électrons, de type Bogoliubov-Dirac-Fock, est un minimiseur de l'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock sous la contrainte que l'opérateur Q soit la différence entre un projecteur orthogonal Γ et le projecteur du vide libre P_-^0 , et que la configuration totale présente N électrons réels. Lorsque Q est un projecteur de rang fini sur un sous-espace engendré par une famille de spineurs orthonormés $(\Psi_i)_{1 \leq i \leq M}$, le nombre d'électrons réels est égal à M , soit la trace du projecteur Q . Dans le cas général, la condition imposée pour signifier la présence de N électrons réels sera de même que la trace de Q soit égale à N . Un état fondamental à N électrons, de type Bogoliubov-Dirac-Fock, est donc une solution du problème

$$\mathcal{E}_\nu^{BDF}(N) \equiv \inf \{ E_\nu^{BDF}(Q), Q = \Gamma - P_-^0 \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)) \text{ t.q. } \Gamma^* = \Gamma, \Gamma^2 = \Gamma, \text{ et } \text{tr}(Q) = N \}. \quad (23)$$

Un minimiseur Q_N vérifie l'équation auto-consistante

$$Q_N = \chi_{]-\infty, \mu_N]}(D^{Q_N}) - P_-^0. \quad (24)$$

Dans cette expression, μ_N est le multiplicateur de Lagrange du problème. Il s'agit aussi du niveau de Fermi des électrons. L'opérateur de Fock, ou de champ moyen, D^{Q_N} est défini par

$$D^{Q_N} \equiv D^0 + \alpha(\rho_{Q_N} - \nu) * \frac{1}{|x|} - \alpha \frac{Q_N(x, y)}{|x - y|}.$$

Le vide, maintenant polarisé par la densité de charges ν et les N électrons réels, est représenté par le projecteur $\Gamma_N^- \equiv \chi_{]-\infty, 0]}(D^{Q_N})$ sur le spectre négatif de l'opérateur D^{Q_N} . La structure électronique des N électrons réels est donnée par la différence $\gamma_N \equiv \Gamma_N - \Gamma_N^-$, où $\Gamma_N \equiv Q_N + P_-^0$ désigne le projecteur associé à tous les électrons réels et virtuels. En d'autres termes, γ_N est le projecteur spectral $\chi_{]0, \mu_N]}(D^{Q_N})$ sur les niveaux d'énergie compris entre 0 et μ_N de l'opérateur de champ moyen D^{Q_N} . Au moins pour des densités de charges ν pas trop fortes, le niveau de Fermi μ_N est tel que le projecteur γ_N soit de rang N . Les spineurs des N électrons réels sont alors les états propres d'énergie comprise entre 0 et μ_N de l'opérateur D^{Q_N} .

Le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock décrit aussi des structures positroniques à N positrons. Lorsque l'entier N est négatif, un minimiseur Q_N du problème (23) satisfait l'équation (24) pour

un multiplicateur de Lagrange μ_N négatif. Le projecteur $\Gamma_N \equiv Q_N + P_-^0$ présente des lacunes par rapport au projecteur $\Gamma_N^- \equiv \chi_{]-\infty, 0]}(D^{Q_N})$ du vide polarisé, puisqu'il vaut

$$\Gamma_N = \Gamma_N^- - \chi_{[\mu_N, 0]}(D^{Q_N}).$$

Ces lacunes s'interprètent comme des positrons, d'énergie égale à l'opposé des niveaux d'énergie où ils apparaissent. Le projecteur orthogonal $\gamma_N \equiv \chi_{[\mu_N, 0]}(D^{Q_N})$ décrit une structure positronique à $|N|$ positrons, puisque le niveau de Fermi μ_N est tel que ce projecteur soit de rang $|N|$ (au moins pour des densités de charges ν pas trop fortes). Remarquons que la trace de l'opérateur Q_N s'interprète en fait, non pas comme le nombre de particules réelles considérées, mais, à une constante près, comme l'opposé de leur charge. Ces deux notions sont bien sûr identiques dans le cas des électrons.

Cette description du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock reste formelle. Plusieurs difficultés se présentent quant à la définition rigoureuse des objets mathématiques introduits. Nous reviendrons sur ces difficultés et donnerons une définition plus satisfaisante de ce modèle au Paragraphe II.1.1. Il n'en demeure pas moins que les principaux objets d'intérêt, que ce soit pour ce modèle, ou pour sa version réduite, sont la résolution des problèmes de minimisation (22) et (23), et la description qualitative des minimiseurs (s'il en existe). Comme ce modèle apparaît comme une approximation de l'électrodynamique quantique, il est aussi crucial de vérifier la validité de cette approximation. Même si d'autres aspects de ce modèle sont introduits dans ce mémoire, ce sont ces deux thématiques que nous aborderons dans le cas du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit à travers :

- la construction variationnelle des structures électroniques à N électrons,
- la renormalisation de leur densité de charges, ainsi que la justification d'un développement perturbatif de la densité de charges du vide polarisé (en l'absence d'électrons réels), lequel se trouve être semblable à celui obtenu dans le cadre de l'électrodynamique quantique.⁶

La construction des structures électroniques stables à N électrons repose sur des arguments variationnels proches de ceux invoqués pour la construction des ondes progressives minimisantes pour l'équation de Gross-Pitaevskii. Dans le cadre général des méthodes de concentration-compacité développées par P.-L. Lions [107, 108], l'existence des minimiseurs se déduit d'une condition de type Hunziker-van Winter-Zhislin [83, 134, 143]. Cette condition, établie de manière rigoureuse par C. Hainzl, M. Lewin et É. Séré [79], s'écrit

$$\forall k \in \mathbb{Z}^*, \mathcal{E}_\nu^{BDF}(N) < \mathcal{E}_\nu^{BDF}(N - k) + \mathcal{E}_0^{BDF}(k). \quad (25)$$

Elle reflète le fait qu'une structure électronique à N électrons liés est énergétiquement favorable par rapport à n'importe quelle structure à $N - k$ électrons liés, complétés d'une charge k non liée. Elle reste valable pour le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit.

La condition (25) n'est a priori pas vérifiée pour tout entier relatif N . Autour d'une densité de charges ν de charge totale Z , ne peuvent en principe exister que des structures électroniques à N électrons pour N compris entre 0 et $Z + 1$. En d'autres termes, le problème de minimisation (23) ne doit admettre des solutions que pour les valeurs de N dans l'intervalle $[0, Z + 1]$ (au moins si le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock constitue une approximation valable de la réalité physique). Cette conjecture d'ionisation est délicate sur le plan mathématique même pour des modèles plus simples (voir les travaux de J.-P. Solovej [130, 131] pour le modèle de Hartree-Fock). À notre connaissance, elle demeure ouverte pour le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock.

Dans le cas du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit, il existe deux entiers $N_m \leq 0$ et $N_M \geq Z$ tels que le problème (23) possède un minimiseur pour chaque valeur de N entre N_m et

6. Lorsque ne sont prises en compte que les interactions électrostatiques, soit, en particulier, en l'absence de photons, ce qui n'est guère raisonnable dans la pratique.

N_M . Cette dernière affirmation, accompagnée d'estimations plus précises des valeurs de N_m et N_M , forme la trame de l'article [67]. Nous tâcherons au Paragraphe II.2 d'expliquer les hypothèses précises, ainsi que les arguments mathématiques, qui mènent à cette affirmation.

La question de la renormalisation de la charge des minimiseurs Q_N ainsi construits découle d'une propriété surprenante de ces minimiseurs. Rappelons que Q_N décrit une structure électronique à N électrons. Le nombre d'électrons associés au projecteur Q_N est égal à N à travers la formule $N = \text{tr}(Q_N)$.⁷ En principe, le potentiel électrostatique V_{ph} , créé par les électrons réels et virtuels, et la densité de charges ν , est donc donné par l'approximation $V_{ph}(x) \approx \alpha(Z - N)/|x|$, lorsque $|x|$ est assez grand. Dans le formalisme du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock, ce potentiel est égal à

$$V_{ph}(x) \equiv \alpha \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\nu(y) - \rho_{Q_N}(y)}{|x - y|} dy, \quad (26)$$

de sorte que, si les fonctions ν et ρ_{Q_N} sont suffisamment régulières et intégrables, l'intégrale de leur différence doit être égale à $Z - N$. Il n'en est rien. Cette intégrale vaut

$$\int_{\mathbb{R}^3} (\nu - \rho_{Q_N}) = \frac{Z - N}{1 + \alpha B_\Lambda}, \quad (27)$$

où B_Λ est une fonction explicite de la coupure ultraviolette Λ , laquelle est introduite afin de donner un sens au modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock. Nous reviendrons sur cette notion de coupure ultraviolette, ainsi que sur la valeur de B_Λ au Chapitre II. Comme la fonction B_Λ est strictement positive, le potentiel électrostatique V_{ph} observé n'a, quoi qu'il en soit, pas la valeur qui devrait être la sienne.

Ce paradoxe est récurrent en électrodynamique quantique. Il apparaît lorsque les paramètres introduits pour définir le modèle, ici la constante de structure fine, dite nue, α , sont différents des paramètres mesurés. Pour $|x|$ assez grand, le potentiel électrostatique mesuré V_{ph} prend la valeur

$$V_{ph}(x) \approx \frac{\alpha}{1 + \alpha B_\Lambda} \times \frac{Z - N}{|x|}.$$

La constante de structure fine observée α_{ph} vaut donc

$$\alpha_{ph} \equiv \frac{\alpha}{1 + \alpha B_\Lambda}, \quad (28)$$

de façon à ce que le potentiel V_{ph} prenne la valeur $\alpha_{ph}(Z - N)/|x|$ pour $|x|$ assez grand. La constante de structure fine observée α_{ph} est différente de la constante nue, α , initialement introduite dans le modèle.

L'introduction de la constante observée α_{ph} affecte à son tour la définition de la densité totale de charges du système, initialement égale à la fonction $\rho_{Q_N} - \nu$. En principe, le potentiel électrostatique V_{ph} créé par le système, s'écrit sous la forme

$$V_{ph}(x) \equiv \alpha_{ph} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_{ph}(y)}{|x - y|} dy, \quad (29)$$

où ρ_{ph} désigne la densité totale de charges du système. Avant l'introduction des paramètres observés, cette formule est vérifiée à travers l'identité (26). Afin qu'elle reste vérifiée dans les paramètres observés, la densité ρ_{ph} doit en fait prendre la valeur

$$\alpha_{ph} \rho_{ph} \equiv \alpha(\nu - \rho_{Q_N}), \quad (30)$$

7. Ce n'est pas la trace de l'opérateur Q_N qui doit être considérée ici. Cet opérateur n'appartient pas à la classe des opérateurs à trace, donc sa trace n'a a priori aucun sens. Nous reviendrons au Paragraphe II.1.1 sur le sens à donner à la trace de Q_N . Cette remarque est d'autant plus cruciale ici que l'égalité (27) s'explique par le fait que l'opérateur Q_N ne soit pas à trace.

de sorte que la densité totale de charges observée ne sera plus égale à $\nu - \rho_{QN}$.

L'introduction des quantités α_{ph} et ρ_{ph} peut surprendre. Pour les valeurs de α_{ph} suffisamment petites, et dans le cas du vide polarisé, soit pour $N = 0$, elle est cependant cohérente avec l'électrodynamique quantique dans le cadre d'une renormalisation multiplicative du paramètre α_{ph} . À travers la formule (28), la constante α_{ph} dépend non seulement de la constante de structure fine nue α , mais aussi de la coupure ultraviolette Λ . Cette coupure apparaît aussi en électrodynamique quantique. Cependant, cette théorie calcule des développements asymptotiques par rapport au petit paramètre α_{ph} , par exemple de la densité de charges ρ_{ph} , qui sont indépendants de Λ . Cette surprenante propriété passe par l'introduction de techniques de renormalisation. La renormalisation dite multiplicative consiste à imposer que $\alpha_{ph} = Z_3\alpha$, où Z_3 est une constante de renormalisation, puis à développer la fonction ρ_{ph} en fonction de α_{ph} pour Z_3 fixée. À première vue, ceci ne change rien au fait que les termes du développement asymptotique devraient dépendre de Z_3 , en lieu et place de Λ . Il n'en est rien, et cette propriété reste vraie pour le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit dans le cas du vide polarisé, en l'absence d'électrons réels. Cette dernière affirmation est le principal objet de l'article [68], dont nous détaillerons les tenants et les aboutissants au Paragraphe II.3.

Ce mémoire est organisé de la façon suivante. Le Chapitre I traite de l'équation de Gross-Pitaevskii. Son premier paragraphe dresse l'état de l'art mathématique quant à cette équation. Il rappelle en particulier les principaux résultats mathématiques au sujet du problème de Cauchy, des ondes progressives et des régimes ondes longues pour l'équation de Gross-Pitaevskii. Le Paragraphe I.2 est consacré à l'étude des ondes progressives minimisantes, de leur construction dans le Paragraphe I.2.1 à leur stabilité orbitale au Paragraphe I.2.3, en passant par l'analyse de la limite transsonique (voir le Paragraphe I.2.2). Le Paragraphe I.3 décrit enfin la dérivation rigoureuse du régime ondes longues vers l'équation de Korteweg-de Vries en dimension un.

Le Chapitre II est quant à lui consacré au modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock. Le premier paragraphe détaille, de manière plus rigoureuse, sa dérivation à partir de l'électrodynamique quantique, puis présente les principaux résultats mathématiques le concernant. Le Paragraphe II.2 décrit la construction des structures électroniques à N électrons pour le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit. Enfin, le Paragraphe II.3 présente la manière dont est renormalisée la densité de charges du vide polarisé, renormalisation qui conduit à un développement perturbatif similaire à celui fourni par l'électrodynamique quantique.

Chapitre I

L'équation de Gross-Pitaevskii

Ce chapitre est consacré à l'analyse des solutions de l'équation de Gross-Pitaevskii d'énergie finie en dimension quelconque. La plupart des résultats énoncés se limitent cependant aux dimensions un, deux et trois. Ces résultats couvrent la construction et les propriétés qualitatives des ondes progressives minimisantes pour l'équation de Gross-Pitaevskii, et l'analyse de son régime ondes longues vers l'équation de Korteweg-de Vries. Avant de préciser plus avant ces résultats, rappelons les principaux points de l'analyse mathématique de l'équation de Gross-Pitaevskii.

I.1 Introduction

I.1.1 Le problème de Cauchy et la dynamique dispersive en temps long

Que ce soit pour traiter des régimes ondes longues, dont l'analyse nécessite au préalable d'avoir démontré l'existence de solutions, ou pour étudier les ondes progressives, dont le principal intérêt provient de leur rôle supposé dans la dynamique en temps long de l'équation de Gross-Pitaevskii, la première question à laquelle nous sommes confrontés, est celle de l'existence de solutions globales de l'équation de Gross-Pitaevskii pour toute donnée initiale Ψ_0 .

Ce problème de Cauchy a fait l'objet de nombreux travaux. F. Béthuel et J.-C. Saut [19] ont commencé par montrer qu'il est bien posé globalement dans l'espace $\{1\} + H^1(\mathbb{R}^N)$ pour $N = 2$ et $N = 3$. À la suite de ce résultat, se posait la question de savoir s'il était possible de l'étendre à toutes les données initiales dans l'espace d'énergie

$$\mathcal{E}(\mathbb{R}^N) \equiv \{\Psi \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^N), \text{ t.q. } E(\Psi) < +\infty\}.$$

En dimension un, P.E. Zhidkov [142] a répondu par l'affirmative à cette question (voir aussi [53]).

Théorème ([142]). *Soit $\Psi_0 \in \mathcal{E}(\mathbb{R})$. Il existe une unique solution globale Ψ dans $\mathcal{C}^0(\mathbb{R}, \mathcal{E}(\mathbb{R}))$ de l'équation de Gross-Pitaevskii de donnée initiale Ψ_0 . Cette solution conserve l'énergie de Ginzburg-Landau*

$$\forall t \in \mathbb{R}, E(\Psi(t)) = E(\Psi_0).$$

Remarque. La preuve de ce résultat passe par l'introduction des espaces de Zhidkov,

$$Z^s(\mathbb{R}^N) \equiv \{\Psi \in \mathcal{C}_b^0(\mathbb{R}^N), \text{ t.q. } \nabla \Psi \in H^{s-1}(\mathbb{R}^N)\},$$

pour tout nombre réel $s \geq 1$. En dimension un, l'espace d'énergie $\mathcal{E}(\mathbb{R})$ est égal par le théorème d'injection de Sobolev, à

$$\mathcal{E}(\mathbb{R}) = \{\Psi \in Z^1(\mathbb{R}), \text{ t.q. } 1 - |\Psi|^2 \in L^2(\mathbb{R})\}.$$

En particulier, la structure métrique, qui permet de parler de solutions continues en temps, est définie par la distance

$$\forall (\Psi_1, \Psi_2) \in \mathcal{E}(\mathbb{R})^2, d_{\mathcal{E}}(\Psi_1, \Psi_2) \equiv \left(\|\Psi_1 - \Psi_2\|_{L^\infty(\mathbb{R})}^2 + \|\Psi_1' - \Psi_2'\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + \||\Psi_1|^2 - |\Psi_2|^2\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

O. Goubet [60] a complété ce résultat en dimension deux en établissant que le problème de Cauchy est bien posé globalement dans l'espace $Z^2(\mathbb{R}^2)$. Enfin, P. Gérard a prouvé qu'il est bien posé globalement dans l'espace d'énergie en dimensions deux et trois, ainsi que pour les données initiales d'énergie suffisamment petite en dimension quatre.

Théorème ([57]). *Soit $N = 2$ ou $N = 3$, et Ψ_0 , une fonction de $\mathcal{E}(\mathbb{R}^N)$. Il existe une unique solution globale Ψ dans $C^0(\mathbb{R}, \mathcal{E}(\mathbb{R}^N))$ de l'équation de Gross-Pitaevskii de donnée initiale Ψ_0 . Cette solution conserve l'énergie de Ginzburg-Landau*

$$\forall t \in \mathbb{R}, E(\Psi(t)) = E(\Psi_0).$$

En dimension $N = 4$, il existe un nombre $\varepsilon_0 > 0$ tel que ces conclusions demeurent vraies pour toute donnée initiale $\Psi_0 \in \mathcal{E}(\mathbb{R}^4)$ d'énergie $E(\Psi_0) < \varepsilon_0$.

Remarque. La preuve de ce résultat passe par le fait que l'espace d'énergie $\mathcal{E}(\mathbb{R}^N)$ est égal à

$$\mathcal{E}(\mathbb{R}^N) = \{ \Psi \in Z^1(\mathbb{R}^N) + H^1(\mathbb{R}^N), \text{ t.q. } 1 - |\Psi|^2 \in L^2(\mathbb{R}^N) \}.$$

La structure métrique qui permet de parler de solutions continues en temps, est définie par la distance

$$\forall (\Psi_1, \Psi_2) \in \mathcal{E}(\mathbb{R}^N)^2, d_{\mathcal{E}}(\Psi_1, \Psi_2) \equiv \left(\|\Psi_1 - \Psi_2\|_{Z^1(\mathbb{R}^N) + H^1(\mathbb{R}^N)}^2 + \||\Psi_1|^2 - |\Psi_2|^2\|_{L^2(\mathbb{R}^N)}^2 \right)^{\frac{1}{2}},$$

où la norme $\|\cdot\|_{Z^1(\mathbb{R}^N) + H^1(\mathbb{R}^N)}$ est donnée par l'expression

$$\|\Psi\|_{Z^1 + H^1} \equiv \inf \{ \|\Psi_1\|_{Z^1} + \|\Psi_2\|_{H^1}, \Psi = \Psi_1 + \Psi_2 \text{ t.q. } (\Psi_1, \Psi_2) \in Z^1(\mathbb{R}^N) \times H^1(\mathbb{R}^N) \}.$$

L'existence globale et l'unicité des solutions de l'équation de Gross-Pitaevskii dans l'espace d'énergie constitue le résultat maximal que l'on puisse espérer quant au problème de Cauchy. Elles permettent d'envisager aussi bien l'étude des régimes ondes longues, que celle de la dynamique en temps long. Nous renvoyons à l'article de revue de P. Gérard [58] pour de plus amples détails sur la preuve des énoncés ci-dessus.

Cependant, il est parfois utile de savoir que le problème de Cauchy est bien posé dans des classes de fonctions différentes de l'espace d'énergie. C'est le cas pour l'analyse des régimes ondes longues où la régularité des solutions considérées joue un rôle essentiel. La difficulté n'est pas alors d'établir l'existence locale de solutions, qui est un corollaire des arguments développés pour montrer les deux énoncés précédents, mais de contrôler le temps maximal d'existence indépendamment du petit paramètre ε introduit pour l'analyse du régime ondes longues (voir le Paragraphe I.3).

Ceci s'avère aussi pertinent pour démontrer la stabilité orbitale des ondes progressives minimisantes. La preuve variationnelle de leur stabilité orbitale [8, 28] requiert la conservation de l'énergie E , ainsi que celle du moment scalaire p . Comme il est difficile de bien définir le moment scalaire p dans l'espace d'énergie, il est utile de résoudre le problème de Cauchy dans un espace fonctionnel où la définition du moment scalaire n'est plus une difficulté. C. Gallo [54] a ainsi montré que le problème de Cauchy admettait une unique solution globale dans des classes de fonctions du type $\{u\} + H^1(\mathbb{R}^N)$ en dimensions deux et trois (et pour des données initiales

d'énergie petite en dimension quatre). La fonction u peut être choisie comme une onde progressive u_c . C. Gallo [54] a établi que le moment scalaire p , défini dans l'espace $\{u_c\} + H^1(\mathbb{R}^N)$ par la formule¹

$$p(u_c + v) = p(u_c) + \int_{\mathbb{R}^N} \langle i\partial_1 u_c, v \rangle_{\mathbb{C}} + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^N} \langle i\partial_1 v, v \rangle_{\mathbb{C}},$$

est conservé le long du flot de l'équation de Gross-Pitaevskii. Aussi est-il possible d'aborder le problème de la stabilité orbitale des ondes progressives u_c dans le cadre fonctionnel offert par l'espace $\{u_c\} + H^1(\mathbb{R}^N)$ (voir le Paragraphe I.2.3).

L'analyse de la dynamique en temps long de l'équation de Gross-Pitaevskii ne se limite pas à l'étude de la stabilité orbitale des ondes progressives minimisantes. D'autres phénomènes, en particulier dispersifs, apparaissent. Dans cette optique, S. Gustafson, K. Nakanishi et T.-P. Tsai [74, 75, 76] se sont intéressés au problème du scattering des solutions d'énergie petite. Étant donnée une petite perturbation $\Psi_0 \equiv 1 + \Phi_0$ de la solution constante 1, il s'agit de déterminer si la solution $\Psi \equiv 1 + \Phi$ associée à la donnée initiale Ψ_0 , évolue en temps long comme l'équation linéarisée autour de la constante 1. En d'autres termes, la fonction Φ évolue-t-elle suivant l'équation

$$i\partial_t \Phi + \Delta \Phi - 2\text{Re}(\Phi) = 0, \quad (\text{I.1})$$

en temps long? S. Gustafson, K. Nakanishi et T.-P. Tsai [74] ont résolu ce problème en toute dimension supérieure ou égale à trois. Afin d'énoncer proprement leurs résultats, il est nécessaire d'introduire les opérateurs $H \equiv \sqrt{-\Delta(2 - \Delta)}$, $U \equiv \sqrt{-\Delta/(2 - \Delta)}$ et

$$V(\Phi) \equiv U^{-1}\text{Re}(\Phi) + i\text{Im}(\Phi),$$

lesquels transforment l'équation de Gross-Pitaevskii en l'équation

$$i\partial_t v - H(v) + N(v) = 0,$$

où $v \equiv V^{-1}(\Phi)$ et $N(v) \equiv iV^{-1}(iV(v)(V(v) + 2\overline{V(v)} + |V(v)|^2))$. Le résultat de S. Gustafson, K. Nakanishi et T.-P. Tsai en dimension supérieure ou égale à quatre prend alors la forme suivante.

Théorème ([74]). *Soit $N \geq 4$, et $\Psi_0 = 1 + \Phi_0 : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{C}$ telle que $v_0 = V^{-1}\Phi_0 \in H^{\frac{N}{2}-1}(\mathbb{R}^N)$. Il existe une constante positive ε_0 telle que, si la donnée initiale v_0 vérifie la condition*

$$\|v_0\|_{H^{\frac{N}{2}-1}(\mathbb{R}^N)} < \varepsilon_0,$$

alors il existe une unique solution globale Ψ de l'équation de Gross-Pitaevskii telle que la fonction v appartient à l'espace $C^0(\mathbb{R}, H^{\frac{N}{2}-1}(\mathbb{R}^N))$. Dans ce cas, il existe deux fonctions $v^{\pm} \in H^{\frac{N}{2}-1}(\mathbb{R}^N)$ telles que

$$v(t) - e^{-itH} v^{\pm} \rightarrow 0 \text{ dans } H^{\frac{N}{2}-1}(\mathbb{R}^N),$$

lorsque $t \rightarrow \pm\infty$.

Remarque. Les fonctions Φ^{\pm} définies par

$$\Phi^{\pm}(t) = U\text{Re}(e^{-itH} v^{\pm}) + i\text{Im}(e^{-itH} v^{\pm}),$$

sont solutions de l'équation (I.1). Cet énoncé confirme que la fonction Φ évolue suivant l'équation (I.1) en temps long.

1. Cette définition doit être complétée par le choix de la valeur affectée au moment scalaire d'une onde progressive u_c . Nous reviendrons sur cette question au Paragraphe I.1.2.

Ce premier résultat amène deux remarques. La première concerne le problème de Cauchy pour l'équation de Gross-Pitaevskii. D'après le théorème précédent, ce problème est bien posé globalement pour les petites perturbations suffisamment régulières de la solution constante 1 en toute dimension supérieure ou égale à quatre. Ceci complète l'analyse précédente qui se limitait pour l'essentiel aux dimensions inférieures ou égales à quatre. À notre connaissance, le caractère bien posé globalement du problème de Cauchy demeure ouvert pour des données initiales quelconques en toute dimension supérieure ou égale à quatre.

La seconde remarque est liée aux ondes progressives non constantes d'énergie petite. Ces objets non linéaires n'ont pas un comportement dispersif en temps long. Leur existence est une entrave à un possible résultat de scattering des solutions d'énergie petite. Le théorème précédent implique donc, en un certain sens, leur non-existence. A. de Laire [41] a corroboré cette remarque en toute dimension supérieure ou égale à quatre en établissant la non-existence d'ondes progressives non constantes au dessous d'un seuil énergétique $\mathcal{E}_N > 0$ (voir également [132]).

En dimension trois, S. Gustafson, K. Nakanishi et T.-P. Tsai ont démontré le résultat suivant.

Théorème ([76]). *Il existe une constante $\varepsilon_0 > 0$ telle que, si une condition initiale $\Psi_0 = 1 + \Phi_0 : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ vérifie*

$$\int_{\mathbb{R}^3} (1 + |x|^2) (|\operatorname{Re}(\phi_0(x))|^2 + |\nabla \phi_0(x)|^2) dx < \varepsilon_0^2,$$

alors il existe une unique solution globale Ψ de l'équation de Gross-Pitaevskii telle que la fonction $v = V^{-1}(\Phi)$ appartienne à l'espace $\mathcal{C}^0(\mathbb{R}, H_w^1(\mathbb{R}^3))$, où

$$H_w^1(\mathbb{R}^3) \equiv \left\{ f \in L_{\text{loc}}^1(\mathbb{R}^3), \text{ t.q. } f = \frac{g}{1 + |\cdot|^2}, \text{ avec } g \in H^1(\mathbb{R}^3) \right\}.$$

Dans ce cas, il existe une fonction $v^\infty \in H_w^1(\mathbb{R}^3)$ telle que

$$\|v(\cdot, t) - e^{-itH} v^\infty\|_{H^1(\mathbb{R}^3)} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{t}}\right), \text{ et } \|(1 + |\cdot|^2)(e^{iHt} v(\cdot, t) - v^\infty)\|_{H^1(\mathbb{R}^3)} \rightarrow 0,$$

lorsque $t \rightarrow +\infty$.

Remarque. Comme en dimension supérieure à quatre, la fonction Φ^∞ définie par

$$\Phi^\infty(t) = U \operatorname{Re}(e^{-itH} v^\infty) + i \operatorname{Im}(e^{-itH} v^\infty),$$

est solution de l'équation (I.1). La fonction Φ évolue suivant l'équation (I.1) en temps long.

Cet énoncé amène également à s'intéresser à l'existence d'ondes progressives non constantes d'énergie petite en dimension trois. Nous avons établi que de telles ondes progressives n'existent pas (voir également [132]). Ce n'est plus vrai en dimension deux, où il existe des ondes progressives dont les énergies prennent n'importe quelle valeur strictement positive (voir le Paragraphe I.2.1). En particulier, il ne peut y avoir scattering des solutions d'énergie petite en dimension deux.

Ceci n'empêche pas l'existence de solutions dispersives, lesquelles vont se comporter en temps long suivant l'évolution linéaire donnée par l'équation (I.1). S. Gustafson, K. Nakanishi et T.-P. Tsai [75] ont construit des solutions particulières de ce type en dimension deux. Leur comportement asymptotique est cependant un peu plus complexe que celui prévu par l'équation (I.1). Nous renvoyons à l'article de revue de K. Nakanishi [122] pour plus de précisions à ce sujet.

I.1.2 Les ondes progressives

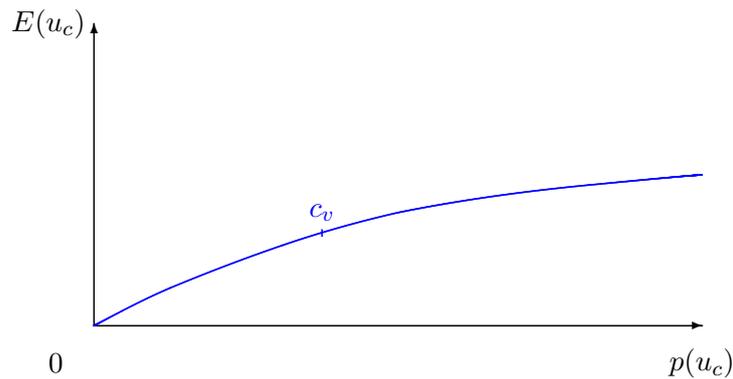
L'analyse des ondes progressives a débuté par plusieurs travaux tant numériques que formels quant à leur existence et leurs propriétés qualitatives. Après l'étude de leur limite transsonique en

dimension trois, réalisée par S.V. Iordanskii et A.V. Smirnov [86], C.A. Jones, S.J. Putterman et P.H. Roberts [90, 89] ont minutieusement détaillé leurs principales caractéristiques en dimensions deux et trois.² Avant d'énumérer les principaux résultats mathématiques les concernant, il n'est pas inutile de revenir sur les travaux pionniers de C.A. Jones, S.J. Putterman et P.H. Roberts.

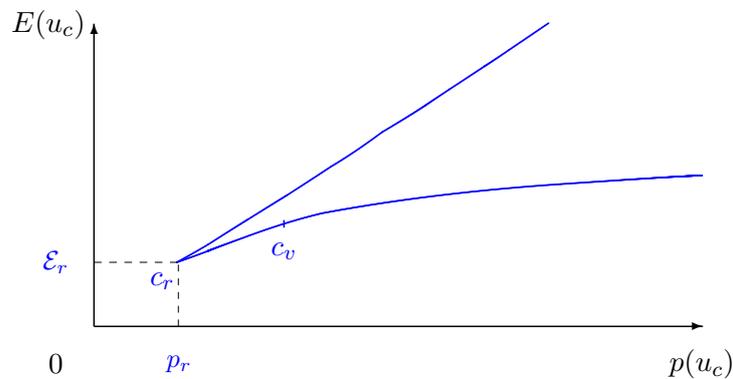
La première question qu'ils ont examinée est celle de l'existence d'ondes progressives non constantes d'énergie finie. L'équation (OPc) possède des solutions très simples : les fonctions constantes de module un ou la fonction nulle. L'équation est de plus invariante par multiplication par un nombre complexe de module un, ou par translation, ainsi que par la transformation qui, à une fonction v , associe la fonction $\tilde{v}(x) = \overline{v(x)} \exp(-icx_1)$. Ceci permet de construire une famille de solutions élémentaires de l'équation (OPc) à deux paramètres $\lambda \in \mathbb{U} \equiv \{z \in \mathbb{C}, \text{ t.q. } |z| = 1\}$, et $\delta \in \{0, 1\}$, données par les formules $u_{\lambda, \delta}(x) \equiv \lambda e^{-ic\delta x_1}$. Ces solutions sont soit constantes, soit d'énergie infinie. Se pose donc la question de l'existence d'ondes progressives non constantes d'énergie finie.

À cette question, C.A. Jones, S.J. Putterman et P.H. Roberts ont répondu par l'affirmative. Par des arguments numériques et formels, ils ont établi qu'il existe au moins une famille d'ondes progressives u_c non constantes d'énergie finie, dont les vitesses c couvrent l'intervalle $]0, \sqrt{2}[$. Par contre, il n'existe pas d'ondes progressives non constantes d'énergie finie, et de vitesse $c = 0$, ou $c \geq \sqrt{2}$. En d'autres termes, les seules ondes progressives non constantes d'énergie finie sont subsoniques. Elles ne peuvent être ni stationnaires, ni soniques, ni supersoniques.

C.A. Jones, S.J. Putterman et P.H. Roberts ont représenté cette famille d'ondes progressives dans le plan énergie-moment scalaire. En dimension deux, leur tracé a l'allure suivante



tandis qu'en dimension trois, il a l'aspect suivant



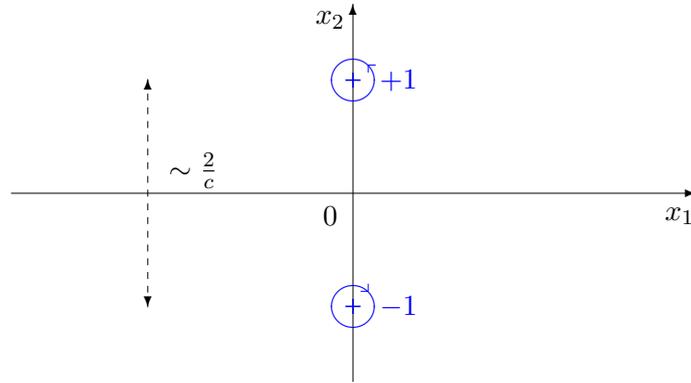
2. Le cas de la dimension un est sans réel objet, puisque toutes les ondes progressives se calculent explicitement (voir les formules (3)). Remarquons néanmoins que de nombreuses propriétés, explicites par ces formules, se généralisent aux dimensions deux et trois.

Sur chacune de ces courbes, chaque point correspond à une onde progressive u_c d'énergie $E(u_c)$ et de moment $p(u_c)$. La vitesse c de l'onde progressive est la pente de la tangente à la courbe au point considéré. Au moins formellement, la vitesse c vérifie en effet la relation

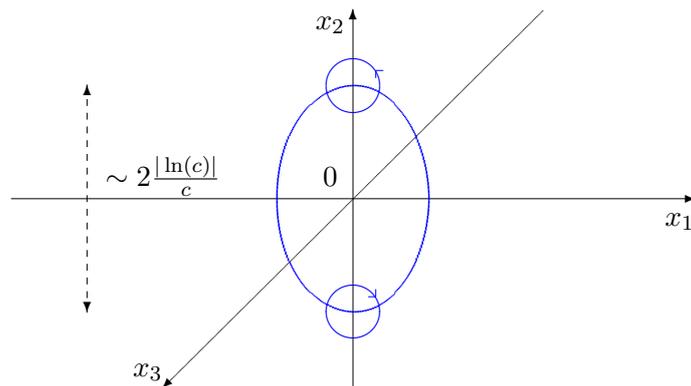
$$c = \frac{\partial E}{\partial p}(p(v_c)).$$

En dimension deux, comme en dimension trois, l'énergie et le moment scalaire de u_c deviennent infinis lorsque sa vitesse c tend vers 0. En dimension deux, ces deux quantités tendent vers 0 à la limite transsonique $c \rightarrow \sqrt{2}$. Au contraire, en dimension trois, l'énergie et le moment scalaire de u_c deviennent infinis à la limite transsonique. La courbe se divise donc en deux branches, séparées par un point de rebroussement atteint pour une valeur de la vitesse c_r .

Après avoir obtenu ces deux tracés, C.A. Jones, S.J. Putterman et P.H. Roberts se sont tournés vers les propriétés qualitatives des ondes progressives u_c . Lorsque la vitesse c est petite, celles-ci présentent des vortex. Ce sont des points en lesquels u_c s'annule, et autour desquels l'application $\frac{u_c}{|u_c|}$ a un degré topologique non nul. En dimension deux, u_c présente deux vortex de degrés -1 et 1 , symétriques par rapport à l'axe x_1 , et à une distance équivalente à $\frac{2}{c}$ lorsque c tend vers 0.



En dimension trois, u_c présente un anneau de vortex autour de l'axe x_1 , de diamètre équivalent à $\frac{2|\ln(c)|}{c}$, lorsque c tend vers 0.



Dans les deux cas, les solutions u_c vérifient la symétrie naturelle de l'équation (OPc), qui est la symétrie par rapport à l'axe x_1 en dimension deux, l'invariance par rotation autour de l'axe x_1 en dimension trois.

Lorsque la vitesse c augmente et dépasse une vitesse critique c_v , les ondes progressives u_c ne s'annulent plus. Au moins numériquement, la vitesse critique c_v semble inférieure à celle du point de rebroussement c_r en dimension trois. Enfin, lorsque c approche la vitesse du son $c_s = \sqrt{2}$, la

fonction u_c devient une onde de raréfaction qui converge vers une constante de module un. Il est alors possible de la relever sous la forme $u_c = \varrho_c \exp i\varphi_c$, où le module ϱ_c , et la phase φ_c sont des fonctions à valeurs réelles définies sur \mathbb{R}^N . À la limite $c \rightarrow \sqrt{2}$, les fonctions ϱ_c et φ_c sont gouvernées par l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1). Les fonctions N_c et $\partial_1 \Theta_c$, données par les changement d'échelles

$$\forall x = (x_1, x_\perp) \in \mathbb{R}^N, N_c(x) = \frac{6}{\varepsilon_c^2} \left(1 - \varrho_c \left(\frac{x_1}{\varepsilon_c}, \frac{\sqrt{2}x_\perp}{\varepsilon_c^2} \right)^2 \right), \text{ et } \partial_1 \Theta_c(x) = \frac{6\sqrt{2}}{\varepsilon_c^2} \partial_1 \varphi_c \left(\frac{x_1}{\varepsilon_c}, \frac{\sqrt{2}x_\perp}{\varepsilon_c^2} \right), \quad (\text{I.2})$$

où $\varepsilon_c \equiv \sqrt{2 - c^2}$, convergent en effet vers une onde solitaire de vitesse 1 pour l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1).

C.A. Jones, S.J. Putterman et P.H. Roberts ont aussi décrit le comportement asymptotique des ondes progressives u_c . Celui-ci est donné, à une constante multiplicative de module un près, par le développement formel

$$u_c(x_1, x_\perp) \simeq 1 + \frac{i\alpha x_1}{(x_1^2 + (1 - \frac{c^2}{2})|x_\perp|^2)^{\frac{N}{2}}} + \dots,$$

en dimensions deux et trois. Le coefficient dipolaire élastique α dépend explicitement de l'énergie $E(u_c)$ et du moment scalaire $p(u_c)$ à travers les relations

$$2\pi\alpha \sqrt{1 - \frac{c^2}{2}} = cE(u_c) + 2\left(1 - \frac{c^2}{4}\right)p(u_c),$$

en dimension deux, et

$$4\pi\alpha = \frac{c}{2}E(u_c) + 2p(u_c),$$

en dimension trois. Ces développements indiquent qu'une onde progressive u_c converge vers une constante de module un à l'infini, que l'on peut supposer égale à 1, quitte à multiplier par un nombre complexe de module un. La différence $u_c - 1$ a une décroissance algébrique explicite, essentiellement gouvernée par la fonction $x \mapsto \frac{1}{|x|^{N-1}}$.

Quant à la stabilité des ondes progressives, C.A. Jones, S.J. Putterman et P.H. Roberts estiment que toutes les ondes progressives u_c sont stables en dimension deux, ainsi que toutes celles sur la branche inférieure en dimension trois. Au contraire, les ondes progressives sur la branche supérieure en dimension trois semblent instables. Cette différence est liée à la caractérisation des solutions sur la branche inférieure comme les minimiseurs de l'énergie de Ginzburg-Landau à moment scalaire fixé, ce qui ne peut être le cas de celles sur la branche supérieure. Nous reviendrons sur cette analyse dans les Paragraphes I.2.1 et I.2.3, mais commençons par rappeler l'ensemble des résultats mathématiques qui sont venus confirmer rigoureusement le tableau dépeint par C.A. Jones, S.J. Putterman et P.H. Roberts.

Les premiers travaux mathématiques quant aux ondes progressives non constantes d'énergie finie, remontent à la preuve par F. Béthuel et J.-C. Saut [19] de leur existence pour un intervalle de vitesse petite $]0, c_2[$ en dimension deux. Les ondes progressives sont construites comme points critiques non constants de la fonctionnelle $E - cp$ par le lemme du col. Elles présentent deux vortex de degré ± 1 à une distance équivalente à $2/c$, lorsque $c \rightarrow 0$.

En dimension supérieure ou égale à trois, le premier résultat d'existence est dû à F. Béthuel, G. Orlandi et D. Smets [18]. Ils ont établi l'existence d'une suite de vitesses $(c_n)_{n \in \mathbb{N}}$, qui converge vers 0, telle qu'il existe des solutions non constantes de l'équation (OPc) pour chacune des vitesses c_n . Comme en dimension deux, ces solutions présentent des vortex, massés dans ce cas, le long d'un anneau de diamètre équivalent à $2|\ln(c)|/c$, lorsque $c \rightarrow 0$. La preuve ne repose plus sur la

construction de points critiques de la fonctionnelle $E - cp$, mais sur la minimisation de l'énergie E sous la contrainte d'un moment scalaire fixé p . C'est la raison pour laquelle elle ne procure qu'une suite de vitesses pour lesquelles il existe des solutions, en lieu et place d'un intervalle de vitesses. Nous reviendrons sur cette remarque au Paragraphe I.2.1. Soulignons, avant cela, que D. Chiron [32] a complété le travail de F. Béthuel, G. Orlandi et D. Smets en montrant, une nouvelle fois par le lemme du col, l'existence d'un intervalle de vitesses petites $]0, c_N[$ pour chacune desquelles il existe des solutions non constantes de l'équation (OPc). L'ensemble de ces résultats peut se résumer ainsi.

Théorème ([19, 18, 32]). *Soit $N \geq 2$. Il existe une constante $c_N > 0$ telle que l'équation (OPc) a une solution u_c non constante d'énergie finie pour chaque valeur de $c \in]0, c_N[$. L'énergie et le moment scalaire de u_c vérifient*

$$E(u_c) \sim \frac{\pi^{\frac{N+1}{2}} (N-1)(N-2)^{N-2} |\ln(c)|^{N-1}}{\Gamma(\frac{N+1}{2}) c^{N-2}},$$

et

$$p(u_c) \sim \frac{\pi^{\frac{N+1}{2}} (N-2)^{N-1} \left(\frac{|\ln(c)|}{c}\right)^{N-1}}{\Gamma(\frac{N+1}{2})},$$

lorsque $c \rightarrow 0$. En dimension deux, la fonction u_c présente deux vortex de degré ± 1 , situés à une distance équivalente à $2/c$, lorsque $c \rightarrow 0$. En dimension trois, elle présente un anneau de vortex de diamètre équivalent à $2|\ln(c)|/c$, lorsque $c \rightarrow 0$.

Remarque. F. Lin et J. Wei [104] ont récemment retrouvé ce résultat en dimension supérieure ou égale à deux par des arguments perturbatifs, et non plus variationnels.

La construction d'ondes progressives non constantes de vitesse quelconque dans l'intervalle $]0, \sqrt{2}[$ est plus délicate. Les arguments variationnels qui amènent à ce théorème, ainsi que les arguments perturbatifs de F. Lin et J. Wei, reposent sur la présence de vortex dans le cas des vitesses petites. Nous reviendrons au Paragraphe I.2.1 sur une première manière de contourner cette difficulté, introduite dans un travail en collaboration avec F. Béthuel et J.-C. Saut [14], laquelle ne permet cependant pas de conclure quant à l'existence d'ondes progressives de vitesse quelconque dans l'intervalle $]0, \sqrt{2}[$.

Plus récemment, M. Maris [115] a proposé une façon alternative de procéder qui lui a permis de construire des ondes progressives pour toute vitesse $c \in]0, \sqrt{2}[$ en toute dimension supérieure ou égale à trois. Sa preuve repose sur un argument variationnel différent des précédents. Il s'agit de minimiser la fonctionnelle $E - cp$ sous la contrainte de Pohozaev définie par

$$\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^N} (\partial_1 u)^2 + \frac{N-3}{2(N-1)} \int_{\mathbb{R}^N} |\nabla_{\perp} u|^2 + \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^N} (1 - |u|^2)^2 - cp(u) = 0. \quad (\text{I.3})$$

Cette identité, introduite par S.I. Pohozaev [126] dans un cadre plus général, est vérifiée par toutes les solutions u_c de l'équation (OPc). Elle s'obtient en multipliant l'équation par les fonctions $x \mapsto x_k \partial_k u_c(x)$ pour chaque entier $0 \leq k \leq N$, puis en intégrant par parties. Cette contrainte est, a priori, vérifiée par toute solution de l'équation (OPc). Ce nouveau problème de minimisation admet des solutions non constantes u_c pour chaque vitesse c dans l'intervalle $]0, \sqrt{2}[$ en toute dimension supérieure ou égale à trois. Ces solutions sont des ondes progressives de vitesse c . Le multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte de Pohozaev disparaît en effet par des arguments d'échelles. Tout ceci a permis à M. Maris de démontrer le résultat suivant.

Théorème ([115]). *Soit $N \geq 3$ et $0 < c < \sqrt{2}$. Il existe une onde progressive u_c non constante d'énergie finie et de vitesse c pour l'équation de Gross-Pitaevskii.*

Cet énoncé confirme les observations de C.A. Jones, S.J. Putterman et P.H. Roberts qui prévoyaient l'existence d'ondes progressives non constantes pour toute vitesse subsonique. Il complète les résultats précédents sur le cas des vitesses petites. Il n'est néanmoins pas évident que les solutions construites dans les deux cas soient identiques. Cette difficulté est inhérente aux méthodes variationnelles qui ne fournissent pas, en général, l'unicité des solutions construites.³ Dans le cas de l'équation (OPc), l'unicité aux invariances près des solutions non constantes demeure un problème ouvert, et ce, même si l'on se restreint aux solutions à symétrie axiale autour de l'axe x_1 . Il reste donc difficile d'établir que des solutions construites par des méthodes variationnelles différentes sont en fait identiques.

Le problème de l'existence de solutions non constantes de l'équation (OPc) pour toute vitesse subsonique demeure ouvert en dimension deux. En un sens, ce problème est lié à celui de l'unicité des ondes progressives. Les arguments développés au Paragraphe I.2.1 permettraient sans doute de construire de telles solutions, si leur unicité était connue (voir le Paragraphe I.2.1).

Dans le cas de la vitesse nulle, ou des vitesses supersoniques, ces problèmes ne se posent plus. F. Béthuel et J.-C. Saut [19] ont en effet déduit de l'identité de Pohozaev que l'équation (OPc) ne possède pas de solutions non constantes de vitesse nulle, tandis que nous avons établi qu'elle n'en possède pas non plus de vitesse $c > \sqrt{2}$, et de vitesse $c = \sqrt{2}$ en dimension deux.

Théorème ([19, 62, 64]). *Soit $N \geq 2$, et $c = 0$ ou $c > \sqrt{2}$. Les seules ondes progressives d'énergie finie et de vitesse c pour l'équation de Gross-Pitaevskii sont les solutions constantes de module un. Cette affirmation demeure vraie si $N = 2$ et $c = \sqrt{2}$.*

Remarque. Si u_c est une solution de vitesse c de l'équation (OPc), la fonction conjuguée $\overline{u_c}$ est une solution de vitesse $-c$ pour cette même équation. Ceci explique qu'ici, comme dans tout ce mémoire, nous nous restreignons aux solutions de vitesse positive.

Le problème de la non-existence des ondes progressives non constantes de vitesse $c = \sqrt{2}$ demeure ouvert en dimension supérieure ou égale à trois (voir [64] pour une discussion à ce sujet). Soulignons néanmoins que l'énoncé précédent corrobore à nouveau les observations de C.A. Jones, S.J. Putterman et P.H. Roberts.

C'est aussi le cas lorsque l'on s'intéresse aux propriétés qualitatives des ondes progressives. Nous avons ainsi démontré qu'elles convergent bien vers une constante de module un à l'infini, et que la décroissance de leur différence avec cette constante est algébrique.

Théorème ([61, 63, 65, 66]). *Soit $N \geq 2$ et $0 < c < \sqrt{2}$. Si u_c est une onde progressive d'énergie finie et de vitesse c pour l'équation de Gross-Pitaevskii, alors, il existe une fonction à valeurs réelles u_c^∞ , définie sur la sphère \mathbb{S}^{N-1} , telle que*

$$|x|^{N-1} \left(u_c(x) - 1 \right) - i u_c^\infty \left(\frac{x}{|x|} \right) \rightarrow 0,$$

lorsque $|x| \rightarrow +\infty$. De plus, il existe des constantes α, β_2, \dots , et β_N telles que la fonction u_c^∞ est égale à

$$\forall \sigma \in \mathbb{S}^{N-1}, u_c^\infty(\sigma) = \alpha \frac{\sigma_1}{\left(1 - \frac{c^2}{2} + \frac{c^2 \sigma_1^2}{2}\right)^{\frac{N}{2}}} + \sum_{j=2}^N \beta_j \frac{\sigma_j}{\left(1 - \frac{c^2}{2} + \frac{c^2 \sigma_1^2}{2}\right)^{\frac{N}{2}}}.$$

Les constantes α et β_j sont données par les relations

$$\alpha = \frac{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)}{2\pi^{\frac{N}{2}}} \left(1 - \frac{c^2}{2}\right)^{\frac{N-3}{2}} \left(\frac{4-N}{2} c E(u_c) + \left(2 + \frac{N-3}{2} c^2\right) p(u_c) \right),$$

3. Ce peut cependant être le cas si les fonctionnelles considérées vérifient certaines hypothèses supplémentaires, des hypothèses de stricte convexité par exemple.

et

$$\beta_j = \frac{\Gamma(\frac{N}{2})}{\pi^{\frac{N}{2}}} \left(1 - \frac{c^2}{2}\right)^{\frac{N-1}{2}} P_j(u_c),$$

où $P_j(u_c)$ désigne la $j^{\text{ième}}$ composante du moment $P(u_c)$.

Remarque. Lorsque $c = \sqrt{2}$, les solutions non constantes de l'équation (OPc), si elles existent, convergent aussi vers une constante de module un à l'infini (voir [64]).

J. Wei et W. Yao [135] ont récemment exploité une identité intégrale, introduite dans un autre cadre par C. Gui [73], pour montrer que les constantes β_j sont toutes identiquement nulles. Le comportement asymptotique d'une onde progressive de vitesse c est donc déterminé au premier ordre de manière unique par son énergie et son moment scalaire. Cette description asymptotique peut apparaître comme un premier indice de l'unicité, aux invariances près, des ondes progressives de mêmes vitesse, énergie et moment scalaire.

A. Farina [50] a complété cette description qualitative en montrant que les ondes progressives sont des fonctions régulières qui vérifient la borne uniforme suivante (voir également [19]).

Théorème ([50]). *Soit $N \geq 2$ et $0 < c < \sqrt{2}$. Une onde progressive u_c d'énergie finie et de vitesse c pour l'équation de Gross-Pitaevskii est de classe C^∞ sur \mathbb{R}^N . De plus, elle satisfait*

$$\|u_c\|_{L^\infty(\mathbb{R}^N)} \leq \sqrt{1 + \frac{c^2}{4}}.$$

La démarche d'A. Farina pour établir ce théorème, qui ressort de l'analyse elliptique de l'équation (OPc), est une étape importante dans l'analyse du problème de minimisation de l'énergie E à moment scalaire fixé que nous détaillerons au Paragraphe I.2.1.

Soulignons, pour conclure, que d'autres propriétés qualitatives des ondes progressives pour l'équation de Gross-Pitaevskii, ainsi que pour des modèles proches (équations avec potentiel ou système couplé de deux équations), sont connues. Nous préciserons l'étude de leur limite transsonique en dimension deux au Paragraphe I.2.2, tandis que nous décrirons l'analyse de leur stabilité orbitale au Paragraphe I.2.3. Pour d'autres aspects qualitatifs des solutions de ces équations, nous renvoyons à l'article de revue [12].

I.1.3 Quelques régimes asymptotiques pour l'équation de Gross-Pitaevskii

L'analyse de l'équation de Gross-Pitaevskii ne se limite pas à l'étude des ondes progressives. Un autre aspect concerne les liens avec d'autres équations aux dérivées partielles, telles que les équations d'Euler, des ondes libres, de Korteweg-de Vries, ou encore de Kadomtsev-Petviashvili (KP1). Toutes ces équations apparaissent comme équations limites dans différents régimes asymptotiques liés à la forme hydrodynamique de l'équation de Gross-Pitaevskii. Rappelons que cette forme régit l'évolution des fonctions ρ et $v = 2\nabla\varphi$, associées à une solution $\Psi \equiv \sqrt{\rho} \exp i\varphi$ de l'équation de Gross-Pitaevskii qui ne s'annule pas. Les régimes asymptotiques qui nous intéressent, apparaissent lorsque sont introduites de nouvelles variables a_ε et v_ε , données par des changements d'échelles de la forme

$$\begin{cases} \rho(x, t) = 1 + \varepsilon^j a_\varepsilon(\varepsilon x, \varepsilon t), \\ v(x, t) = \varepsilon^j v_\varepsilon(x, t), \end{cases} \quad (\text{I.4})$$

où j est un entier compris entre 0 et 2, et lorsque l'on s'intéresse aux équations satisfaites par ces variables à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$. Le cas $j = 0$ est celui de la limite semi-classique vers l'équation d'Euler incompressible. Le cas $j = 1$ correspond au régime ondes longues vers l'équation des ondes libres. Enfin, le cas $j = 2$ coïncide, avec le régime ondes longues vers l'équation de Korteweg-de Vries en dimension un, de Kadomtsev-Petviashvili (KP1) en dimension supérieure ou égale à deux.

a. Le régime semi-classique vers l'équation d'Euler incompressible

Pour $j = 0$, l'introduction du changement d'échelles (I.4) revient à considérer l'équation de Gross-Pitaevskii sous la forme d'une équation de Schrödinger non linéaire semi-classique,

$$ih\partial_t\Psi_h + \frac{h^2}{2}\Delta\Psi_h + \Psi_h f(|\Psi_h|^2) = 0. \quad (\text{I.5})$$

Le paramètre semi-classique h joue le rôle auparavant dévolu au paramètre ε . La fonction Ψ_h est définie à partir d'une solution Ψ de l'équation de Gross-Pitaevskii par l'expression

$$\Psi_h(x, t) \equiv \Psi\left(\frac{\sqrt{2}x}{h}, \frac{t}{h}\right).$$

La fonction f est donnée par $f(u) \equiv 1 - u$ dans le cas de l'équation de Gross-Pitaevskii.

L'analyse du régime semi-classique tâche de décrire les solutions Ψ_h associées aux données initiales

$$\Psi_h^0 \equiv a_h^0 \exp\frac{i\varphi^0}{h},$$

lorsque $h \rightarrow 0$. À la suite de travaux de P. Gérard [56] dans le cas analytique, et de S. Jin, C.D. Levermore et D.W. Mc Laughlin [88] en dimension un, E. Grenier [69] a décrit le régime semi-classique des équations de Schrödinger non linéaires, avec donnée nulle à l'infini, lorsque la fonction f est de classe C^∞ sur \mathbb{R}_+ . Son analyse concerne des données initiales φ^0 et a_h^0 dans les espaces $H^s(\mathbb{R}^N)$, pour s assez grand.⁴ Les fonctions a_h^0 sont supposées bornées de manière indépendante de h , au moins pour h suffisamment petit. La première étape de l'analyse procure l'existence d'un temps strictement positif T , indépendant de h , tel que le problème de Cauchy pour les données initiales Ψ_h^0 possède des solutions Ψ_h de la forme $\Psi_h = a_h \exp i\varphi_h/h$ sur l'intervalle $[0, T]$. Les fonctions a_h et φ_h sont construites comme les solutions du système

$$\begin{cases} \partial_t a_h + \nabla\varphi_h \cdot \nabla a_h + \frac{1}{2}a_h \Delta\varphi_h = \frac{ih}{2}\Delta a_h, \\ \partial_t \varphi_h + \frac{|\nabla\varphi_h|^2}{2} + f(|a_h|^2) = 0, \end{cases}$$

de sorte que les fonctions $\rho_h \equiv |a_h|^2$ et $v_h \equiv \nabla\varphi_h + h\text{Im}(\overline{a_h}\nabla a_h)/\rho_h$ satisfont

$$\begin{cases} \partial_t \rho_h + \text{div}(\rho_h v_h) = 0, \\ \partial_t v_h + (v_h \cdot \nabla)v_h + f'(\rho_h)\nabla\rho_h = \frac{h^2}{2}\nabla\left(\frac{\Delta\sqrt{\rho_h}}{\sqrt{\rho_h}}\right). \end{cases} \quad (\text{I.6})$$

À la limite formelle $h \rightarrow 0$, le système (I.6) n'est rien moins que l'équation d'Euler incompressible de pression $p(\rho) \equiv f(\rho)$,

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \text{div}(\rho v) = 0, \\ \partial_t v + (v \cdot \nabla)v + f'(\rho)\nabla\rho = 0. \end{cases} \quad (\text{I.7})$$

Ce système correspond au membre droit de la forme hydrodynamique (7) dans le cas de l'équation de Gross-Pitaevskii.

La seconde étape concerne le passage à la limite $h \rightarrow 0$ dans le système (I.6). En pratique, il faut supposer que les données initiales a_h^0 convergent vers une fonction a_0 dans l'espace $H^s(\mathbb{R}^N)$ lorsque $h \rightarrow 0$, et que le système (I.7) possède une solution (ρ, v) de donnée initiale $(\rho^0 \equiv |a_0|^2, v^0 \equiv \nabla\varphi^0)$ sur l'intervalle de temps $[0, T]$. Sous ces hypothèses, les fonctions $\rho_h v_h$ convergent vers la fonction ρv dans l'espace $H^s(\mathbb{R}^N)$ quand $h \rightarrow 0$. En fait, E. Grenier va plus loin que

4. Pour obtenir le résultat démontré par E. Grenier [69], il est nécessaire de supposer que $s \geq N/2 + 2$.

cette simple convergence puisqu'il justifie une approximation de type WKB⁵ de l'équation de Schrödinger semi-classique (I.5). Lorsque la donnée initiale a_h^0 se développe sous la forme

$$a_h^0 \equiv \sum_{k=1}^K a_k^0 h^k + o_{h \rightarrow 0}(h^K),$$

les solutions $a_h \exp i\varphi_h/h$ de l'équation (I.5) s'écrivent sous la forme similaire

$$a_h \exp i\frac{\varphi_h}{h} = \sum_{k=1}^K a_k \exp i\frac{\varphi}{h} + o_{h \rightarrow 0}(h^K). \quad (\text{I.8})$$

Les fonctions a_0, \dots, a_K et φ sont solutions d'une hiérarchie d'équations aux dérivées partielles obtenues de manière formelle en introduisant le développement (I.8) dans l'équation (I.5).

T. Alazard et R. Carles [2] ont étendu cette description à l'équation de Gross-Pitaevskii. Leur contribution peut s'énoncer ainsi.

Théorème ([2]). *Soit $(a_0, a_1, \nabla\varphi_0) \in Z^\infty(\mathbb{R}^N)^3 \equiv (\bigcap_{s \in \mathbb{N}} Z^s(\mathbb{R}^N))^3$. On considère une famille de données initiales $(a_h^0)_{0 < h < 1}$ dans $Z^\infty(\mathbb{R}^N)$ telle que*

$$\|a_h^0 - a_0 - ha_1\|_{Z^s(\mathbb{R}^N)} = o_{h \rightarrow 0}(h),$$

quelque soit l'entier $s \geq 1$, et on note $\Psi_h^0 = a_h^0 \exp i\varphi_0/h$. Il existe alors un nombre strictement positif T , indépendant de h , tel qu'il existe une unique solution $\Psi_h \in C_b^\infty(\mathbb{R}^N \times [0, T])$ de l'équation de Gross-Pitaevskii pour la donnée initiale Ψ_h^0 , et des fonctions $(\mathbf{a}_0, \mathbf{a}_1, \phi_0, \phi_1) \in (C^\infty(\mathbb{R}^N \times [0, T]) \times L^\infty(\mathbb{R}^N \times [0, T]))^2$, qui vérifient

$$\limsup_{h \rightarrow 0} \left\| \Psi_h - \mathbf{a}_0 \exp i\frac{\phi_0 + h\phi_1}{h} \right\|_{L^\infty(\mathbb{R}^N \times [0, T])} = 0.$$

Les fonctions $\mathbf{a}_0, \mathbf{a}_1, \phi_0$ et ϕ_1 sont continues sur $[0, T]$, à valeurs dans $Z^s(\mathbb{R}^N)$, pour chaque entier $s > N/2 + 2$. Elles sont solutions des équations

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{a}_0 + \nabla\phi_0 \cdot \nabla \mathbf{a}_0 + \frac{1}{2} \mathbf{a}_0 \Delta \phi_0 = 0, \\ \partial_t \phi_0 + \frac{|\nabla\phi_0|^2}{2} + |\mathbf{a}_0|^2 - 1 = 0, \end{cases}$$

et

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{a}_1 + \nabla\phi_0 \cdot \nabla \mathbf{a}_1 + \nabla\phi_1 \cdot \nabla \mathbf{a}_0 + \frac{1}{2} \mathbf{a}_1 \Delta \phi_0 + \frac{1}{2} \mathbf{a}_0 \Delta \phi_1 = \frac{i}{2} \Delta \mathbf{a}_0, \\ \partial_t \phi_1 + \nabla\phi_0 \cdot \nabla \phi_1 + 2\text{Re}(\overline{\mathbf{a}_0} \mathbf{a}_1) = 0, \end{cases}$$

pour les données initiales (a_0, φ_0) , respectivement $(a_1, 0)$.

Remarque. Cet énoncé ne rend compte que pour partie des résultats démontrés par T. Alazard et R. Carles [2], lesquels s'étendent aux équations de Schrödinger non linéaires, avec donnée non nulle à l'infini, qui présentent des potentiels de type quadratiques, ainsi que des non-linéarités cubiques ou quintiques.

Il apparaît donc nécessaire de connaître la donnée initiale $\Psi_h^0 = a_h^0 \exp i\varphi_0/h$ jusqu'à l'ordre un pour justifier une convergence à l'ordre 0 de la solution Ψ_h de donnée initiale Ψ_h^0 . À la suite de travaux de P. Zhang [141] en dimension trois, et de F. Lin et P. Zhang [105] dans le cas d'un domaine extérieur en dimension deux, T. Alazard et R. Carles [2] ont prouvé que cette difficulté disparaît dès lors que l'on considère les variables hydrodynamiques ρ_h et v_h au lieu de la variable complexe Ψ_h .

5. Les lettres WKB font référence aux travaux pionniers de L. Brillouin [26], H.A. Kramers [96] et G. Wentzel [138].

Théorème ([2]). Soit $(a_0, \nabla\varphi_0) \in Z^\infty(\mathbb{R}^N)^2$. On considère une famille de données initiales $(a_h^0)_{0 < h < 1}$ dans $Z^\infty(\mathbb{R}^N)$ telle que

$$\|a_h^0 - a_0\|_{Z^s(\mathbb{R}^N)} \rightarrow 0,$$

lorsque $h \rightarrow 0$, pour un entier $s > N/2 + 2$, et on note $\Psi_h^0 = a_h^0 \exp i\varphi_0/h$. Il existe alors un nombre strictement positif T , indépendant de h , tel qu'il existe une unique solution $\Psi_h \in C_b^\infty(\mathbb{R}^N \times [0, T])$ de l'équation de Gross-Pitaevskii pour la donnée initiale Ψ_h^0 , et des solutions $(\rho, v) \in C_b^\infty(\mathbb{R}^N \times [0, T])^2$ de l'équation d'Euler (I.7) pour les données initiales $(|a_0|^2, \nabla\varphi_0)$, et la non-linéarité $f(x) = x - 1$, telles que

$$\left\| |\Psi_h|^2 - \rho \right\|_{L^\infty([0, T], Z^s(\mathbb{R}^N))} + \left\| \text{Im}(h\overline{\Psi}_h \nabla \Psi_h) - \rho v \right\|_{L^\infty([0, T], Z^s(\mathbb{R}^N))} \rightarrow 0,$$

lorsque $h \rightarrow 0$.

Remarquons pour terminer que ces résultats s'étendent à des non-linéarités plus générales. Nous renvoyons, par exemple, au travail de D. Chiron et F. Rousset [35], ainsi qu'à l'ouvrage de R. Carles [27], pour de plus amples détails.

b. Le régime ondes longues vers l'équation des ondes libres

Pour $k = 1$, le changement d'échelles (I.4) conduit au régime ondes longues vers l'équation des ondes libres que nous avons déjà évoqué en introduction. F. Béthuel, R. Danchin et D. Smets [11] l'ont analysé de manière détaillée en dimension quelconque.

Afin d'obtenir une forme plus symétrique de l'équation des ondes libres, ils ont considéré le changement d'échelles alternatif

$$\begin{cases} \rho(x, t) = 1 + \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} a_\varepsilon(\varepsilon x, \varepsilon t), \\ v(x, t) = \varepsilon v_\varepsilon(\varepsilon x, \varepsilon t). \end{cases} \quad (\text{I.9})$$

Dans cette expression, les fonctions ρ et v sont, comme avant, reliées aux solutions Ψ de l'équation de Gross-Pitaevskii par la transformation de Madelung $\Psi \equiv \sqrt{\rho} \exp i\varphi$, et la formule $v = 2\nabla\varphi$. Soulignons que les solutions Ψ ne s'annulent pas dans le régime ondes longues que nous considérons ici. Il est par conséquent légitime de considérer leur transformation de Madelung.

Les fonctions a_ε et v_ε sont solutions du système d'équations aux dérivées partielles

$$\begin{cases} \partial_\tau a_\varepsilon + \sqrt{2} \text{div}(v_\varepsilon) = -\varepsilon \text{div}(a_\varepsilon v_\varepsilon), \\ \partial_\tau v_\varepsilon + \sqrt{2} \nabla a_\varepsilon = \varepsilon \left(-\frac{1}{2} \nabla |v_\varepsilon|^2 + 2 \nabla \left(\frac{\Delta \sqrt{\sqrt{2} + \varepsilon a_\varepsilon}}{\sqrt{\sqrt{2} + \varepsilon a_\varepsilon}} \right) \right), \end{cases} \quad (\text{I.10})$$

où τ fait référence à la variable lente εt . À la limite $\varepsilon \rightarrow 0$, les solutions a_ε et v_ε de ce système se comportent, au moins formellement, comme des solutions \mathbf{a} et \mathbf{v} de l'équation des ondes libres

$$\begin{cases} \partial_\tau \mathbf{a} + \sqrt{2} \text{div}(\mathbf{v}) = 0, \\ \partial_\tau \mathbf{v} + \sqrt{2} \nabla \mathbf{a} = 0. \end{cases} \quad (\text{I.11})$$

La justification de cette affirmation commence par la preuve que le système (I.10) possède des solutions pour tout couple de données initiales $(a_\varepsilon^0, v_\varepsilon^0)$ dans des espaces de Sobolev $H^s(\mathbb{R}^N)$ adaptés. Il convient également de contrôler leur temps maximal d'existence T_ε pour ε petit, sans quoi il ne sera pas envisageable de passer à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$. Dans cette direction, F. Béthuel, R. Danchin et D. Smets ont obtenu le théorème suivant.

Théorème ([11]). *Soit $s > 1 + \frac{N}{2}$, et $(a_\varepsilon^0, v_\varepsilon^0) \in H^{s+1}(\mathbb{R}^N) \times H^s(\mathbb{R}^N)$ telles que $\rho_\varepsilon^0 \equiv 1 + \varepsilon a_\varepsilon^0(\varepsilon \cdot) / \sqrt{2} \geq \frac{1}{2}$. Il existe une constante strictement positive K , qui ne dépend que de s et N , et un nombre strictement positif T_ε , minoré par*

$$T_\varepsilon \geq \frac{1}{K\varepsilon(\|a_\varepsilon^0\|_{H^{s+1}(\mathbb{R}^N)} + \|v_\varepsilon^0\|_{H^s(\mathbb{R}^N)})}, \quad (\text{I.12})$$

tels qu'il existe un unique couple $(a_\varepsilon, v_\varepsilon) \in \mathcal{C}^0([0, T_\varepsilon], H^{s+1}(\mathbb{R}^N) \times H^s(\mathbb{R}^N))$ de solutions du système (I.10) pour les données initiales a_ε^0 et v_ε^0 . Les fonctions a_ε et v_ε satisfont

$$\|a_\varepsilon(\cdot, \tau)\|_{H^{s+1}(\mathbb{R}^N)} + \|v_\varepsilon(\cdot, \tau)\|_{H^s(\mathbb{R}^N)} \leq K(\|a_\varepsilon^0\|_{H^{s+1}(\mathbb{R}^N)} + \|v_\varepsilon^0\|_{H^s(\mathbb{R}^N)}). \quad (\text{I.13})$$

La borne (I.13) joue non seulement un rôle crucial dans l'analyse du régime ondes longues vers l'équation des ondes libres, mais elle intervient aussi dans celle du régime ondes longues vers l'équation de Korteweg-de Vries. C'est la raison qui nous amène ici à donner quelques éléments de sa preuve, qui repose sur une méthode d'énergie.

La première étape consiste à écrire le système (I.10) sous une forme qui facilite l'application d'une telle méthode. En s'inspirant des idées développées par S. Benzoni-Gavage, R. Danchin et S. Descombes [9], F. Béthuel, R. Danchin et D. Smets ont, dans ce but, ajouté une équation supplémentaire au système (I.10). Au lieu de se limiter à la forme hydrodynamique (7) pour les seules variables ρ et v , leur analyse porte sur les équations satisfaites par la variable ρ , et une nouvelle variable complexe $z \equiv -2i\nabla\Psi/\Psi$, dont la partie réelle n'est rien d'autre que v . L'équation supplémentaire provient de la partie imaginaire de z , soit de la quantité $-\nabla\rho/\rho$. Pour les variables b_ε et z_ε , convenablement mises à l'échelle à travers les formules

$$\begin{cases} \rho(x, t) = 1 + \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} b_\varepsilon(\varepsilon x, \varepsilon^2 t), \\ z(x, t) = \varepsilon z_\varepsilon(\varepsilon x, \varepsilon t), \end{cases} \quad (\text{I.14})$$

ces équations s'écrivent

$$\begin{cases} \partial_t b_\varepsilon + \frac{\sqrt{2}}{\varepsilon} \operatorname{div}(\operatorname{Re}(z_\varepsilon)) = -\operatorname{div}(b_\varepsilon \operatorname{Re}(z_\varepsilon)), \\ \partial_t z_\varepsilon + \frac{\sqrt{2}}{\varepsilon} \nabla b_\varepsilon = i\Delta z_\varepsilon - \frac{1}{2} \nabla z_\varepsilon^2. \end{cases}$$

Sont ensuite introduites les quantités $\Gamma^k(b_\varepsilon, z_\varepsilon)$ définies par

$$\forall k \in \mathbb{N}, \Gamma^k(b_\varepsilon, z_\varepsilon) \equiv \|d^k b_\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R}^N)}^2 + \left\| \left(1 + \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} b_\varepsilon\right) d^k z_\varepsilon \right\|_{L^2(\mathbb{R}^N)}^2. \quad (\text{I.15})$$

Dans cette expression, la notation $d^k f$ désigne la différentielle d'ordre k de la fonction f considérée. À une constante près, la quantité $\Gamma^0(b_\varepsilon, z_\varepsilon)$ est l'énergie de Ginzburg-Landau de la fonction Ψ construite à partir des variables b_ε et z_ε . Cette quantité vaut en effet

$$\Gamma^0(b_\varepsilon, z_\varepsilon) = 8\varepsilon^{2-N} E(\Psi).$$

C'est cette relation qui suggère l'introduction des quantités $\Gamma^k(b_\varepsilon, z_\varepsilon)$. Les normes L^2 avec un poids $1 + \varepsilon b_\varepsilon/2$, comme indiqué par la formule (I.15), respectent mieux la structure hamiltonienne de l'équation de Gross-Pitaevskii que ne le feraient des normes L^2 sans poids. Elles se prêtent mieux à l'application d'arguments d'énergie, lesquels conduisent au résultat suivant.

Proposition ([11]). *Soit $\varepsilon > 0$, $T > 0$, et $k \in \mathbb{N}$ tel que $k \geq 1 + N/2$. On considère une solution Ψ de l'équation de Gross-Pitaevskii sur l'intervalle de temps $[0, T]$ telle que*

$$I \equiv \inf_{(x,t) \in \mathbb{R}^N \times [0,T]} |\Psi(t, x)| > 0,$$

et on suppose que les fonctions b_ε et z_ε , définies à partir de la fonction Ψ par la formule (I.14), appartiennent à l'espace $\mathcal{C}^0([0, T], H^{k+1}(\mathbb{R}^N))$. Il existe alors une constante positive K , qui ne dépend que de k , I et N , telle que, pour tout entier $0 \leq j \leq k$,

$$\frac{d}{dt} \Gamma^j(b_\varepsilon, z_\varepsilon) \leq K(1 + \varepsilon \|b_\varepsilon\|_{L^\infty(\mathbb{R}^N)}) (\|\nabla b_\varepsilon\|_{L^\infty(\mathbb{R}^N)} + \|\nabla z_\varepsilon\|_{L^\infty(\mathbb{R}^N)}) \left(\Gamma^j(b_\varepsilon, z_\varepsilon) + \Gamma^0(b_\varepsilon, z_\varepsilon) \right). \quad (\text{I.16})$$

Grâce aux théorèmes d'injection de Sobolev, l'inégalité (I.16) permet de contrôler les quantités $\Gamma^k(b_\varepsilon, z_\varepsilon)$. Par la formule (I.15), ces quantités contrôlent à leur tour les normes H^k des fonctions b_ε et z_ε , et par suite, les normes H^k des fonctions a_ε et v_ε . Comme l'énoncent les formules (I.12) et (I.13), ce contrôle est valable sur des temps de l'ordre de $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$, lorsque les données initiales a_ε^0 et v_ε^0 sont bornées uniformément par rapport au petit paramètre ε dans les espaces $H^s(\mathbb{R}^N)$.

En dimension supérieure ou égale à deux, le temps T_ε de la formule (I.12) n'est pas optimal. Les propriétés dispersives de l'équation de Gross-Pitaevskii améliorent les temps maximaux jusqu'auxquels les estimations (I.13) demeurent valables.

Théorème ([11]). *Soit $s > 2 + \frac{N}{2}$, et $(a_\varepsilon^0, v_\varepsilon^0) \in H^{s+1}(\mathbb{R}^N) \times H^s(\mathbb{R}^N)$ telles que $\rho_\varepsilon^0 \equiv 1 + \varepsilon a_\varepsilon^0(\cdot)/\sqrt{2} \geq 1/2$. Le temps maximal d'existence T_ε des solutions $(a_\varepsilon, v_\varepsilon)$ du système (I.10) pour les données initiales a_ε^0 et v_ε^0 , vérifie*

$$T_\varepsilon \geq \frac{K}{\varepsilon^2 (\|a_\varepsilon^0\|_{H^{s+1}(\mathbb{R}^N)} + \|v_\varepsilon^0\|_{H^s(\mathbb{R}^N)})^2}, \quad \text{si } N \geq 4,$$

$$T_\varepsilon \geq \min \left\{ \frac{K_\alpha}{\varepsilon^{1+\alpha} (\|a_\varepsilon^0\|_{H^{s+1}(\mathbb{R}^N)} + \|v_\varepsilon^0\|_{H^s(\mathbb{R}^N)})^{1+\alpha}}, \frac{K}{\varepsilon^3 (\|a_\varepsilon^0\|_{H^{s+1}(\mathbb{R}^N)} + \|v_\varepsilon^0\|_{H^s(\mathbb{R}^N)})^2} \right\},$$

si $N = 3$ et $0 < \alpha < 1$, et pour $N = 2$ et $2/(s-2) < \alpha < 2$,

$$T_\varepsilon \geq \min \left\{ \frac{K_\alpha}{\varepsilon^{1+\alpha} (\|a_\varepsilon^0\|_{H^{s+1}(\mathbb{R}^N)} + \|v_\varepsilon^0\|_{H^s(\mathbb{R}^N)})^\alpha}, \frac{K}{\varepsilon^{\frac{4}{3}} (\|a_\varepsilon^0\|_{H^{s+1}(\mathbb{R}^N)} + \|v_\varepsilon^0\|_{H^s(\mathbb{R}^N)})^{\frac{4}{3}}} \right\},$$

où les constantes K et K_α ne dépendent que de N et s , respectivement, N , s et α .

Les bornes (I.13) permettent de passer à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ dans le système (I.10), et d'obtenir l'approximation par l'équation des ondes libres (I.11). Elles contrôlent en effet les termes non-linéaires qui apparaissent au second membre du système (I.10). Ce contrôle n'est en fait possible qu'avec une perte de trois dérivées, puisque des dérivées d'ordre trois de la fonction a_ε apparaissent au second membre de la seconde équation du système (I.10). À nouveau par une méthode d'énergie, F. Béthuel, R. Danchin et D. Smets ont mis en oeuvre cet argument afin d'obtenir le théorème suivant.

Théorème ([11]). *Soit $s > 1 + \frac{N}{2}$, et $(a_\varepsilon^0, v_\varepsilon^0) \in H^{s+1}(\mathbb{R}^N) \times H^s(\mathbb{R}^N)$ telles que $\rho_\varepsilon^0 \equiv 1 + \varepsilon a_\varepsilon^0(\cdot)/\sqrt{2} \geq 1/2$. On note (\mathbf{a}, \mathbf{v}) , l'unique couple de solutions de l'équation des ondes libres (I.11) pour les données initiales a_ε^0 et v_ε^0 , et T_ε , le temps maximal d'existence des solutions $(a_\varepsilon, v_\varepsilon)$ du système (I.10) pour les données initiales a_ε^0 et v_ε^0 . Il existe alors une constante positive K , qui ne dépend que de s et N , telle que*

$$\forall \tau \in [0, T_\varepsilon], \|a_\varepsilon(\cdot, \tau) - \mathbf{a}(\cdot, \tau)\|_{H^{s-2}(\mathbb{R}^N)} + \|v_\varepsilon(\cdot, \tau) - \mathbf{v}(\cdot, \tau)\|_{H^{s-2}(\mathbb{R}^N)} \leq K \left(\varepsilon \tau (\|a_\varepsilon^0\|_{H^{s+1}(\mathbb{R}^N)}^2 + \|v_\varepsilon^0\|_{H^s(\mathbb{R}^N)}^2) + \varepsilon^2 \tau (\|a_\varepsilon^0\|_{H^{s+1}(\mathbb{R}^N)} + \|v_\varepsilon^0\|_{H^s(\mathbb{R}^N)}) \right). \quad (\text{I.17})$$

Remarque. Afin de pallier à la perte de dérivées qui découle de l'estimation des termes au second membre du système (I.10), il est possible d'interpoler les estimations (I.17) avec les bornes (I.13). Ceci implique la convergence des fonctions a_ε et v_ε vers les fonctions \mathbf{a} et \mathbf{v} dans tous les espaces $H^\sigma(\mathbb{R}^N)$ pour $\sigma < s$. Néanmoins, cet argument n'évite pas une perte sur le taux de convergence qui ne sera plus de l'ordre de ε , lorsque σ sera strictement supérieur à $s - 2$.

Lorsque la famille des données initiales a_ε^0 et v_ε^0 est bornée uniformément par rapport à ε dans un espace $H^s(\mathbb{R}^N)$, avec $s > 1 + N/2$, l'approximation par l'équation des ondes libres est valable jusqu'à des temps de l'ordre de $o(1/\varepsilon)$ dans la variable lente τ , soit de l'ordre de $o(1/\varepsilon^2)$ dans la variable originelle t . La taille des perturbations $\varepsilon a_\varepsilon$ et $\varepsilon v_\varepsilon$, qui est de l'ordre de ε à l'instant initial, reste de cet ordre au moins jusqu'au temps T_ε dans les variables lentes, soit, en dimension un, un temps de l'ordre de $\mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$ dans la variable originelle t . Il sera intéressant de comparer ces estimations avec celles obtenues dans le cas du régime ondes longues vers l'équation de Korteweg-de Vries que nous détaillerons au Paragraphe I.3.

En dimension supérieure, et pour $s > 2 + N/2$, le temps maximal T_ε sur lequel les estimations (I.17) sont valables est amélioré par les propriétés dispersives de l'équation de Gross-Pitaevskii jusqu'à atteindre des temps de l'ordre de $\mathcal{O}(1/\varepsilon^3)$ dans la variable originelle t . Par contre, elles ne changent rien à la taille de l'erreur entre les fonctions a_ε et v_ε , et les solutions de l'équation des ondes libres \mathbf{a} et \mathbf{v} , qui découle, quant à elle, de la taille ε des termes qui apparaissent au second membre de l'équation (I.10). L'approximation par l'équation des ondes libres de l'équation de Gross-Pitaevskii ne demeure valable que jusqu'à des temps de l'ordre de $o(1/\varepsilon^2)$ dans la variable originelle t , lorsque l'on a affaire à des perturbations de taille ε à l'instant initial.

c. Le régime ondes longues vers les équations de Korteweg-de Vries et de Kadomtsev-Petviashvili

Le cas où l'entier j du changement d'échelles (I.4) est égal à 2, correspond au régime ondes longues vers l'équation de Korteweg-de Vries en dimension un, de Kadomtsev-Petviashvili (KP1) en dimension supérieure ou égale à deux. Ces deux régimes ne sont pas propres à l'équation de Gross-Pitaevskii. D.J. Korteweg et G. de Vries [42] ont introduit l'équation de Korteweg-de Vries pour rendre compte de la propagation à la surface de l'eau d'un canal, d'ondes planes, essentiellement unidirectionnelles. Dans ce cadre, cette équation apparaît comme l'approximation ondes longues du modèle dit des water waves. W. Craig [38] a démontré rigoureusement la validité de cette approximation, avant que G. Schneider et C.E. Wayne [128] n'étende le résultat à l'approximation par deux équations de Korteweg-de Vries découplées, qui se propagent en direction opposée (voir aussi les travaux de J.L. Bona, T. Colin et D. Lannes [21] et de B. Alvarez-Samaniego et D. Lannes [3]). W. ben Youssef et T. Colin [7] ont par ailleurs mis en évidence l'apparition de ces approximations dans l'analyse ondes longues de certains systèmes hyperboliques.

Dans le cas de l'équation de Gross-Pitaevskii, E.A. Kuznetsov et V.E. Zakharov [139] se sont appuyés sur la méthode du scattering inverse pour faire le lien entre l'équation de Gross-Pitaevskii d'un côté, et les équations de Korteweg-de Vries et de Kadomtsev-Petviashvili (KP1) de l'autre. En dimension un, l'équation de Gross-Pitaevskii, comme l'équation de Korteweg-de Vries, est intégrable par les techniques du scattering inverse que nous présenterons plus en détails aux Paragraphes I.2.3 et I.3. Cette affirmation reste vraie pour l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1) en dimension deux. Ces propriétés d'intégrabilité sont un élément crucial dans la dérivation rigoureuse du régime ondes longues vers l'équation de Korteweg-de Vries que nous expliquerons au Paragraphe I.3.

Comme annoncée dans l'introduction, une manière alternative d'introduire ces deux régimes

est de revenir au régime ondes longues vers l'équation des ondes libres. En dimension un, les solutions \mathbf{a} et \mathbf{v} du système des ondes libres (I.11) sont données, explicitement en fonction des données initiales \mathbf{a}_0 et \mathbf{v}_0 , par les formules de d'Alembert

$$\begin{cases} \mathbf{a}(x, t) = \frac{1}{2} \left(\mathbf{a}_0(x - \sqrt{2}t) + \mathbf{v}_0(x - \sqrt{2}t) + \mathbf{a}_0(x + \sqrt{2}t) - \mathbf{v}_0(x + \sqrt{2}t) \right), \\ \mathbf{v}(x, t) = \frac{1}{2} \left(\mathbf{a}_0(x - \sqrt{2}t) + \mathbf{v}_0(x - \sqrt{2}t) - \mathbf{a}_0(x + \sqrt{2}t) + \mathbf{v}_0(x + \sqrt{2}t) \right). \end{cases}$$

Ces deux formules se déduisent du fait que les fonctions $\mathbf{u}_+ \equiv (\mathbf{a} + \mathbf{v})/2$ et $\mathbf{u}_- \equiv (\mathbf{a} - \mathbf{v})/2$ sont solutions des équations de transport à coefficients constants

$$\partial_t \mathbf{u}_\pm \pm \sqrt{2} \partial_x \mathbf{u}_\pm = 0.$$

Les solutions \mathbf{a} et \mathbf{v} se décomposent en deux fronts d'ondes, l'un \mathbf{u}_- , qui va vers la gauche à la vitesse $\sqrt{2}$, l'autre \mathbf{u}_+ , qui se propage vers la droite à la même vitesse $\sqrt{2}$. L'approximation ondes longues vers l'équation de Korteweg-de Vries apparaît lorsque l'on cherche à raffiner la description des deux fronts d'ondes \mathbf{u}_\pm . Dans la pratique, il suffit de se placer dans les repères fixes pour ces deux fronts d'ondes. Ceci revient à introduire les nouvelles variables N_ε et W_ε définies par la formule (10), pour le repère qui se déplace vers la gauche, puis à écrire les équations (11) et (12) qu'elles satisfont.

En dimension supérieure ou égale à deux, les solutions \mathbf{a} et \mathbf{v} de l'équation des ondes libres (I.11) ne sont plus données par les formules de d'Alembert. Néanmoins, l'équation (I.11) possède encore des solutions de type fronts d'ondes, qui se déplacent dans une direction fixée à la vitesse constante $\sqrt{2}$. Comme en dimension un, il est possible de préciser la description de ces fronts en se plaçant dans le repère mobile dans lequel ils sont stationnaires. Cette approche conduit à l'introduction de variables lentes de la forme

$$y_1 = \varepsilon(x_1 + \sqrt{2}t), \quad y_2 = \frac{\varepsilon^{\ell_2}}{\sqrt{2}}x_2, \quad \dots, \quad y_N = \frac{\varepsilon^{\ell_N}}{\sqrt{2}}x_N, \quad \text{et} \quad \tau = \frac{\varepsilon^3}{2\sqrt{2}}t, \quad (\text{I.18})$$

pour le repère qui se déplace vers la gauche à vitesse $\sqrt{2}$. Le choix des variables lentes transverses y_2, \dots, y_N , à travers les exposants entiers ℓ_2, \dots, ℓ_N , dépend de la manière dont sont prises en compte les interactions transverses qui apparaissent dans l'équation de Gross-Pitaevskii. Il est a priori possible d'obtenir des régimes asymptotiques différents, qui généralisent tous le régime ondes longues vers l'équation de Korteweg-de Vries. Pour obtenir le régime ondes longues vers l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1), il convient de poser

$$\ell_2 = \dots = \ell_N = 2.$$

L'intérêt pour ce régime trouve son origine dans le rôle joué par l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1) dans la limite transsonique des ondes progressives (voir le Paragraphe I.2.2). Sa dérivation passe par l'introduction des fonctions N_ε et Θ_ε définies par les changements d'échelles

$$\begin{cases} \rho(x, t) = 1 - \frac{\varepsilon^2}{6} N_\varepsilon(y, \tau), \\ \varphi(x, t) = \frac{\varepsilon}{6\sqrt{2}} \Theta_\varepsilon(y, \tau), \end{cases}$$

où les fonctions ρ et φ sont définies comme avant à travers la transformation de Madelung $\Psi = \sqrt{\rho} \exp i\varphi$. Les équations satisfaites par les fonctions N_ε et Θ_ε s'écrivent

$$\partial_1(N_\varepsilon - \partial_1 \Theta_\varepsilon) + \frac{\varepsilon^2}{2} \left(\frac{1}{2} \partial_\tau N_\varepsilon - \Delta_\perp \Theta_\varepsilon + \frac{1}{3} \partial_1(N_\varepsilon \partial_1 \Theta_\varepsilon) \right) + \frac{\varepsilon^4}{12} \operatorname{div}_\perp(N_\varepsilon \nabla_\perp \Theta_\varepsilon) = 0, \quad (\text{I.19})$$

et

$$\begin{aligned}
N_\varepsilon - \partial_1 \Theta_\varepsilon = & \frac{\varepsilon^2}{2} \left(\frac{1}{2} \partial_\tau \Theta_\varepsilon + \partial_1^2 N_\varepsilon + \frac{1}{6} (\partial_1 \Theta_\varepsilon)^2 \right) + \frac{\varepsilon^4}{4} \left(\frac{1}{6} |\nabla_\perp \Theta_\varepsilon|^2 + \frac{\Delta_\perp N_\varepsilon}{1 - \frac{\varepsilon^2}{6} N_\varepsilon} \right. \\
& \left. + \frac{(\partial_1 N_\varepsilon)^2}{6(1 - \frac{\varepsilon^2}{6} N_\varepsilon)^2} + \frac{N_\varepsilon \partial_1^2 N_\varepsilon}{3(1 - \frac{\varepsilon^2}{6} N_\varepsilon)} \right) + \frac{\varepsilon^6 |\nabla_\perp N_\varepsilon|^2}{48(1 - \frac{\varepsilon^2}{6} N_\varepsilon)^2}.
\end{aligned} \tag{I.20}$$

Les fronts d'ondes $U_\varepsilon \equiv (N_\varepsilon + \partial_1 \Theta_\varepsilon)/2$ et $V_\varepsilon \equiv (N_\varepsilon - \partial_1 \Theta_\varepsilon)/2$, qui se propagent vers la gauche, respectivement vers la droite, satisfont alors les équations

$$\begin{cases} \partial_\tau U_\varepsilon + \partial_1^3 U_\varepsilon - \Delta_\perp \partial_1^{-1} U_\varepsilon + U_\varepsilon \partial_1 U_\varepsilon = \partial_1 F_\varepsilon - \Delta_\perp \partial_1^{-1} V_\varepsilon - \frac{\varepsilon^2}{12} \left(\operatorname{div}_\perp (N_\varepsilon \nabla_\perp \Theta_\varepsilon) + R_\varepsilon \right), \\ \partial_\tau V_\varepsilon + \frac{8}{\varepsilon^2} \partial_1 V_\varepsilon = \partial_1 G_\varepsilon + \Delta_\perp \partial_1^{-1} U_\varepsilon - \Delta_\perp \partial_1^{-1} V_\varepsilon - \frac{\varepsilon^2}{12} \left(\operatorname{div}_\perp (N_\varepsilon \nabla_\perp \Theta_\varepsilon) - R_\varepsilon \right), \end{cases} \tag{I.21}$$

où

$$\begin{aligned}
F_\varepsilon &= \frac{1}{6} \left(V_\varepsilon^2 - 6 \partial_1^2 V_\varepsilon + 2 U_\varepsilon V_\varepsilon \right), \\
G_\varepsilon &= \frac{1}{6} \left(6 \partial_1^2 U_\varepsilon + 6 \partial_1^2 V_\varepsilon + 3 V_\varepsilon^2 - U_\varepsilon^2 - 2 U_\varepsilon V_\varepsilon \right),
\end{aligned}$$

et

$$R_\varepsilon \equiv \frac{1}{2} |\nabla_\perp \Theta_\varepsilon|^2 + 3 \frac{\Delta_\perp N_\varepsilon}{1 - \frac{\varepsilon^2}{6} N_\varepsilon} + \frac{(\partial_1 N_\varepsilon)^2}{2(1 - \frac{\varepsilon^2}{6} N_\varepsilon)^2} + \frac{N_\varepsilon \partial_1^2 N_\varepsilon}{1 - \frac{\varepsilon^2}{6} N_\varepsilon} + \frac{\varepsilon^6 |\nabla_\perp N_\varepsilon|^2}{4(1 - \frac{\varepsilon^2}{6} N_\varepsilon)^2}.$$

Le premier membre de la première équation du système (I.21) n'est rien d'autre que l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1) pour le front d'ondes U_ε . Quant au front d'ondes V_ε , il est régi au premier ordre par l'opérateur de transport $\partial_t + 8\varepsilon^{-2} \partial_1$, dont la vitesse devient infinie lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$. Dans cette limite, les quantités qui dépendent de V_ε , disparaissent au moins formellement du système (I.21), non parce que leur taille devient petite, comme c'est le cas pour les termes d'ordre ε^2 , mais parce qu'elles n'interagissent plus avec les termes qui ne dépendent que de U_ε . Cette propriété explique que les fonctions U_ε satisfassent l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1) à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$.

Simultanément à la justification de la limite ondes longues vers l'équation de Korteweg-de Vries que nous avons donnée dans [16, 17], et que nous détaillerons au Paragraphe I.3, D. Chiron et F. Rousset [36] ont justifié de manière rigoureuse la convergence des fonctions U_ε vers une solution \mathcal{U} de l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1). Leurs résultats demeurent valables en dimension un, donc corroborent la justification de la limite ondes longues vers l'équation de Korteweg-de Vries donnée dans [16, 17]. Comme pour le régime ondes longues vers l'équation des ondes libres, la justification commence par la construction de solutions N_ε et Θ_ε des équations (I.19) et (I.20) pour tout couple $(N_\varepsilon^0, \Theta_\varepsilon^0)$ de données initiales dans des espaces de Sobolev $H^s(\mathbb{R}^N)$ adaptés. Leur temps maximal d'existence T_ε doit également être contrôlé lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, ce qu'ont établi D. Chiron et F. Rousset à travers l'énoncé suivant.

Théorème ([36]). *Soit $N \geq 1$ et $s > 1 + N/2$. On considère une famille de données initiales N_ε^0 et Θ_ε^0 telles que*

$$M_s \equiv \sup_{0 < \varepsilon < 1} \left(\|N_\varepsilon^0\|_{H^{s+1}(\mathbb{R}^N)} + \|\partial_1 \Theta_\varepsilon^0\|_{H^{s+1}(\mathbb{R}^N)} + \varepsilon \|\nabla_\perp \Theta_\varepsilon^0\|_{H^{s+1}(\mathbb{R}^N)} \right) < +\infty. \tag{I.22}$$

Il existe deux nombres strictement positifs ε_0 et T , qui dépendent de M_s , tels que les équations (I.19) et (I.20) possèdent un unique couple de solutions $(N_\varepsilon, \Theta_\varepsilon) \in \mathcal{C}^0([0, T], H^{s+1}(\mathbb{R}^N)) \times \mathcal{C}^0([0, T], \dot{H}^{s+1}(\mathbb{R}^N))$ pour les données initiales N_ε^0 et Θ_ε^0 . Ces solutions satisfont l'inégalité

$$\sup_{0 < \varepsilon < 1} \left(\sup_{t \in [0, T]} \left(\|N_\varepsilon(\cdot, t)\|_{H^{s+1}(\mathbb{R}^N)} + \|\partial_1 \Theta_\varepsilon(\cdot, t)\|_{H^s(\mathbb{R}^N)} + \varepsilon \|\nabla_\perp \Theta_\varepsilon(\cdot, t)\|_{H^s(\mathbb{R}^N)} \right) \right) < +\infty. \tag{I.23}$$

Remarque. En dimension un, les solutions N_ε et Θ_ε sont définies de manière globale sur \mathbb{R} , et pas seulement sur des intervalles de temps bornés. L'estimation (I.23) n'est par contre valable que sur un intervalle de temps borné (voir le Théorème I.7 pour plus de précisions).

Comme l'énoncé équivalent de F. Béthuel, R. Danchin et D. Smets [11] dans le cas du régime ondes longues vers l'équation des ondes libres, la preuve de ce théorème repose sur une symétrisation du système formé par les équations (I.19) et (I.20), et l'application de méthodes d'énergie au système hyperbolique ainsi obtenu. Par contre, l'argument invoqué par D. Chiron et F. Rousset pour justifier que les fonctions U_ε vérifient bien l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1) à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$, diffère des arguments d'énergie de F. Béthuel, R. Danchin et D. Smets pour estimer les termes d'erreurs dans le cas de l'équation des ondes libres. Leur preuve repose en effet sur des arguments de compacité qui conduisent au résultat suivant.

Théorème ([36]). *Soit $N \geq 1$ et $s > 1 + N/2$. Étant données deux fonctions $N^0 \in L^2(\mathbb{R}^N)$ et $\Theta^0 \in \dot{H}^1(\mathbb{R}^N)$, on considère une famille de données initiales N_ε^0 et Θ_ε^0 , qui vérifient la condition (I.22), et telles que*

$$N_\varepsilon^0 \rightarrow N^0, \quad \partial_1 \Theta_\varepsilon^0 \rightarrow \partial_1 \Theta^0, \quad \text{et } \varepsilon \nabla_\perp \Theta_\varepsilon \rightarrow 0 \text{ dans } L^2(\mathbb{R}^N),$$

lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, et on note \mathcal{U} , la solution de l'équation de Korteweg-de Vries, si $N = 1$, de Kadomtsev-Petviashvili (KP1), sinon, de donnée initiale $U^0 \equiv (N^0 + \partial_1 \Theta^0)/2$. Les solutions N_ε et $\partial_1 \Theta_\varepsilon$ des équations (I.19) et (I.20), dont l'existence et l'unicité sont garanties par le théorème précédent, convergent faiblement vers la fonction \mathcal{U} dans l'espace $L^2([0, T] \times \mathbb{R}^N)$. De plus,

$$\forall 0 \leq \sigma < s, \quad U_\varepsilon \rightarrow \mathcal{U} \text{ dans } L^2([0, T], H^\sigma(\mathbb{R}^N)),$$

lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$.

Remarque. Sous les hypothèses de l'énoncé précédent, les fonctions N^0 et $\partial_1 \Theta^0$ appartiennent à l'espace $H^{s+1}(\mathbb{R}^N)$. Ceci découle du fait que les fonctions N_ε^0 et $\partial_1 \Theta_\varepsilon^0$, qui convergent dans $L^2(\mathbb{R}^N)$ vers N^0 , respectivement $\partial_1 \Theta^0$, lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, sont uniformément bornées par rapport au paramètre ε dans l'espace $H^{s+1}(\mathbb{R}^N)$ par la condition (I.22).

Remarque. L'équation de Korteweg-de Vries est bien posée globalement dans tous les espaces $H^s(\mathbb{R})$ pour $s \geq 0$. Cette affirmation résulte des travaux de J.L. Bona et R. Smith [24] pour $s \geq 2$, de C.E. Kenig, G. Ponce et L. Vega [94] pour $s \geq 1$, et de J. Bourgain [25] pour $s \geq 0$ (voir aussi la construction par T. Kato [93] de solutions globales dans $L^2(\mathbb{R})$ et $H^1(\mathbb{R})$). En particulier, la solution \mathcal{U} de l'énoncé précédent est définie de manière globale sur $\mathbb{R} \times \mathbb{R}$.

Remarque. En dimension supérieure ou égale à deux, l'existence locale et l'unicité de la solution \mathcal{U} de l'énoncé précédent est une conséquence des travaux de S. Ukai [133], lorsque U^0 appartient comme ici à des espaces $H^\sigma(\mathbb{R}^N)$ avec $\sigma > 1 + N/2$. Le caractère bien posé du problème de Cauchy associé à l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1) ne nécessite cependant pas autant de régularité. En dimension deux, A.D. Ionescu, C.E. Kenig et D. Tataru [85] ont établi que ce problème de Cauchy est bien posé globalement dans l'espace $H^1(\mathbb{R}^2)$, après un résultat équivalent dû à L. Molinet, J.-C. Saut et N. Tzvetkov [121] dans l'espace $H^2(\mathbb{R}^2)$. En dimension trois, Y. Liu [110] a prouvé qu'il restait bien posé localement dans l'espace $H^1(\mathbb{R}^3)$, mais que pouvaient apparaître des phénomènes d'explosion en temps fini. Le fait que la solution \mathcal{U} ne soit pas, a priori, définie globalement n'est pas une difficulté. La preuve du théorème précédent garantit l'existence de la solution \mathcal{U} jusqu'au temps T où l'approximation cesse d'être valable.

Les convergences ne sont pas ici locales en temps comme c'était le cas pour l'approximation par l'équation des ondes libres. Ceci tient à la difficulté de prendre en compte de manière quantitative,

la disparition par transport à vitesse infinie, des quantités qui dépendent de la variable V_ε . Cette disparition s'observe plus facilement sous forme intégrale, que ponctuelle, ce qui amène à considérer des convergences dans des espaces du type $L^2([0, T], H^\sigma(\mathbb{R}^N))$. Nous reviendrons sur cette difficulté au Paragraphe I.3.

Une façon de contourner ce problème consiste à préparer de manière appropriée les données initiales N_ε^0 et Θ_ε^0 . Comme la variable V_ε est pour l'essentiel transportée au cours de l'évolution, si sa valeur initiale $V_\varepsilon^0 \equiv (N_\varepsilon^0 - \partial_1 \Theta_\varepsilon^0)/2$ est petite, sa valeur à l'instant t ne pourra être très grande. Cette remarque conduit au résultat suivant dans le cas de données bien préparées.

Théorème ([36]). *Sous les hypothèses des théorèmes précédents, si de plus les données initiales N_ε^0 et Θ_ε^0 vérifient*

$$\|N_\varepsilon^0 - \partial_1 \Theta_\varepsilon^0\|_{L^2(\mathbb{R})} \rightarrow 0,$$

lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$ en dimension un, et

$$\|N_\varepsilon^0 - \partial_1 \Theta_\varepsilon^0\|_{L^2(\mathbb{R})} + \varepsilon \|\nabla_\perp \Theta_\varepsilon^0\|_{L^2(\mathbb{R})} = \mathcal{O}_{\varepsilon \rightarrow 0}(\varepsilon),$$

en dimension supérieure ou égale à deux, alors,

$$\forall 0 \leq \sigma < s, N_\varepsilon \rightarrow \mathcal{U}, \text{ et } \partial_1 \Theta_\varepsilon \rightarrow \mathcal{U} \text{ dans } \mathcal{C}^0([0, T], H^\sigma(\mathbb{R}^N)),$$

lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$. De plus, en dimension supérieure ou égale à deux,

$$\sup_{0 < \varepsilon < \varepsilon_0} \left(\sup_{\tau \in [0, T]} \int_{\mathbb{R}^N} |\nabla_\perp \Theta_\varepsilon(y, \tau)|^2 dy \right) < +\infty.$$

Dans le cas de données bien préparées, les convergences sont uniformes en temps. Dans les variables lentes, elles ont lieu jusqu'au temps T , qui ne dépend pas de ε , mais seulement des conditions initiales N_ε^0 et Θ_ε^0 , de sorte que par la formule (I.18), elles sont au moins valables jusqu'à des temps de l'ordre de $\mathcal{O}(1/\varepsilon^3)$ dans les variables originelles. Au premier abord, ce temps de validité de l'approximation semble bien meilleur que celui en $o(1/\varepsilon^2)$ de l'équation des ondes libres. Il n'est en fait qu'un peu meilleur si l'on se place dans des conditions identiques. Considérer l'approximation vers les équations de Korteweg-de Vries, ou de Kadomtsev-Petviashvili (KP1), revient en effet à étudier des perturbations de taille ε^2 , alors qu'elles étaient de tailles ε pour l'approximation vers l'équation des ondes libres. Pour des perturbations de taille ε^2 , l'approximation des ondes libres est valable jusqu'à des temps de l'ordre $o(1/\varepsilon^3)$ par la formule (I.17).

Ce faible gain sur la durée de validité de l'approximation n'est pas imputable aux techniques de compacité employées par D. Chiron et F. Rousset. Il est identique, à un facteur $|\ln(\varepsilon)|$ près, par les méthodes d'énergie que nous avons mises en oeuvre dans [15, 16]. Par contre, ces méthodes d'énergie fournissent en sus des estimations de la convergence en fonction du paramètre ε . Cette convergence apparaît comme meilleure que celle obtenue pour l'équation des ondes libres pour des temps assez grands. Nous reviendrons sur cette affirmation au Paragraphe I.3.

I.2 Les ondes progressives minimisantes

Ce paragraphe traite des ondes progressives minimisantes pour l'équation de Gross-Pitaevskii. Rappelons qu'il s'agit des ondes progressives qui s'obtiennent comme minimiseurs de l'énergie de Ginzburg-Landau E à moment scalaire p fixé. Dans une première partie, nous abordons la question de leur construction, et décrivons les propriétés de l'énergie minimisante en dimensions deux et trois. La seconde partie porte sur leur limite transsonique vers les ondes solitaires pour l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1) en dimension deux. Enfin, la troisième partie est consacrée à leur stabilité orbitale en dimension un qui se déduit de leur caractère minimisant.

I.2.1 Le problème de minimisation de l'énergie de Ginzburg-Landau à moment scalaire fixé

a. Énoncé des principaux résultats

L'analyse des ondes progressives minimisantes commence par leur construction comme minimiseurs de l'énergie de Ginzburg-Landau E à moment scalaire p fixé. À cette fin, nous introduisons le problème de minimisation sous contrainte

$$E_{\min}(p) \equiv \inf \left\{ E(v), v \in W(\mathbb{R}^N) \text{ t.q. } p(v) = p \right\}. \quad (\text{I.24})$$

Dans cette expression, le nombre p est positif. La notation $W(\mathbb{R}^N)$ désigne un espace fonctionnel sur le choix duquel nous reviendrons. Soulignons de plus que nous nous limiterons ici au cas des dimensions deux et trois.

Une solution \mathbf{u}_p du problème (I.24) est une onde progressive d'énergie $E(\mathbf{u}_p) = E_{\min}(p)$ finie pour l'équation de Gross-Pitaevskii. Comme son moment scalaire est non nul lorsque p est différent de 0, elle n'est pas constante dès lors que p est non nul. La vitesse $c = c(\mathbf{u}_p)$ de cette onde progressive est le multiplicateur de Lagrange de l'équation d'Euler-Lagrange (OPc) associée au problème (I.24). Obtenir un contrôle précis sur la valeur de ce multiplicateur n'est pas facile. La résolution du problème (I.24) ne fournit ainsi que l'existence d'ondes progressives de moment scalaire p quelconque, au moins en dimension deux, mais pas nécessairement de vitesse c quelconque dans l'intervalle $]0, \sqrt{2}[$.

Le choix de l'espace fonctionnel $W(\mathbb{R}^N)$ répond à deux exigences. D'une part, les ondes progressives \mathbf{u}_p , solutions du problème (I.24), doivent appartenir à cet espace. D'autre part, l'énergie de Ginzburg-Landau E , ainsi que le moment scalaire p , doivent être bien définis sur cet espace, et leurs définitions doivent être compatibles avec les méthodes de calcul des variations qui seront mises en oeuvre afin de résoudre le problème (I.24). Ces deux impératifs conduisent au choix de l'espace $W(\mathbb{R}^N) \equiv \{1\} + V(\mathbb{R}^N)$, où

$$V(\mathbb{R}^N) = \left\{ v : \mathbb{R}^N \mapsto \mathbb{C}, \text{ t.q. } (\nabla v, \text{Re}(v)) \in L^2(\mathbb{R}^N)^2, \text{Im}(v) \in L^4(\mathbb{R}^N), \text{ et } \nabla \text{Re}(v) \in L^{\frac{4}{3}}(\mathbb{R}^N) \right\}.$$

La description asymptotique des ondes progressives montre qu'elles appartiennent à l'espace $W(\mathbb{R}^N)$. De plus, l'énergie de Ginzburg-Landau E , définie par l'expression (1), et le moment scalaire p , défini par

$$p(v) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^N} \langle i \partial_1 v, v - 1 \rangle = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^N} \left(\partial_1(\text{Re}(v)) \text{Im}(v) - \partial_1(\text{Im}(v))(\text{Re}(v) - 1) \right), \quad (\text{I.25})$$

sont bien définies et de classe \mathcal{C}^1 sur l'espace $W(\mathbb{R}^N)$. Le problème (I.24) est par conséquent bien posé. S'il possède des solutions, ce sont des ondes progressives \mathbf{u}_p non constantes d'énergie finie.

La résolution du problème (I.24) se fait en deux étapes : l'analyse a priori des propriétés de la courbe minimisante $p \mapsto E_{\min}(p)$, puis la preuve de l'existence de minimiseurs \mathbf{u}_p , lorsque p est suffisamment grand en dimension trois. Les principales propriétés de la courbe minimisante sont les suivantes.

Théorème I.1 ([14]). *Soit $N = 2$ ou $N = 3$.*

i) La fonction E_{\min} est strictement croissante, concave, lipschitzienne sur \mathbb{R}_+ , avec une constante de Lipschitz égale à $\sqrt{2}$, et tend vers $+\infty$, lorsque p tend vers $+\infty$. Elle vérifie l'inégalité

$$\forall p \geq 0, E_{\min}(p) \leq \sqrt{2}p. \quad (\text{I.26})$$

ii) L'inégalité (I.26) est stricte en dimension deux pour tout réel $p > 0$. La fonction E_{\min} est alors strictement concave.

iii) En dimension trois, il existe un réel $p_0 > 0$ tel que

$$\forall 0 \leq p \leq p_0, E(p) = \sqrt{2}p.$$

Lorsque $p > p_0$, l'inégalité (I.26) devient stricte, et la fonction E_{\min} , strictement concave.

Les propriétés de la fonction E_{\min} permettent de montrer que l'infimum (I.24) est atteint pour toute valeur $p \geq 0$ en dimension deux, c'est-à-dire de construire des solutions non constantes d'énergie finie de l'équation (OPc).

Théorème I.2 ([14]). Soit $N = 2$ et $p > 0$. Il existe une solution $\mathbf{u}_p \in W(\mathbb{R}^2)$ au problème de minimisation (I.24). La fonction \mathbf{u}_p est une solution non-constante d'énergie finie et de moment scalaire $p(\mathbf{u}_p) = p$ de l'équation (OPc) pour une vitesse $c = c(\mathbf{u}_p)$ qui vérifie

$$0 < \frac{dE_{\min}}{dp}(p^+) \leq c \leq \frac{dE_{\min}}{dp}(p^-) < \sqrt{2}.$$

En dimension trois, la fonction E_{\min} a une allure différente pour les petites valeurs de p , ce qui conduit à un théorème d'existence quelque peu différent.

Théorème I.3 ([14]). Soit $N = 3$, et p_0 , la constante positive du Théorème I.1.

i) Lorsque $0 < p < p_0$, le problème de minimisation (I.24) n'a pas de solutions dans l'espace $W(\mathbb{R}^3)$.

ii) Lorsque $p \geq p_0$, il existe une solution $\mathbf{u}_p \in W(\mathbb{R}^3)$ au problème de minimisation (I.24). La fonction \mathbf{u}_p est une solution non constante d'énergie finie et de moment scalaire $p(\mathbf{u}_p) = p$ de l'équation (OPc) pour une vitesse $c = c(\mathbf{u}_p)$ qui vérifie

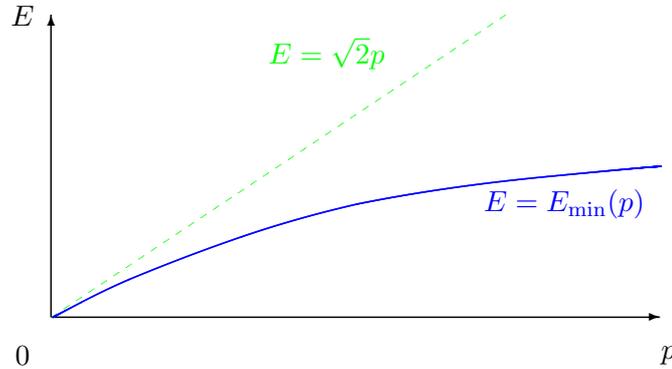
$$0 < \frac{dE_{\min}}{dp}(p^+) \leq c \leq \frac{dE_{\min}}{dp}(p^-) < \sqrt{2}.$$

Les vitesses $c(\mathbf{u}_p)$ des fonctions \mathbf{u}_p satisfont de plus l'inégalité

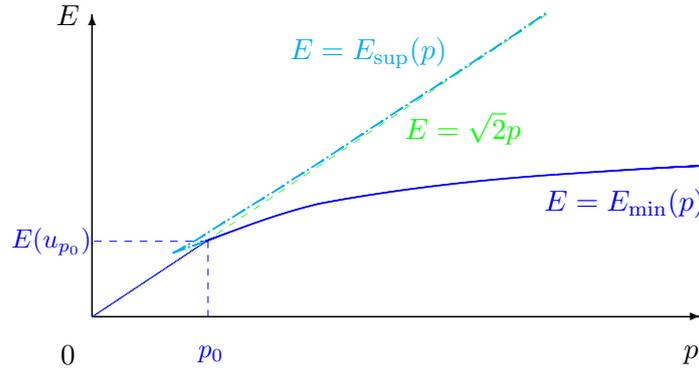
$$\sup\{c(\mathbf{u}_p), p \geq p_0\} < \sqrt{2}. \quad (\text{I.27})$$

Remarque. En dimension trois, les Théorèmes I.1 et I.3 complètent l'analyse du même problème de minimisation que F. Béthuel, G. Orlandi et D. Smets [18] avaient réalisée dans le cas où les moments scalaires considérées sont grands, régime qui correspond à la limite dans laquelle apparaît un anneau de vortex.

En dimension deux, les Théorèmes I.1 et I.2 fournissent une courbe complète d'ondes progressives donnée par le tracé suivant.



En dimension trois, le schéma obtenu à partir des conclusions des Théorèmes I.1 et I.3 est le suivant.



Sur chacun de ces schémas, la courbe bleue royale représente la courbe minimisante $p \mapsto E_{\min}(p)$. Dans sa partie strictement concave, chaque point de la courbe correspond à une onde progressive u_p d'énergie $E_{\min}(p)$ et de moment scalaire p . Lorsque la courbe est différentiable, la vitesse $c = c(u_p)$ de l'onde progressive est égale à la pente de la courbe. Bien que la courbe soit différentiable sauf en un ensemble au plus dénombrable de points, sa différentiabilité en tout point reste un problème ouvert. Aussi cette construction variationnelle n'aboutit-elle pas à des solutions non constantes de l'équation (OPc) pour toute vitesse $c \in]0, \sqrt{2}[$, au contraire des arguments développés par M. Maris [115] en dimension supérieure ou égale à trois.

Les Théorèmes I.2 et I.3 confirment les résultats de C.A. Jones, S.J. Putterman et P.H. Roberts [90, 89]. En dimension trois, ceux-ci affirment de plus que la branche de solutions se prolonge à travers la droite $E = \sqrt{2}p$ au point p_0 par une courbe E_{sup} , en bleu clair ci-dessus. L'argument de minimisation sous contrainte utilisé ici ne permet pas de construire cette branche supérieure, puisque les ondes progressives sur cette branche ne minimisent pas l'énergie E à moment scalaire p fixé. M. Maris [115] a récemment confirmé qu'il existait bien des ondes progressives pour toute vitesse subsonique en dimension trois, lesquelles correspondent sans doute aux deux branches du tracé ci-dessus (bien qu'il ne soit pas immédiat que ce soit en effet le cas).

En dimension trois, la partie affine de la courbe $p \mapsto E_{\min}(p)$ ne contient aucun minimiseur du problème (I.24). Il existe même un seuil d'énergie \mathcal{E}_3 au-dessous duquel les seules ondes progressives sont identiquement constantes.

Théorème I.4 ([14]). *Soit $N = 3$. Il existe une constante universelle $\mathcal{E}_3 > 0$ telle que toute solution u de l'équation (GP) qui vérifie*

$$E(u) \leq \mathcal{E}_3,$$

est constante.

Remarque. A. de Laire [41] a étendu ce résultat à toutes les dimensions supérieures ou égales à quatre (voir également [132]).

Au sujet des propriétés qualitatives des ondes progressives u_p des Théorèmes I.2 et I.3, il convient d'abord de mentionner leur caractère réel-analytique.

Proposition I.1 ([14]). *Soit $N \geq 2$ et $0 < c < \sqrt{2}$. Une onde progressive u_c de vitesse c est réelle-analytique sur \mathbb{R}^N : ses parties réelles et imaginaires se prolongent en des fonctions analytiques à N variables.*

Cette propriété découle du caractère elliptique de l'équation (OPc) lorsque $0 < c < \sqrt{2}$, raison pour laquelle elle est valable pour toute solution d'énergie finie de l'équation (OPc). Elle permet en outre d'établir la symétrie axiale des ondes progressives \mathbf{u}_p des Théorèmes I.2 et I.3, symétrie qui repose, quant à elle, sur leur caractère minimisant.

Proposition I.2 ([14]). *Soit $N = 2$ ou $N = 3$, et $p \geq 0$. Si \mathbf{u}_p est une solution du problème (I.24), alors, la fonction \mathbf{u}_p est, à translation près, à symétrie axiale autour de l'axe x_1 : il existe une fonction à valeurs complexes u_p , définie sur $\mathbb{R} \times \mathbb{R}_+$, telle que*

$$\forall x = (x_1, x_\perp) \in \mathbb{R}^N, \quad \mathbf{u}_p(x_1, x_\perp) = u_p(x_1, |x_\perp|).$$

Nous ne détaillerons pas les preuves des Propositions I.1 et I.2, qui sont somme toute classiques (voir [22, 23] pour l'analyticité, et [112] pour la symétrie). Nous renvoyons à [14] pour plus de détails. En ce qui concerne les Théorèmes I.1, I.2, I.3 et I.4, nous allons au contraire tâcher de présenter les principaux éléments de leurs preuves.

b. Principe général des preuves des Théorèmes I.1, I.2 et I.3

La preuve des Théorèmes I.1, I.2 et I.3 repose sur une démarche classique pour des problèmes variationnels semblables au problème (I.24). Elle débute par la description de la courbe minimisante $p \mapsto E_{\min}(p)$ à l'aide de fonctions tests bien choisies, et se poursuit par la preuve de la compacité des suites minimisantes de ce problème de minimisation, dans un espace fonctionnel ad hoc, grâce à des arguments de type concentration-compacité [107, 108]. Cette démarche générale se heurte ici à la difficulté de définir le moment scalaire p dans l'espace d'énergie $\mathcal{E}(\mathbb{R}^N)$, puis à celle de prouver la compacité d'une suite minimisante quelconque.

La stratégie mise en oeuvre dans [14] est donc légèrement différente. La preuve débute toujours par une description minutieuse de la courbe minimisante, mais au lieu d'établir la compacité des suites minimisantes pour conclure quant à l'existence de minimiseurs, la preuve se poursuit par la construction de solutions $(\mathbf{u}_p^n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ de problèmes approchés. Dans notre cas, il s'agit de restreindre le problème de minimisation (I.24) aux fonctions $2\pi n$ -périodiques définies sur des tores $\mathbb{T}_n \equiv [-\pi n, \pi n]^N$ de taille $n \in \mathbb{N}^*$, et de montrer que les problèmes approchés

$$E_{\min}^n(p) \equiv \inf \left\{ E^n(v), v \in H^1(\mathbb{T}_n) \text{ t.q. } p^n(v) = p \right\}. \quad (\text{I.28})$$

possèdent des minimiseurs \mathbf{u}_p^n . Dans cette expression, l'énergie de Ginzburg-Landau E^n , restreinte au tore \mathbb{T}_n , est définie par la formule

$$E^n(v) \equiv \frac{1}{2} \int_{\mathbb{T}_n} |\nabla v|^2 + \frac{1}{4} \int_{\mathbb{T}_n} (1 - |v|^2)^2,$$

tandis que le moment scalaire p^n est donné par

$$p^n(v) \equiv \frac{1}{2} \int_{\mathbb{T}_n} \langle i\partial_1 v, v \rangle_{\mathbb{C}}.$$

Ces deux fonctionnelles sont définies et de classe \mathcal{C}^1 sur l'espace fonctionnel $H^1(\mathbb{T}_n)$. Le problème de minimisation (I.28) est bien posé. Il admet au moins une solution $\mathbf{u}_p^n \in H^1(\mathbb{T}_n)$ grâce au caractère compact des injections de l'espace $H^1(\mathbb{T}_n)$ dans les espaces $L^p(\mathbb{T}_n)$ pour $1 \leq p < +\infty$ en dimension deux, $1 \leq p < 6$ en dimension trois. Les minimiseurs \mathbf{u}_p^n sont solutions des équations

$$ic_n \partial_1 \mathbf{u}_p^n + \Delta \mathbf{u}_p^n + \mathbf{u}_p^n (1 - |\mathbf{u}_p^n|^2) = 0, \quad (\text{I.29})$$

où la vitesse c_n est encore le multiplicateur de Lagrange du problème (I.28).

Après avoir résolu les problèmes approchés (I.28), ne reste qu'à montrer qu'à la limite $n \rightarrow +\infty$, les minimiseurs approchés \mathbf{u}_p^n convergent, à extraction près si nécessaire, vers un minimiseur \mathbf{u}_p du problème de minimisation initial (I.24). La preuve de cette convergence repose sur des arguments de concentration-compacité. Cependant, il ne s'agit plus de montrer la compacité d'une suite minimisante quelconque du problème (I.24), mais de prouver la compacité d'une suite de solutions $(\mathbf{u}_p^n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ des équations elliptiques (I.29). De telles solutions possèdent des propriétés de régularité et de décroissance qui facilitent la preuve de cette compacité, laquelle suffit à établir l'existence de minimiseurs \mathbf{u}_p du problème (I.24), au moins lorsque la courbe minimisante possède les propriétés de stricte sous-additivité requises par les techniques de concentration-compacité. Avant de préciser plus avant ces différents arguments, il est temps de décrire de quelle manière s'obtiennent les propriétés de la courbe minimisante énoncées par le Théorème I.1.

c. Quelques éléments de la preuve du Théorème I.1

Les propriétés de la fonction E_{\min} découlent de la construction de fonctions tests appropriées pour le problème (I.24). La réduction aux fonctions régulières, à support compact, facilitent ces constructions. La preuve du Théorème I.1 commence donc par la vérification, grâce à la densité de l'espace $\{1\} + \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^N)$ dans l'espace $W(\mathbb{R}^N)$, que le problème de minimisation (I.24) se réduit à

$$E_{\min}(p) = \inf \{E(v), v - 1 \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^N) \text{ t.q. } p(v) = p\}. \quad (\text{I.30})$$

Vient ensuite le calcul de bornes supérieures satisfaisantes. Ce calcul repose bien sûr sur la compréhension des liens entre les deux quantités, l'énergie de Ginzburg-Landau E et le moment scalaire p , qui apparaissent dans la définition du problème (I.24). Ce lien n'est guère perceptible dans les expressions (1) et (I.25), mais il devient manifeste si l'on se restreint aux fonctions v qui ne s'annulent pas sur \mathbb{R}^N , et qu'il est donc possible de relever sous la forme $v = \varrho \exp i\varphi$, où $\varrho = |v|$ et φ sont des fonctions à valeurs réelles, définies sur \mathbb{R}^N . Dans les variables ϱ et φ , l'énergie $E(v)$ et le moment scalaire $p(v)$ s'écrivent

$$E(v) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^N} |\nabla \varrho|^2 + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^N} \varrho^2 |\nabla \varphi|^2 + \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^N} (1 - \varrho^2)^2, \text{ et } p(v) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^N} (1 - \varrho^2) \partial_1 \varphi. \quad (\text{I.31})$$

Lorsque la fonction v vérifie

$$|v| \geq \delta, \quad (\text{I.32})$$

pour un réel strictement positif δ , la formule (I.31) conduit à l'inégalité

$$|p(v)| \leq \frac{1}{2\delta} \int_{\mathbb{R}^N} |1 - \varrho^2| |\varrho \partial_1 \varphi| \leq \frac{1}{\sqrt{2}\delta} \left(\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^N} \varrho^2 |\partial_1 \varphi|^2 + \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^N} (1 - |\varrho|^2)^2 \right) \leq \frac{1}{\sqrt{2}\delta} E(v). \quad (\text{I.33})$$

Lorsque cette inégalité est presque une égalité, et lorsque δ est proche de 1, il advient que

$$E(v) \simeq \sqrt{2} p(v).$$

Cette observation est au coeur de la preuve de la borne supérieure (I.26).

En pratique, il s'agit de construire des fonctions tests telles que l'inégalité (I.32) soit vérifiée pour un nombre δ très proche de 1, et que l'inégalité (I.33) soit presque une égalité. Une façon de procéder se résume à introduire des fonctions $(v_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ régies par les changements d'échelles

$$v_n(x_1, x_\perp) \equiv \varrho_n(x_1, x_\perp) \exp i\varphi_n(x_1, x_\perp) \equiv \left(1 - \frac{\mu}{n} \partial_1 \psi \left(\frac{x_1}{n}, \frac{x_\perp}{n^\alpha} \right) \right) \exp \left(i\sqrt{2}\mu \psi \left(\frac{x_1}{n}, \frac{x_\perp}{n^\alpha} \right) \right).$$

Dans cette expression, la fonction ψ est régulière, à support compact, μ désigne un petit paramètre strictement positif, tandis que α est un nombre strictement supérieur à 1. Les fonctions v_n vérifient la condition (I.32) pour un nombre δ proche de 1, dès que n est assez grand. Dans le même temps, les fonctions ϱ_n et φ_n satisfont, de manière approchée, l'identité

$$\sqrt{2}\partial_1\varphi_n(x_1, x_\perp) \simeq 1 - \varrho_n(x_1, x_\perp)^2.$$

La seconde inégalité de la formule (I.33) est donc presque une égalité. Les termes transverses à la variable x_1 dans la formule (I.31) de l'énergie sont de plus négligeables, puisque $\alpha > 1$. Ne reste plus qu'à fixer μ de sorte que $p(v_n) = p$ pour obtenir

$$E(v_n) \rightarrow \sqrt{2}p,$$

lorsque n tend vers $+\infty$, ce qui fournit la borne (I.26).

Combinée à la réduction aux fonctions régulières à support compact, cette borne donne, à son tour, le caractère lipschitzien de la fonction E_{\min} . Étant donnés deux nombres positifs p et q tels que $q > p$, et un nombre strictement positif ε , il existe en effet un couple de fonctions $(v_1, v_2) \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^N)^2$ telles que

$$E(1 + v_1) \leq E_{\min}(p) + \varepsilon \text{ et } p(1 + v_1) = p,$$

et

$$E(1 + v_2) \leq \sqrt{2}(q - p) + \varepsilon, \text{ et } p(1 + v_2) = q - p.$$

Quitte à translater, les supports de v_1 et de v_2 sont disjoints, de sorte que la fonction $w = 1 + v_1 + v_2$ vérifie

$$E(w) = E(1 + v_1) + E(1 + v_2) \leq E_{\min}(p) + \sqrt{2}(q - p) + 2\varepsilon, \text{ et } p(w) = p(1 + v_1) + p(1 + v_2) = q.$$

Il s'ensuit que

$$E_{\min}(q) \leq E_{\min}(p) + \sqrt{2}(q - p),$$

à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$. Une permutation des rôles de p et q permet alors de conclure quant à la continuité de la fonction E_{\min} , qui est $\sqrt{2}$ -lipschitzienne.

La concavité de la fonction E_{\min} se déduit, quant à elle, d'un argument de symétrisation inspiré d'une idée d'O. Lopes [112] qui se résume ainsi. Commençons par introduire deux nombres réels p et q , un nombre strictement positif ε , ainsi qu'une fonction $v \in W(\mathbb{R}^N)$ tels que

$$E(v) \leq E_{\min}\left(\frac{p+q}{2}\right) + \varepsilon, \text{ et } p(v) = \frac{p+q}{2}.$$

Puisque v appartient à l'espace $W(\mathbb{R}^N)$, la quantité $\langle i\partial_1 v, v - 1 \rangle$ est intégrable, de sorte que, par la relation de Chasles, il existe un nombre réel α tel que

$$\frac{1}{2} \int_{\{x_N \geq \alpha\}} \langle i\partial_1 v, v - 1 \rangle = \frac{p}{2}, \text{ et } \frac{1}{2} \int_{\{x_N < \alpha\}} \langle i\partial_1 v, v - 1 \rangle = \frac{q}{2}.$$

Les moments scalaires des deux fonctions v^+ et v^- , construites par réflexion par rapport à l'hyperplan d'équation $x_N = \alpha$ suivant les formules

$$v^\pm(x_1, \dots, x_N) = \begin{cases} v(x_1, \dots, x_N), & \text{si } \pm(x_N - \alpha) \geq 0, \\ v(x_1, \dots, 2\alpha - x_N), & \text{si } \pm(x_N - \alpha) \leq 0, \end{cases}$$

sont alors égaux à p , respectivement, à q . Il s'ensuit que

$$E_{\min}(p) + E_{\min}(q) \leq E(v^+) + E(v^-) \leq 2E(v) \leq 2E_{\min}\left(\frac{p+q}{2}\right) + 2\varepsilon,$$

ce qui fournit l'inégalité

$$\frac{E_{\min}(p) + E_{\min}(q)}{2} \leq E_{\min}\left(\frac{p+q}{2}\right),$$

à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$. Comme la fonction E_{\min} est déjà continue, elle est donc concave. Comme cette fonction est positive, elle est aussi croissante sur \mathbb{R}_+ .

Une conséquence importante de la concavité de la fonction E_{\min} est sa sous-additivité, soit le fait que

$$\sum_{k=1}^{\ell} E_{\min}(p_k) \geq E_{\min}(p), \quad (\text{I.34})$$

si p_1, \dots , et p_ℓ sont des nombres positifs tels que $p_1 + \dots + p_\ell = p$. Lorsqu'elle est stricte, cette inégalité joue un rôle primordial dans l'argument de concentration-compacité qui permet de construire les minimiseurs u_p des Théorèmes I.2 et I.3.

Au contraire, dans le cas d'égalité, la courbe minimisante est affine sur l'intervalle $]0, p[$. Le problème de minimisation (I.24) n'est alors pas atteint dans l'intervalle $]0, p[$. Supposons en effet qu'il existe un minimiseur u_q pour un nombre $0 < q < p$, et reprenons l'argument de symétrisation précédent. Si s est un nombre tel que $|s| < \min\{|q|, |p-q|\}$, il existe un nombre α_s tel que

$$\frac{1}{2} \int_{\{x_N \geq \alpha_s\}} \langle i\partial_1 u_q, u_q - 1 \rangle = \frac{q+s}{2}, \quad \text{et} \quad \frac{1}{2} \int_{\{x_N < \alpha_s\}} \langle i\partial_1 u_q, u_q - 1 \rangle = \frac{q-s}{2}.$$

Les moments scalaires des fonctions u_q^+ et u_q^- , construites par réflexion de la fonction u_q par rapport à l'hyperplan d'équation $x_N = \alpha_s$, sont alors égaux à $q+s$, respectivement à $q-s$, de sorte que

$$E_{\min}(q+s) + E_{\min}(q-s) \leq E(u_q^+) + E(u_q^-) = 2E(u_q) = 2E_{\min}(q). \quad (\text{I.35})$$

Comme la fonction E_{\min} est affine entre 0 et p , elle vérifie

$$E_{\min}(q+s) + E_{\min}(q-s) = 2E_{\min}(q).$$

L'inégalité (I.35) est donc une égalité, et les fonctions u_q^+ et u_q^- , des minimiseurs du problème (I.24). Ce sont ainsi des solutions de l'équation (OPc), soit des fonctions régulières. Leur symétrie par rapport à l'hyperplan d'équation $x_N = \alpha_s$ implique que

$$\partial_N u_q = \partial_N u_q^+ = \partial_N u_q^- = 0,$$

sur l'hyperplan d'équation $x_N = \alpha_s$. Cette propriété demeure vraie pour tout un intervalle de valeurs de s , soit pour tout un intervalle de valeurs de α_s . Comme la fonction u_q est réelle-analytique sur \mathbb{R}^N , ce n'est possible que si u_q est identiquement constante sur \mathbb{R}^N , ce qui est contradictoire avec le fait que $p(u_q) = q \neq 0$. En conclusion, si la courbe minimisante contient une partie affine, le problème de minimisation (I.24) ne possède pas de solutions dans cette partie affine.

Il est donc crucial de déterminer les parties strictement concaves de la courbe $p \mapsto E_{\min}(p)$. D'après l'énoncé du Théorème I.1, ces parties sont exactement celles où la quantité $\Sigma(p) = \sqrt{2}p - E_{\min}(p)$ est strictement positive. Avant d'envisager la construction de minimiseurs u_p du problème (I.24), il reste à déterminer ces parties. Une nouvelle fois, cette détermination passe par l'introduction de fonctions tests telles que Σ soit strictement positive, cette fois-ci.

En dimension deux, cette question se résout grâce au changement d'échelles fourni par la limite transsonique. Il suffit d'introduire une onde solitaire w de vitesse 1 pour l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1), puis de lui appliquer le changement d'échelles transsonique

$$w_{\varepsilon,t}(x_1, x_2) = \left(1 - \frac{t\varepsilon^2}{2} w\left(\varepsilon x_1, \frac{\varepsilon^2}{\sqrt{2}} x_2\right)\right) \exp\left(i \frac{t\varepsilon}{\sqrt{2}} v\left(\varepsilon x_1, \frac{\varepsilon^2}{\sqrt{2}} x_2\right)\right).$$

Lorsque les nombres ϵ et t sont ajustés de sorte que $p(w_{\epsilon,t}) = p$, les applications $w_{\epsilon,t}$ sont des fonctions tests pour le problème (I.24). Elles fournissent l'estimation

$$E_{\min}(p) \leq \sqrt{2}p - \frac{48\sqrt{2}}{\mathcal{S}_{KP}^2}p^3 + \mathcal{O}(p^4), \quad (\text{I.36})$$

à la limite $p \rightarrow 0$. Dans cette formule, la constante \mathcal{S}_{KP} renvoie à l'action de l'onde solitaire w , qui est donnée par

$$\mathcal{S}_{KP} = S(w) \equiv E^{KP}(w) + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^2} w^2.$$

L'inégalité (I.36) implique la stricte positivité de la fonction Σ en dimension deux pour toute valeur strictement positive de p . La fonction E_{\min} est strictement concave sur \mathbb{R}_+ , raison pour laquelle il existe des minimiseurs \mathbf{u}_p du problème (I.24) pour toute valeur du moment scalaire p .

En dimension trois, la limite transsonique ne correspond plus à la limite $p \rightarrow 0$, mais, selon les observations de C.A. Jones, S.J. Putterman et P.H. Roberts [90, 89], à une limite $p \rightarrow +\infty$, sur la branche supérieure de solutions qu'ils ont exhibée. Par contre, la quantité $\Sigma(p)$ demeure strictement positive pour p assez grand. Il résulte en effet du travail de F. Béthuel, G. Orlandi et D. Smets [18] que l'énergie minimisante satisfait l'asymptote

$$E_{\min}(p) \sim \pi\sqrt{p} \ln(p), \quad (\text{I.37})$$

lorsque $p \rightarrow +\infty$. Remarquons qu'en dimension deux, les résultats de F. Béthuel et J.-C. Saut [19] conduisent à l'asymptote

$$E_{\min}(p) \sim 2\pi \ln(p),$$

lorsque $p \rightarrow +\infty$, laquelle confirme, au moins pour les grandes valeurs de p , que la quantité $\Sigma(p)$ est strictement positive.

d. Quelques éléments des preuves des Théorèmes I.2 et I.3

Comme indiqué précédemment, la construction des minimiseurs \mathbf{u}_p du problème (I.24) débute par celle des minimiseurs \mathbf{u}_p^n des problèmes approchés (I.28), grâce à la compacité des injections de Sobolev sur les tores \mathbb{T}_n . La preuve des Théorèmes I.2 et I.3 se réduit ensuite à passer à la limite $n \rightarrow +\infty$, afin d'obtenir les minimiseurs \mathbf{u}_p comme limite des minimiseurs \mathbf{u}_p^n .

Ce passage à la limite requiert une borne indépendante de n sur les fonctions \mathbf{u}_p^n . Le calcul de cette borne utilise la réduction aux fonctions régulières, à support compact, de l'identité (I.30). Étant donné un nombre strictement positif ϵ , il existe une fonction $v_\epsilon \in \{1\} + \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^N)$ telle que $p(v_\epsilon) = p$, et

$$E(v_\epsilon) \leq E_{\min}(p) + \epsilon.$$

Lorsque n est assez grand, l'application v_ϵ , considérée comme un élément de $H^1(\mathbb{T}_n)$, est une fonction test pour le problème approché (I.28). Elle procure l'inégalité

$$\limsup_{n \rightarrow +\infty} E^n(\mathbf{u}_p^n) \leq E_{\min}(p), \quad (\text{I.38})$$

laquelle borne les fonctions \mathbf{u}_p^n de manière indépendante de n .

Afin de prouver la compacité de la suite de fonctions $(\mathbf{u}_p^n)_{n \in \mathbb{N}^*}$, il s'avère aussi nécessaire d'invoquer le caractère elliptique de l'équation (I.29), que satisfait chacune des fonctions \mathbf{u}_p^n pour une certaine vitesse c_p^n . Ce caractère dégénère lorsque c_p^n tend vers $+\infty$. L'identité de Pohozaev (I.3), qui demeure valable sur les tores \mathbb{T}_n , à des termes de bord près, assure un

contrôle indépendant de n des vitesses c_p^n . Après estimation de ces termes de bord, cette identité implique que

$$|c_p^n| \leq K \frac{E(\mathbf{u}_p^n)}{p(\mathbf{u}_p^n)} \leq K \frac{E(\mathbf{u}_p^n)}{p}, \quad (\text{I.39})$$

où K est une constante positive indépendante de n . Combinée à la borne (I.38), l'inégalité (I.39) garantit la non-dégénérescence du caractère elliptique de l'équation (OPc) à la limite $n \rightarrow +\infty$. Les estimations elliptiques classiques fournissent alors des estimations uniformes des fonctions \mathbf{u}_p^n , et de leurs dérivées,

$$|\partial^\alpha \mathbf{u}_p^n| \leq K(\alpha, c_p^n), \quad (\text{I.40})$$

qui sont indépendantes de n . Par le théorème d'Ascoli-Arzelà, il existe ainsi une fonction $\mathbf{u}_p \in H_{\text{loc}}^1(\mathbb{R}^N)$ telle que, à une sous-suite près,

$$\mathbf{u}_p^n \rightarrow \mathbf{u}_p \text{ in } \mathcal{C}_{\text{loc}}^k(\mathbb{R}^N),$$

lorsque $n \rightarrow +\infty$. La fonction \mathbf{u}_p est solution de l'équation (OPc) pour une vitesse c égale à la limite, à extraction près, de la suite $(c_p^n)_{n \geq 1}$. Rien ne garantit cependant qu'elle ne soit solution du problème (I.24), ni même qu'elle ne soit constante.

Ces difficultés disparaissent dès lors que le passage à la limite n'occasionne pas de perte d'énergie. Aussi convient-il de localiser avec précision l'énergie des fonctions \mathbf{u}_p^n . Par les estimations elliptiques (I.40), leur énergie est localisée là où leur module est loin de 1. Ces estimations assurent en effet que les applications $\eta^n \equiv 1 - |\mathbf{u}_p^n|^2$ vérifient

$$|\eta^n(x) - \eta^n(y)| \leq K|x - y|,$$

où K est une constante positive indépendante de n . Si \bar{x} désigne un point d'une boule $\overline{B(x_0, 1/2)}$ tel que $|\eta^n(\bar{x})| = \sup\{|\eta^n(y)|, y \in B(x_0, 1/2)\}$, alors

$$|\eta^n(y)| \geq \frac{|\eta^n(\bar{x})|}{2},$$

dès que $|\bar{x} - y| \leq \mu \equiv |\eta^n(\bar{x})|/2K$. L'énergie $E(\mathbf{u}_p^n, B(x_0, 1))$ de la fonction \mathbf{u}_p^n dans la boule $B(x_0, 1)$ satisfait donc

$$E(\mathbf{u}_p^n, B(x_0, 1)) \geq \frac{1}{4} \int_{B(\bar{x}, \min\{\mu, \frac{1}{2}\})} (\eta^n)^2 \geq K \min\{|\eta^n(\bar{x})|^{N+2}, |\eta^n(\bar{x})|^2\},$$

de sorte que

$$\|1 - |\mathbf{u}_p^n|\|_{L^\infty(B(x_0, \frac{1}{2}))} \leq |\eta^n(\bar{x})| \leq K \max\left\{E(\mathbf{u}_p^n, B(x_0, 1))^{\frac{1}{N+2}}, E(\mathbf{u}_p^n, B(x_0, 1))^{\frac{1}{2}}\right\}.$$

Lorsque l'énergie dans la boule $B(x_0, 1)$ est petite, le module de \mathbf{u}_p^n est proche de 1 dans la boule $B(x_0, 1/2)$. En définitive, l'énergie se concentre dans les zones de la forme

$$\mathcal{V}_\delta^n = \left\{x \in \mathbb{T}_n, \text{ t.q. } |1 - |\mathbf{u}_p^n(x)|| \geq \delta\right\},$$

où δ est un nombre strictement positif.

À ce stade, soulignons que les ensembles \mathcal{V}_δ^n sont non vides lorsque $\Sigma(p)$ est strictement positif, δ , suffisamment petit, et n , assez grand. Les inégalités (I.33) et (I.38) prouvent en effet que

$$\min_{x \in \mathbb{T}_n} |\mathbf{u}_p^n(x)| \leq \max\left\{\frac{1}{2}, \frac{E_{\min}^n(p)}{\sqrt{2p}}\right\} \rightarrow \max\left\{\frac{1}{2}, \frac{E_{\min}(p)}{\sqrt{2p}}\right\},$$

lorsque $n \rightarrow +\infty$. Pour n assez grand, l'ensemble \mathcal{V}_δ^n est donc non vide, dès que $\Sigma(p) > 0$ et

$$0 < \delta < \min \left\{ \frac{1}{2}, \frac{\Sigma(p)}{\sqrt{2}p} \right\}.$$

L'argument de concentration-compacité se réduit enfin à choisir un nombre fini ℓ , indépendant de n , de points x_1^n, \dots, x_ℓ^n de l'ensemble \mathcal{V}_δ^n , tels que

$$|x_i^n - x_j^n| \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} +\infty,$$

pour $i \neq j$, et à construire des fonctions $u_i \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^N)$, telles que, quitte à extraire,

$$\mathbf{u}_p^n(\cdot + x_i^n) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} u_i(\cdot) \text{ dans } C_{\text{loc}}^k(\mathbb{R}^N). \quad (\text{I.41})$$

Les fonctions u_1, \dots, u_ℓ sont des solutions de l'équation (OPc) pour une même vitesse limite $c \neq 0$. Elle ne sont pas constantes en raison de l'inégalité

$$|u_i(0)| \leq 1 - \delta < 1,$$

qui découle de la limite (I.41). Grâce aux propriétés de décroissance des solutions d'énergie finie de l'équation (OPc), cette construction s'opère sans qu'il n'y ait de perte d'énergie lors du passage à la limite, ce qui fournit les identités

$$E_{\min}(p) = \sum_{i=1}^{\ell} E(u_i), \text{ et } p = \sum_{i=1}^{\ell} p(u_i). \quad (\text{I.42})$$

Lorsque $\Sigma(p) > 0$, le nombre ℓ est supérieur ou égal à 1. Il suffit de montrer qu'il est égal à 1 pour conclure la preuve. Supposons que ce ne soit pas le cas. Les égalités (I.42) impliquent alors que

$$E_{\min}(p) = \sum_{i=1}^{\ell} E(u_i) \geq \sum_{i=1}^{\ell} E_{\min}(p(u_i)). \quad (\text{I.43})$$

Cependant, les fonctions u_i sont des solutions non constantes de l'équation (OPc) pour une même vitesse $c \neq 0$. Par l'identité de Pohozaev (I.3), leurs moments $p(u_i)$ sont strictement compris entre 0 et p . La sous-additivité (I.34) de la fonction E_{\min} entraîne donc que

$$\sum_{i=1}^{\ell} E_{\min}(p(u_i)) \geq E_{\min}(p).$$

L'inégalité (I.43) est une égalité, ce qui a deux conséquences contradictoires. La courbe $p \mapsto E_{\min}(p)$ est d'une part, affine entre 0 et p , de sorte qu'il n'existe pas de minimiseurs du problème (I.24) pour les valeurs q du moment comprises entre 0 et p . D'autre part, l'égalité dans l'expression (I.43) induit que les fonctions u_i sont des minimiseurs du problème (I.24) pour toutes les valeurs $p(u_i)$. Ceci est impossible puisque $p(u_i)$ est strictement compris entre 0 et p . En conclusion, lorsque $\Sigma(p) > 0$, le nombre ℓ vaut exactement 1, et le problème (I.24) possède un minimiseur $\mathbf{u}_p = u_1$.

En dimension deux, la condition (I.26) est vraie pour tout réel p strictement positif, ce qui conclut la preuve du Théorème I.2. En dimension trois, le Théorème I.4 énonce que le problème (I.24) n'a pas de minimiseurs pour p suffisamment petit, de sorte que $\Sigma(p)$ est nul. Par contre, comme $\Sigma(p) \rightarrow +\infty$ lorsque $p \rightarrow +\infty$ par l'asymptote (I.37), le problème (I.24) admet un minimiseur \mathbf{u}_p pour p assez grand. Un raffinement de ces deux observations établit l'existence d'une valeur critique p_0 strictement positive telle que le problème (I.24) possède un minimiseur si et seulement si $p \geq p_0$, ce qui complète la preuve du Théorème I.3.

e. Quelques éléments de la preuve du Théorème I.4

Nous terminons par la démonstration de la non-existence d'ondes progressives d'énergie petite en dimension trois. Cette propriété repose sur le caractère surlinéaire de l'équation (OPc). Afin d'éclairer cette affirmation, considérons une solution u d'énergie finie et de vitesse c subsonique de l'équation (OPc). Lorsque son énergie est suffisamment petite, la fonction u ne s'annule pas sur \mathbb{R}^3 . Elle se relève sous la forme $u = \varrho \exp i\varphi$, où les fonctions à valeurs réelles ϱ et φ sont définies sur \mathbb{R}^3 . Dans les nouvelles variables ϱ et φ , l'équation (OPc) s'écrit

$$\begin{cases} \frac{c}{2} \partial_1 \varrho^2 + \operatorname{div}(\varrho^2 \nabla \varphi) = 0, \\ c\varrho \partial_1 \varphi - \Delta \varrho - \varrho(1 - \varrho^2) + \varrho |\nabla \varphi|^2 = 0. \end{cases} \quad (\text{I.44})$$

La fonction $\eta \equiv 1 - \varrho^2$ est solution de l'équation de convolution

$$\eta = K_0 * F + 2c \sum_{j=1}^3 K_j * G_j. \quad (\text{I.45})$$

Les noyaux K_0 et K_j sont donnés par leurs transformées de Fourier,

$$\widehat{K}_0(\xi) = \frac{|\xi|^2}{|\xi|^4 + 2|\xi|^2 - c^2 \xi_1^2}, \quad \text{et} \quad \widehat{K}_j(\xi) = \frac{\xi_1 \xi_j}{|\xi|^4 + 2|\xi|^2 - c^2 \xi_1^2}. \quad (\text{I.46})$$

Les non-linéarités F et G sont égales à

$$F = 2(|\nabla v|^2 + \eta^2) - 2c\eta \partial_1 \varphi, \quad \text{et} \quad G = \eta \nabla \varphi.$$

L'équation de convolution (I.45) est surlinéaire au sens où les non-linéarités F et G dépendent de manière quadratique des variables η ou $\nabla \varphi$. Combinée à l'écriture explicite des noyaux K_0 et K_j , cette surlinéarité assure que la fonction u est constante si son énergie est suffisamment petite.

Les non-linéarités F et G satisfont en effet l'inégalité

$$|F| + |G| \leq K(|\nabla u|^2 + \eta^2 + \varrho^2 |\nabla \varphi|^2) \leq Ke(u), \quad (\text{I.47})$$

où K désigne une constante positive, et $e(u)$, la densité d'énergie associée à l'énergie de Ginzburg-Landau par la formule (1). En tenant compte des formules explicites (I.46), l'équation (I.45) s'estime sous la forme

$$\int_{\mathbb{R}^3} \eta^2 \leq KE(u)^2 \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\widehat{K}_0|^2 \right),$$

grâce à l'inégalité de Young. D'autre part, la multiplication des équations (I.44) par les fonctions φ et $1 - \varrho^2$, puis leur intégration par parties, procurent l'inégalité

$$E(u) \leq Kc^2 \int_{\mathbb{R}^3} \eta^2.$$

Le caractère surlinéaire des non-linéarités F et G impose donc que l'énergie $E(u)$ soit contrôlée par son carré à travers l'estimation

$$E(u) \leq Kc^2 E(u)^2 \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\widehat{K}_0|^2 \right). \quad (\text{I.48})$$

Ne reste plus qu'à invoquer les formules explicites (I.46) pour calculer l'intégrale

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\widehat{K}_0|^2 = \frac{\pi^2}{c} \arcsin \left(\frac{c}{\sqrt{2}} \right).$$

Lorsque l'énergie $E(u)$ n'est pas nulle, c'est-à-dire lorsque u n'est pas constante, l'inégalité (I.48) s'écrit alors

$$E(u) \geq \frac{1}{K\pi^2 c \arcsin\left(\frac{c}{\sqrt{2}}\right)} \geq \mathcal{E} = \frac{\sqrt{2}}{K\pi^3} > 0.$$

En d'autres termes, il n'existe pas d'ondes progressives non constantes d'énergie inférieure au seuil d'énergie \mathcal{E} .

Remarque. Le raisonnement précédent reste valable en dimension deux. Cependant, la norme L^2 du noyau K_0 est égale à

$$\int_{\mathbb{R}^2} |\widehat{K_0}|^2 = \frac{\pi}{\sqrt{2(2-c^2)}}.$$

L'énergie $E(u)$ est minorée par

$$E(v) \geq \mathcal{E}(c) = K\sqrt{2-c^2}. \quad (\text{I.49})$$

La quantité $\mathcal{E}(c)$ converge vers 0 lorsque $c \rightarrow \sqrt{2}$. La relation (I.49) n'exclut plus l'existence d'ondes progressives non constantes d'énergie petite en dimension deux.

I.2.2 La limite transsonique en dimension deux

a. Énoncé des principaux résultats

L'analyse qualitative des ondes progressives minimisantes \mathbf{u}_p , dont le Théorème I.2 assure l'existence pour toute valeur positive de p , se poursuit par l'étude de leur limite transsonique en dimension deux. Rappelons qu'il s'agit de considérer la limite des fonctions \mathbf{u}_p lorsque leur vitesse $c_p \equiv c(\mathbf{u}_p)$ converge vers la vitesse du son $c_s = \sqrt{2}$. En dimension deux, C.A. Jones, S.J. Putterman et P.H. Roberts [90, 89] ont remarqué que cette limite correspond à la limite $p \rightarrow 0$, où les fonctions \mathbf{u}_p sont régies par l'équation des ondes solitaires (6) pour l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1).

La confirmation de ces observations requiert d'affiner la description des ondes progressives minimisantes \mathbf{u}_p de moment scalaire p petit. Rappelons pour commencer que ce ne sont pas directement les fonctions \mathbf{u}_p qui se comportent suivant l'équation (6) à la limite transsonique, mais leurs modules ϱ_p et leurs phases φ_p , après des changements d'échelles convenables. Il convient donc de vérifier que les fonctions \mathbf{u}_p , qui possèdent des vortex pour p assez grand, ne s'annulent plus pour p suffisamment petit. Dans cette direction, nous pouvons énoncer le lemme suivant.

Lemme I.1 ([14]). *Soit $N = 2$ et $0 \leq c < \sqrt{2}$. Il existe une constante universelle \mathcal{E}_2 strictement positive telle que toute solution u de l'équation (OPc), d'énergie inférieure ou égale à \mathcal{E}_2 , vérifie*

$$\frac{1}{2} \leq |u| \leq 2.$$

La fonction u s'écrit alors sous la forme $u \equiv \varrho \exp i\varphi$, où les fonctions à valeurs réelles $\varrho \equiv |u|$ et φ sont définies sur \mathbb{R}^2 . De plus, les fonctions u , ϱ et φ satisfont les relations

$$\sqrt{2}p(u) - E(u) + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^2} |\nabla \varrho|^2 = (\sqrt{2} - c)p(u), \quad (\text{I.50})$$

et

$$\int_{\mathbb{R}^2} |\nabla \varrho|^2 \left(1 + \frac{1}{\varrho^2}\right) = \int_{\mathbb{R}^2} (1 - \varrho^2) |\nabla \varphi|^2. \quad (\text{I.51})$$

Enfin, il existe une constante universelle positive K telle que

$$\sqrt{2-c^2} \leq KE(u). \quad (\text{I.52})$$

En dimension deux, l'énergie $E_{\min}(p)$ des fonctions \mathbf{u}_p convergent vers 0 à la limite $p \rightarrow 0$. Par le Lemme I.1, elles se relèvent sous la forme $\mathbf{u}_p \equiv \varrho_p \exp i\varphi_p$ pour p suffisamment petit, ce qui permet de définir proprement les changements d'échelles (I.2) par les formules

$$N_p(x) = \frac{6}{\varepsilon_p^2} \left(1 - \varrho_p \left(\frac{x_1}{\varepsilon_p}, \frac{\sqrt{2}x_\perp}{\varepsilon_p^2} \right)^2 \right) \text{ et } \partial_1 \Theta_p(x) = \frac{6\sqrt{2}}{\varepsilon_p^2} \partial_1 \varphi_p \left(\frac{x_1}{\varepsilon_c}, \frac{\sqrt{2}x_\perp}{\varepsilon_p^2} \right), \quad (\text{I.53})$$

où $\varepsilon_p \equiv (2 - c_p^2)^{1/2}$. L'analyse formelle de C.A. Jones, S.J. Putterman et P.H. Roberts prévoit que les fonctions N_p et $\partial_1 \Theta_p$ suivent l'équation (6) à la limite $c_p \rightarrow \sqrt{2}$. À ce stade, rien ne garantit cependant que la limite $p \rightarrow 0$ ne corresponde à une limite transsonique. L'énoncé suivant confirme que c'est bien le cas.

Lemme I.2 ([13]). *Soit $N = 2$. Il existe des constantes universelles p_1 , K_1 et K_2 strictement positives telle que tout minimiseur \mathbf{u}_p du problème (I.24), de moment scalaire $0 \leq p < p_1$, satisfait*

$$K_1 p^2 \leq \sqrt{2} - c_p \leq K_2 p^2, \quad (\text{I.54})$$

où c_p désigne la vitesse de l'onde progressive \mathbf{u}_p considérée.

Toutes les conditions semblent remplies pour justifier l'analyse de C.A. Jones, S.J. Putterman et P.H. Roberts. Reste toutefois à se prémunir de l'invariance par translation de l'équation (OPc). Lorsque les fonctions N_p convergent à la limite $p \rightarrow 0$ vers une onde solitaire w pour l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1), et lorsque $(a_p)_{p \in \mathbb{N}}$ désigne une suite de points de \mathbb{R}^2 tels que $|a_p| \rightarrow +\infty$, la famille de fonctions $(N_p(\cdot - a_p))_{p > 0}$ n'est plus convergente à la limite $p \rightarrow 0$. Cependant, les fonctions $N_p(\cdot - a_p)$ s'obtiennent de manière identique aux fonctions N_p à partir des applications $\mathbf{u}_p(\cdot - a_p)$ qui sont encore des ondes progressives minimisantes. Cet exemple illustre que toute famille de fonctions N_p associées à des ondes progressives minimisantes \mathbf{u}_p ne peut converger à la limite $p \rightarrow 0$. Écarter cette éventualité requiert de supprimer l'invariance par translations à l'aide du lemme suivant.

Lemme I.3. *Soit $N = 2$ et $0 < c < \sqrt{2}$. Toute solution u de l'équation (OPc) d'énergie finie et de vitesse c satisfait*

$$\|1 - |u|^2\|_{L^\infty(\mathbb{R}^2)} \geq \frac{2 - c^2}{10}. \quad (\text{I.55})$$

Comme toute solution u de l'équation (OPc) vérifie

$$|u(x)| \rightarrow 1,$$

lorsque $|x| \rightarrow +\infty$, il découle du Lemme I.3 que les fonctions N_p définies par la formule (I.53) atteignent leur maximum sur \mathbb{R}^2 . Supposer que ce maximum est atteint en 0 suffit à fixer l'invariance par translation de l'équation (OPc), donc à confirmer les observations de C.A. Jones, S.J. Putterman et P.H. Roberts.

Théorème I.5 ([13]). *Il existe une suite de réels strictement positifs $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$, qui tend vers 0 lorsque n tend vers $+\infty$, et un état fondamental W pour l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1), de vitesse égale à 1, tels que*

$$\forall k \in \mathbb{N}, \forall 1 < q \leq +\infty, N_{p_n} \rightarrow W, \text{ et } \partial_1 \Theta_{p_n} \rightarrow W \text{ dans } W^{k,q}(\mathbb{R}^2), \quad (\text{I.56})$$

lorsque $n \rightarrow +\infty$.

L'énoncé du Théorème I.5 amène plusieurs commentaires. Le premier concerne la notion d'état fondamental, laquelle renvoie à un type particulier d'ondes solitaires. Les états fondamentaux sont les ondes solitaires qui minimisent l'énergie de Kadomtsev-Petviashvili E^{KP} , définie par la formule (5), sous la contrainte d'une norme L^2 fixée. A. de Bouard et Jean-Claude Saut [39, 40] ont prouvé leur existence en dimension deux par des techniques similaires à celles employées pour construire les ondes progressives minimisantes pour l'équation de Gross-Pitaevskii. Cette analogie est au coeur de la preuve du Théorème I.5 que nous allons esquisser ci-dessous.

La seconde observation a trait à la restriction de la convergence dans la limite $p \rightarrow 0$ à une suite $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$. Cette difficulté provient des techniques de compacité sur lesquelles repose le Théorème I.5. Étant donnée une suite $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$ qui converge vers 0, ces techniques établissent l'existence d'une sous-suite $(p_{\psi(n)})_{n \in \mathbb{N}}$ telle que les convergences (I.56) aient lieu. Dans cette configuration, la levée de la restriction à une sous-suite passe par la preuve de l'unicité de la fonction limite W , soit l'unicité des états fondamentaux pour l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1). L'équation (6) possède une solution explicite, dite solution "bosse" [114],

$$w_\ell(x_1, x_2) \equiv 24c \frac{3 - cx_1^2 + c^2x_2^2}{(3 + cx_1^2 + c^2x_2^2)^2}.$$

En général, on conjecture que cette solution "bosse" est l'unique état fondamental de vitesse égale à c , à invariance par translation près. À notre connaissance, aucune preuve n'a, à ce jour, confirmé cette conjecture. Si elle s'avérait exacte, le Théorème I.5 ne fournirait plus seulement la convergence de sous-suites $(N_{p_n})_{n \in \mathbb{N}}$ et $(\partial_1 \Theta_{p_n})_{n \in \mathbb{N}}$, mais bien la convergence des deux familles complètes de fonctions $(N_p)_{p>0}$ et $(\partial_1 \Theta_p)_{p>0}$.

En dimension trois, l'analyse du régime transsonique des ondes progressives minimisantes u_p est sans objet. La formule (I.27) du Théorème I.3 assure qu'il n'existe pas d'ondes progressives minimisantes u_p de vitesse $c(u_p)$ proche de la vitesse du son $c_s = \sqrt{2}$. Néanmoins, M. Maris [115] a démontré l'existence de solutions u_c de l'équation (OPc) pour toute vitesse $0 < c < \sqrt{2}$. Dans un travail récent, D. Chiron et M. Maris [34] confirment que ces fonctions u_c sont gouvernées par l'équation des ondes solitaires pour l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1) à la limite $c \rightarrow \sqrt{2}$.

Pour conclure quant aux commentaires sur le Théorème I.5, il convient de rappeler que l'analyse du régime transsonique s'étend aux solutions générales de l'équation de Gross-Pitaevskii. Il correspond alors à la limite ondes longues vers l'équation de Korteweg-de Vries en dimension un, l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1) en dimension supérieure (voir les Paragraphes I.1.3 et I.3).

b. Quelques éléments de la preuve du Théorème I.5

Comme avancé dans l'introduction, la démonstration du Théorème I.5 repose sur la mise en évidence d'un lien entre le problème de minimisation (I.24), et la minimisation de l'énergie E^{KP} à norme L^2 fixée. Avant d'expliciter ce lien, commençons par fournir quelques précisions au sujet de ce second problème de minimisation.

L'espace d'énergie $\mathcal{E}^{KP}(\mathbb{R}^2)$ pour l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1) est l'adhérence de l'espace $\partial_1 \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^2) \equiv \{\partial_1 v, v \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^2)\}$ pour la norme $\|\cdot\|_{\mathcal{E}^{KP}(\mathbb{R}^2)}$ définie par

$$\|\partial_1 v\|_{\mathcal{E}^{KP}(\mathbb{R}^2)} \equiv \left(\|\nabla v\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 + \|\partial_1^2 v\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

La quantité $E^{KP}(v)$, en particulier le terme non local de la formule (5), est bien définie pour une fonction v de $\mathcal{E}^{KP}(\mathbb{R}^2)$ grâce aux théorèmes d'injection de Sobolev anisotropes [10]. L'espace

$\mathcal{E}^{KP}(\mathbb{R}^2)$ est de plus inclus dans l'espace $L^2(\mathbb{R}^2)$. Le problème de minimisation

$$E_{\min}^{KP}(\mu) \equiv \left\{ E^{KP}(v), v \in \mathcal{E}^{KP}(\mathbb{R}^2) \text{ t.q. } \int_{\mathbb{R}^2} v^2 = \mu \right\}, \quad (\text{I.57})$$

a donc un sens quelle que soit la valeur du nombre positif μ . A. de Bouard et J.-C. Saut [39, 40] ont prouvé qu'il possède des minimiseurs W_μ quel que soit $\mu \in \mathbb{R}_+$, et que la valeur de l'énergie minimisante est

$$E_{\min}^{KP}(\mu) = -\frac{\mu^3}{54\mathcal{S}_{KP}^2}. \quad (\text{I.58})$$

Ici, la constante \mathcal{S}_{KP} est identique à celle de la formule (I.36). Il s'agit de l'action

$$S(W) \equiv E^{KP}(W) + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^2} W^2,$$

d'un minimiseur W du problème (I.57) pour la valeur $\mu^* \equiv \sqrt{3\mathcal{S}_{KP}}$. Tous les minimiseurs W_μ sont des états fondamentaux de vitesse $c_\mu \equiv \mu^2/(\mu^*)^2$ pour l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP1). Les minimiseurs W pour la valeur μ^* ont une vitesse égale à 1. Les minimiseurs pour une autre valeur μ s'en déduisent par la formule $W_\mu(x) \equiv c_\mu W(\sqrt{c_\mu}x_1, c_\mu x_2)$.

La construction des minimiseurs W_μ découle, comme la construction des ondes progressives minimisantes, d'arguments de concentration-compacité. Étant donnée une suite minimisante $(v_n)_{n \in \mathbb{N}}$, ces arguments procurent une sous-suite $(v_{\psi(n)})_{n \in \mathbb{N}}$, des points $a_n \in \mathbb{R}^2$, et une fonction $W_\mu \in \mathcal{E}^{KP}(\mathbb{R}^2)$, tels que

$$v_{\psi(n)}(\cdot - a_n) \rightarrow W_\mu \text{ dans } \mathcal{E}^{KP}(\mathbb{R}^2), \quad (\text{I.59})$$

lorsque $n \rightarrow +\infty$. La fonction W_μ est alors un minimiseur du problème (I.57).

Les problèmes de minimisation (I.24) et (I.57) sont reliés par le fait que les fonctions N_p et $\partial_1 \Theta_p$, définies à partir des ondes progressives minimisantes \mathbf{u}_p par les formules (I.53), forment des familles minimisantes pour le problème (I.57) dans la limite $p \rightarrow 0$. Une fois cette affirmation avérée, le résultat de compacité (I.59) suffit à prouver les convergences (I.56), au moins dans l'espace $\mathcal{E}^{KP}(\mathbb{R}^2)$.

L'origine de cette affirmation se trouve dans les expressions de l'énergie de Ginzburg-Landau E et du moment p comme fonctions des nouvelles variables N_p , Θ_p et $\varepsilon_p \equiv \sqrt{2 - c_p^2}$,

$$p(\mathbf{u}_p) = \frac{\varepsilon_p}{72} \int_{\mathbb{R}^2} N_p \partial_1 \Theta_p,$$

et

$$E(\mathbf{u}_p) = \frac{\sqrt{2}\varepsilon_p}{144} \left(E_0(N_p, \Theta_p) + \varepsilon_p^2 E_2(N_p, \Theta_p) + \varepsilon_p^4 E_4(N_p, \Theta_p) \right), \quad (\text{I.60})$$

où⁶

$$E_0(N_p, \Theta_p) \equiv \int_{\mathbb{R}^2} (N_p^2 + (\partial_1 \Theta_p)^2), \text{ et } E_2(N_p, \Theta_p) \equiv \int_{\mathbb{R}^2} \left(\frac{1}{2} (\partial_1 N_p)^2 + \frac{1}{2} (\partial_2 \Theta_p)^2 - \frac{1}{6} N_p (\partial_1 \Theta_p) \right).$$

La quantité $\Sigma(\mathbf{u}_p) \equiv \sqrt{2}p - E(\mathbf{u}_p)$ vaut, quant à elle,

$$\Sigma(\mathbf{u}_p) = -\frac{\sqrt{2}\varepsilon_p}{144} \left(\int_{\mathbb{R}^2} (N_p - \partial_1 \Theta_p)^2 + \varepsilon_p^2 E_2(N_p, \Theta_p) + \varepsilon_p^4 E_4(N_p, \Theta_p) \right). \quad (\text{I.61})$$

6. La fonctionnelle E_4 de la formule (I.60) joue un rôle mineur à la limite $p \rightarrow 0$, raison pour laquelle nous renvoyons à [13] pour son expression précise.

Minimiser l'énergie de Ginzburg-Landau E à moment scalaire p fixé revient à maximiser la quantité Σ à moment scalaire p fixé. Les fonctions N_p et Θ_p maximisent donc les quantités au second membre de la formule (I.61). Dans la limite transsonique, soit pour $\varepsilon_p \rightarrow 0$, la différence N_p et $\partial_1 \Theta_p$ doit être petite, tandis que la quantité $E_2(N_p, \partial_1 \Theta_p)$ doit être minimale. Comme

$$E_2(N_p, N_p) = E^{KP}(N_p),$$

ceci revient à imposer aux fonctions N_p et $\partial_1 \Theta_p$ de converger vers un même minimiseur du problème (I.57).

La preuve du Théorème I.5 reprend de manière quantitative l'approche précédente. En vertu des propriétés elliptiques de l'équation (OPc), les ondes progressives minimisantes \mathbf{u}_p , qui ont une énergie petite dans la limite $p \rightarrow 0$, se relèvent sous la forme $\mathbf{u}_p = \varrho_p \exp i\varphi_p$, au moins pour p suffisamment petit. Les fonctions N_p et Θ_p , données par les formules (I.53), sont donc bien définies. Après les changements d'échelles (I.53), l'équation de convolution (I.45) satisfaite par les fonctions $\eta_p \equiv 1 - |\mathbf{u}_p|^2$ se réduit à

$$N_p = K_{\varepsilon_p}^{2,0} * f_p - \sum_{i+j=2} \varepsilon_p^2 K_{\varepsilon_p}^{i,j} * \mathcal{R}_{\varepsilon_p}^{i,j}, \quad (\text{I.62})$$

pour la fonction N_p . Dans cette identité, la fonction f_p est définie par

$$f_p \equiv \frac{1}{3} N_p^2 + \frac{1}{6} (\partial_1 \Theta_p)^2.$$

Les applications $\mathcal{R}_{\varepsilon_p}^{i,j}$ sont des fonctions non linéaires régulières des variables N_p , Θ_p , et de leurs dérivées d'ordre un. Nous renvoyons à [13] pour l'expression précise de ces fonctions. Quant aux noyaux $K_{\varepsilon_p}^{i,j}$, ce sont les versions convenablement mises à l'échelle des noyaux K_0 et K_j de la formule (I.46). Leurs transformées de Fourier sont données par

$$\widehat{K_{\varepsilon_p}^{i,j}}(\xi) \equiv \frac{\xi_1^i \xi_2^j}{|\xi|^2 + \xi_1^4 + \varepsilon_p \xi_1^2 \xi_2^2 + \frac{\varepsilon_p^4}{4} \xi_2^4}.$$

Ils sont donc régularisants, et ce, de manière contrôlée par rapport au paramètre ε_p . Étant donné un nombre $\alpha \in [0, 1[$, il existe en effet une constante positive $K(\alpha)$, indépendante de ε_p , telle que

$$\|K_{\varepsilon_p}^{i,j}\|_{\dot{H}^\alpha(\mathbb{R}^2)} \leq K(\alpha) (1 + \varepsilon_p^{\frac{1}{2}-j-2\alpha}). \quad (\text{I.63})$$

Par un théorème de P.I. Lizorkin [111], ce sont de plus des multiplicateurs de Fourier dans les espaces $L^q(\mathbb{R}^2)$ pour tout nombre $1 < q < +\infty$. Il existe une constante positive $K(q)$, là encore indépendante de ε_p , telle que

$$\forall f \in L^q(\mathbb{R}^2), \quad \|K_{\varepsilon_p}^{i,j} * f\|_{L^q(\mathbb{R}^2)} \leq \frac{K(q)}{\varepsilon_p^{\kappa_{i,j}}} \|f\|_{L^q(\mathbb{R}^2)}. \quad (\text{I.64})$$

L'exposant $\kappa_{i,j}$ est ici égal à $\max\{i + 2j - 4, 0\}$.

Ces deux propriétés fournissent des bornes indépendantes de ε_p des fonctions N_p et de toutes leurs dérivées. Il en va de même pour les fonctions Θ_p qui vérifient une équation de convolution similaire à l'équation (I.62). Étant donné un entier $k \in \mathbb{N}$ et un nombre $1 < q \leq +\infty$, ces bornes s'écrivent

$$\|N_p\|_{W^{k,q}(\mathbb{R}^2)} + \|\partial_1 \Theta_p\|_{W^{k,q}(\mathbb{R}^2)} + \varepsilon_p \|\partial_2 \Theta_p\|_{W^{k,q}(\mathbb{R}^2)} \leq K(k, q), \quad (\text{I.65})$$

où $K(k, q)$ est une constante positive, indépendante de ε_p .

Notons à ce stade, que la limite $p \rightarrow 0$ correspond à une limite transsonique, à savoir que la vitesse c_p des minimiseurs converge vers $\sqrt{2}$ dans cette limite. Cette affirmation résulte de l'inégalité (I.36) qui fournit la borne

$$\Sigma(\mathbf{u}_p) \geq \frac{48\sqrt{2}}{\mathcal{S}_{KP}^2} p^3 - \mathcal{O}_{p \rightarrow 0}(p^4), \quad (\text{I.66})$$

lorsque p est suffisamment petit. Combiné à l'identité (I.50), qui découle de l'identité de Pohozaev (I.3) pour les solutions de l'équation (OPc), et à l'inégalité (I.52), qui se déduit de l'équation de convolution (I.45) satisfaite par les fonctions η_p , la borne (I.66) fournit les inégalités (I.54) du Lemme I.2 qui prouvent que la limite $p \rightarrow 0$ est bien une limite transsonique. En particulier, le paramètre ε_p tend vers 0 lorsque $p \rightarrow 0$, d'où la nécessité de mettre en relief la dépendance en ce paramètre des inégalités (I.63) et (I.64).

Une fois les bornes (I.65) établies, il découle des théorèmes d'injection de Sobolev qu'à extraction près, les fonctions N_p et $\partial_1 \Theta_p$ convergent faiblement dans tous les espaces $W^{k,q}(\mathbb{R}^2)$, fortement dans tous les espaces $\mathcal{C}_{\text{loc}}^k(\mathbb{R}^2)$, vers des fonctions limites N_0 et $\Theta_{1,0}$ à la limite $p \rightarrow 0$. Par le Lemme I.3, la fonction N_0 n'est pas nulle. Pour les fonctions $|N_p|$, translatées de façon à ce qu'elles atteignent leur maximum en 0, la formule (I.55) s'écrit en effet

$$|N_p(0)| \geq \frac{3}{5}.$$

Par convergence uniforme sur tout compact contenant 0, c'est encore vraie pour la fonction N_0 , laquelle n'est donc pas nulle.

Les bornes (I.65) contrôlent par ailleurs tous les termes au second membre de la formule (I.61). Par l'estimation (I.66), il existe ainsi une constante positive K , indépendante de ε_p , telle que

$$\int_{\mathbb{R}^2} (N_p - \partial_1 \Theta_p)^2 \leq K \varepsilon_p^2, \quad (\text{I.67})$$

pour p suffisamment petit. Par suite, les limites N_0 et $\Theta_{1,0}$ sont identiquement égales à une même fonction W . Le passage à la limite dans l'équation de convolution (I.62), possible à nouveau grâce aux bornes (I.65), montre que la fonction W est solution de l'équation de convolution

$$W = \frac{1}{2} H_0 * W^2,$$

où le noyau H_0 est défini par

$$\widehat{H}_0(\xi) = \frac{\xi_1^2}{|\xi|^2 + \xi_1^4}.$$

Cette équation de convolution est équivalente à l'équation (6) pour une vitesse c égale à 1. La fonction W est bien une onde solitaire non nulle de vitesse 1.

Pour conclure, il suffit de déduire de l'expression (I.61) que

$$\Sigma(u_p) = -\frac{\sqrt{2}\varepsilon_p^3}{144} E^{KP}(\partial_1 \Theta_p) + \mathcal{O}_{p \rightarrow 0}(\varepsilon_p^3).$$

Combinée à la formule (I.58), et à l'estimation (I.66), cette relation conduit à l'identité

$$E^{KP}(\partial_1 \Theta_p) = \mathcal{E}_{\min}^{KP}(\mu_p) + \mathcal{O}_{p \rightarrow 0}(1),$$

où $\mu_p \equiv \int_{\mathbb{R}^2} (\partial_1 \Theta_p)^2$. Comme les fonctions $\partial_1 \Theta_p$ convergent faiblement vers W dans $L^2(\mathbb{R}^2)$ à la limite $p \rightarrow 0$, quitte à extraire, les nombres μ_p convergent vers un nombre μ_0 , strictement positif, puisque

$$\mu_0 \geq \int_{\mathbb{R}^2} W^2.$$

À extraction près, les fonctions $\partial_1 \Theta_p$ forment ainsi une famille minimisante pour le problème (I.57) associée à la valeur μ_0 . Ne reste plus qu'à invoquer le résultat de compacité (I.59) pour obtenir la convergence forte des fonctions $\partial_1 \Theta_p$ vers la fonction W dans l'espace $\mathcal{E}^{KP}(\mathbb{R}^2)$. Par la formule (I.67), il en va de même pour les fonctions N_p dans l'espace $L^2(\mathbb{R}^2)$. L'extension aux espaces $W^{k,q}(\mathbb{R}^2)$ de la formule (I.56) résulte, une dernière fois, des bornes (I.65).

I.2.3 La stabilité orbitale en dimension un

a. Énoncé des principaux résultats

En dimension un, l'équation (OPc) satisfaite par les ondes progressives de vitesse c est une équation différentielle ordinaire qui s'intègre explicitement. À translation et multiplication par une constante de module un près, ses solutions non constantes u_c sont données par la formule (3). Ces ondes progressives sont supposées jouer un rôle essentiel dans la dynamique en temps long de l'équation de Gross-Pitaevskii. Cette affirmation repose sur le caractère intégrable de cette équation par les méthodes du scattering inverse (voir l'article de V.E. Zakharov et A.B. Shabat [140]). Cette particularité est propre à la dimension un. L'opérateur de scattering associé à l'équation de Gross-Pitaevskii est l'opérateur de Dirac

$$L_\Psi \equiv i \begin{pmatrix} (1 + \sqrt{3})\partial_x & 0 \\ 0 & (1 - \sqrt{3})\partial_x \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \bar{\Psi} \\ \Psi & 0 \end{pmatrix}.$$

Lorsque Ψ désigne une solution de l'équation de Gross-Pitaevskii, l'opérateur L_Ψ est, au moins formellement, solution de l'équation

$$\partial_t L_{\Psi(t)} = i[L_{\Psi(t)}, B_{\Psi(t)}] \equiv i(L_{\Psi(t)} B_{\Psi(t)} - B_{\Psi(t)} L_{\Psi(t)}), \quad (\text{I.68})$$

où l'opérateur B_Ψ est défini par l'expression

$$B_\Psi \equiv -\sqrt{3} \begin{pmatrix} \partial_x^2 & 0 \\ 0 & \partial_x^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{|\Psi|^2 - 1}{\sqrt{3} + 1} & i\partial_x \bar{\Psi} \\ -i\partial_x \Psi & \frac{|\Psi|^2 - 1}{\sqrt{3} - 1} \end{pmatrix}.$$

Les opérateurs L_Ψ et B_Ψ forment une paire de Lax suivant le formalisme introduit par P.D. Lax [99]. La solution de l'équation (I.68) est donnée par

$$L_{\Psi(t)} = U(t)^{-1} L_{\Psi(0)} U(t),$$

où $U(t)$ est l'opérateur unitaire

$$U(t) \equiv \exp i \int_0^t B_{\Psi(s)} ds.$$

L'opérateur $L_{\Psi(t)}$ est unitairement équivalent à l'opérateur $L_{\Psi(0)}$. Ses propriétés spectrales sont conservées le long du flot de l'équation de Gross-Pitaevskii. Grâce à la formule intégrale de Gelfand-Levitan-Marchenko [55, 1], il est possible de reconstruire la fonction Ψ à partir de l'opérateur L_Ψ . La conservation des propriétés spectrales de l'opérateur $L_{\Psi(t)}$ procure alors une image précise de la dynamique en temps long de l'équation de Gross-Pitaevskii.

Cette image est proche de celle associée à l'équation de Korteweg-de Vries, laquelle est également intégrable par les méthodes du scattering inverse. Comme l'équation de Gross-Pitaevskii, l'équation de Korteweg-de Vries possède une famille de solutions de type ondes progressives, que l'on désigne sous le terme de solitons. Ils sont donnés explicitement par la formule

$$\mathbf{v}_c(x) \equiv \frac{3c}{\text{ch}^2\left(\frac{\sqrt{c}x}{2}\right)}.$$

À la différence de l'équation de Gross-Pitaevskii où les vitesses des ondes progressives sont comprises entre $-\sqrt{2}$ et $\sqrt{2}$, les vitesses c des solitons \mathfrak{v}_c couvrent toutes les valeurs positives. En temps long, une solution quelconque de l'équation de Korteweg-de Vries se décompose en un train de solitons, qui se déplacent tous vers la droite, auquel s'ajoute une partie dispersive, qui se propage vers la gauche. P.C. Schuur [129] a confirmé cette description de la dynamique en temps long de l'équation de Korteweg-de Vries par les techniques du scattering inverse, avant qu'Y. Martel et F. Merle [116, 117, 118, 119, 120] ne la corrobore par des techniques d'équations aux dérivées partielles. Ces dernières techniques ne donnent pas une image aussi précise que celle dérivée à partir de la méthode du scattering inverse, mais elles présentent l'avantage conséquent de s'étendre à des équations qui ne sont plus intégrables.

L'image de la dynamique en temps long de l'équation de Gross-Pitaevskii est semblable. Une solution quelconque Ψ est supposée se décomposer en deux trains d'ondes progressives, l'un se dirigeant vers la gauche, l'autre vers la droite, auxquels vient s'ajouter une composante dispersive. Lorsque la donnée initiale est une perturbation d'une onde progressive u_c , la solution Ψ est sensée se comporter en temps long comme une onde progressive u_{c^*} , de vitesse c^* proche de c , à laquelle vient s'ajouter une perturbation dispersive. L'onde progressive u_c est orbitalement, et même asymptotiquement stable, le long du flot de l'équation de Gross-Pitaevskii.

À notre connaissance, la question de la stabilité asymptotique des ondes progressives u_c demeure ouverte, que ce soit en dimension un ou en dimension supérieure. Par contre, plusieurs travaux récents ont confirmé leur stabilité orbitale en dimension un. Z. Lin [106]⁷ a établi la stabilité orbitale des solitons sombres, soit des ondes progressives de vitesse c non nulle. Énoncer proprement son résultat requiert de doter l'espace d'énergie $\mathcal{E}(\mathbb{R})$ d'une structure métrique adaptée à l'étude de la stabilité orbitale. La structure la plus simple est associée à l'une des distances⁸

$$d_{A,\mathcal{E}}(v_1, v_2) \equiv \|v_1 - v_2\|_{L^\infty([-A,A])} + \|v'_1 - v'_2\|_{L^2(\mathbb{R})} + \||v_1| - |v_2|\|_{L^2(\mathbb{R})}, \quad (\text{I.69})$$

où A désigne un nombre strictement positif. Le résultat de Z. Lin s'énonce alors ainsi.

Théorème ([106]). *Soit $0 < c < \sqrt{2}$. Étant donnés deux nombres strictement positifs ε et A , il existe un nombre strictement positif δ tel que, si la donnée initiale $\Psi_0 \in \mathcal{E}(\mathbb{R})$ d'une solution Ψ de l'équation de Gross-Pitaevskii vérifie*

$$d_{A,\mathcal{E}}(\Psi_0, u_c) \leq \delta,$$

alors

$$\sup_{t \in \mathbb{R}} \left(\inf_{(a,\theta) \in \mathbb{R}^2} d_{A,\mathcal{E}}(\Psi(\cdot, t), \exp i\theta u_c(\cdot - a)) \right) < \varepsilon.$$

Remarque. Rappelons que P.E. Zhidkov [142] a démontré l'existence et l'unicité globale de la solution Ψ associée à une donnée initiale Ψ_0 dans l'espace d'énergie $\mathcal{E}(\mathbb{R})$. La structure métrique associée aux distances (I.69) est plus faible que celle utilisée par P.E. Zhidkov pour résoudre le problème de Cauchy. Ceci s'explique par la difficulté de contrôler la phase φ de la solution Ψ par les arguments hamiltoniens qui mènent à l'énoncé ci-dessus. Cette difficulté est aussi présente dans l'analyse de la stabilité du soliton noir u_0 .

La preuve de la stabilité orbitale des solitons sombres ne s'étend pas de manière immédiate au cas du soliton noir u_0 . Néanmoins, cet autre soliton est lui-aussi orbitalement stable.

7. À proprement parler, le résultat de Z. Lin [106] ne concerne pas l'équation de Gross-Pitaevskii, mais une classe d'équations très proches. La preuve s'étend sans difficulté à l'équation de Gross-Pitaevskii (voir [12]).

8. Les distances définies par la formule (I.69) pour des nombres A différents sont en effet équivalentes.

Théorème I.6 ([15]). *Soit ε et A , deux nombres strictement positifs. Il existe un nombre strictement positif δ tel que, si la donnée initiale $\Psi_0 \in \mathcal{E}(\mathbb{R})$ d'une solution Ψ de l'équation de Gross-Pitaevskii vérifie*

$$d_{A,\varepsilon}(\Psi_0, u_0) \leq \delta, \quad (\text{I.70})$$

alors, pour chaque nombre $t \in \mathbb{R}$, il existe des nombres réels $a(t)$ et $\theta(t)$ telles que

$$d_{A,\varepsilon}(\Psi(\cdot + a(t), t), \exp i\theta(t) u_0(\cdot)) < \varepsilon. \quad (\text{I.71})$$

Les nombres $a(t)$ et $\theta(t)$ de la formule (I.71) ne sont pas uniques. Ils décrivent les décalages de position, respectivement de phase, de la solution Ψ . Le décalage de position $a(t)$ évolue lentement au cours du temps comme l'atteste la proposition suivante.

Proposition I.3. *Soit ε et A , deux nombres strictement positifs. Il existe une constante positive K , qui dépend seulement de A , et un nombre strictement positif δ , tels que si une donnée initiale $\Psi_0 \in \mathcal{E}(\mathbb{R})$ satisfait la condition (I.70) pour le nombre δ , alors*

$$\forall t \in \mathbb{R}, |a(t)| \leq K\varepsilon(1 + |t|), \quad (\text{I.72})$$

quel que soit le choix du point $a(t)$ tel que l'inégalité (I.71) est satisfaite.

Le Théorème I.6 vient compléter la justification par L. di Menza et C. Gallo [43] de la stabilité linéaire du soliton noir u_0 . Simultanément à la preuve du Théorème I.6, P. Gérard et Z. Zhang [59] ont également prouvé la stabilité orbitale du soliton noir u_0 par les techniques du scattering inverse.

Théorème ([59]). *Soit $\varepsilon > 0$ suffisamment petit, et $\Psi_0 \in \mathcal{C}^3(\mathbb{R})$ telle que*

$$\sup \{(1 + x^2)^4 |\Psi_0^{(k)}(x) - u_0^{(k)}(x)|, x \in \mathbb{R}, k \in \{0, 1, 2, 3\}\} \leq \varepsilon.$$

Il existe une constante positive K , indépendante de ε , telle que la solution Ψ de l'équation de Gross-Pitaevskii de donnée initiale Ψ_0 vérifie

$$\sup_{t \in \mathbb{R}} \left(\inf_{a \in \mathbb{R}} \|\Psi(\cdot, t) - u_0(\cdot - a)\|_{L^\infty(\mathbb{R})} \right) < K\varepsilon.$$

Cet énoncé complète avantageusement le Théorème I.6. Les techniques du scattering inverse réclament certes un peu plus de régularité et de décroissance sur les données initiales, ce qui restreint les perturbations auxquelles elles s'appliquent. En revanche, elles assurent un contrôle sur la solution $\Psi(t)$ au temps t , en particulier sur sa phase, qui est plus précis que celui donné par les arguments hamiltoniens qui conduisent au Théorème I.6. La fonction $\Psi(t)$ reste proche de façon uniforme, et non pas seulement pour les distances $d_{A,\varepsilon}$, d'un translaté du soliton noir u_0 . Quant au décalage de phase θ , il est identiquement nul, au moins pour des données initiales régulières et localisées. Dans le cas général, cette propriété semble hors de portée, au moins par les arguments invoqués pour la preuve du Théorème I.6.

En dimensions deux et trois, la stabilité orbitale des ondes progressives pour l'équation de Gross-Pitaevskii demeure un sujet pertinent, car l'équation est encore bien posée globalement dans l'espace d'énergie $\mathcal{E}(\mathbb{R}^N)$. Dans un travail récent, D. Chiron et M. Maris [33] ont établi que les ondes progressives minimisantes u_p des Théorèmes I.2 et I.3 sont orbitalement stables, ce qui confirme à nouveau les observations de C.A. Jones, S.J. Putterman et P.H. Roberts [90, 89]. Leur preuve repose sur une démarche analogue à celle du Théorème I.6 que nous allons maintenant détailler.

b. Quelques éléments de la preuve du Théorème I.6

À la suite des travaux pionniers de T.B. Benjamin [8] quant à la stabilité orbitale des solitons de l'équation de Korteweg-de Vries, deux approches se sont développées afin de montrer la stabilité orbitale de solutions particulières d'équations hamiltoniennes. L'approche que nous qualifierons de spectrale, introduite par M.I. Weinstein [136, 137], puis étendue de manière systématique par M. Grillakis, J. Shatah et W.A. Strauss [70, 71], repose sur la preuve par des arguments spectraux de la coercivité d'une fonctionnelle qui contrôle la distance entre la solution au temps t et la famille des solutions particulières considérées. C'est par cette approche que Z. Lin [106] a démontré la stabilité orbitale des solitons sombres. Dans ce cas, la fonctionnelle coercive qui contrôle la différence entre la solution Ψ de l'équation de Gross-Pitaevskii, et la famille des solitons sombres de vitesse c , est l'application $E - cp$, où E et p désignent l'énergie de Ginzburg-Landau et le moment scalaire.

L'approche alternative est variationnelle. Introduite par T. Cazenave et P.-L. Lions [28], elle s'appuie sur des caractérisations variationnelles des solutions particulières considérées, et la compacité des problèmes variationnels associés. C'est sur cette approche que repose la preuve du Théorème I.6. Le soliton noir u_0 est en effet l'unique minimiseur, à translation et multiplication par une constante de module un près, du problème de minimisation

$$E_{\min}^0 \equiv \inf \{ E(v), v \in \mathcal{E}(\mathbb{R}) \text{ t.q. } [p](v) = [p](u_0) \}. \quad (\text{I.73})$$

La quantité $[p]$ dans la définition (I.73) donne un sens rigoureux au moment scalaire p dans l'espace d'énergie $\mathcal{E}(\mathbb{R})$, lequel est seulement défini de manière formelle par la formule (2). Nous reviendrons dans la suite sur la définition précise de cette quantité.

La stabilité orbitale du soliton noir u_0 découle de cette caractérisation variationnelle par l'argument par l'absurde suivant. Supposons qu'il ne soit pas orbitalement stable pour la structure métrique associée à la distance $d_{A,\mathcal{E}}$. Il existe alors un nombre strictement positif ε , une suite de données initiales Ψ_0^n dans l'espace d'énergie $\mathcal{E}(\mathbb{R})$, ainsi qu'une suite de nombres réels $(t_n)_{n \in \mathbb{N}}$, tels que

$$d_{A,\mathcal{E}}(\Psi_0^n, u_0) \rightarrow 0, \quad (\text{I.74})$$

lorsque $n \rightarrow +\infty$, et

$$\forall n \in \mathbb{N}, \quad \inf_{(a,\theta) \in \mathbb{R}^2} d_{A,\mathcal{E}}(\Psi^n(\cdot, t_n), \exp i\theta u_0(\cdot - a)) > \varepsilon, \quad (\text{I.75})$$

où Ψ^n désigne l'unique solution de l'équation de Gross-Pitaevskii de donnée initiale Ψ_0^n . Comme l'énergie E est continue pour la distance $d_{A,\mathcal{E}}$, l'hypothèse (I.74) implique que

$$E(\Psi_0^n) \rightarrow E(u_0),$$

lorsque $n \rightarrow +\infty$. Par conservation de l'énergie E , et puisque u_0 est solution du problème de minimisation (I.73), il s'ensuit que

$$E(\Psi^n(\cdot, t_n)) \rightarrow E_{\min}^0,$$

lorsque $n \rightarrow +\infty$. Il se trouve que la quantité $[p]$ est aussi continue pour la distance $d_{A,\mathcal{E}}$, et conservée par le flot de l'équation de Gross-Pitaevskii, de sorte que, de manière similaire,

$$[p](\Psi^n(\cdot, t_n)) \rightarrow [p](u_0),$$

lorsque $n \rightarrow +\infty$. La suite de fonctions $(\Psi(\cdot, t_n))_{n \in \mathbb{N}}$ est donc une suite minimisante pour le problème de minimisation (I.73). Si les suites minimisantes pour ce problème sont compactes,

alors, il existe une sous-suite $\phi : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{N}$, et un minimiseur $u_{\min} \in \mathcal{E}(\mathbb{R}^2)$ du problème (I.73), tels que

$$d_{A,\mathcal{E}}(\Psi_{\phi(n)}(\cdot, t_{\phi(n)}), u_{\min}) \rightarrow 0, \quad (\text{I.76})$$

lorsque $n \rightarrow +\infty$. Comme les minimiseurs du problème (I.73) s'écrivent sous la forme $\exp i\theta u_0(\cdot - a)$ pour deux nombres réels a et θ , la relation (I.76) contredit l'expression (I.75), ce qui autorise à conclure quant à la stabilité orbitale du soliton noir u_0 .

En pratique, cette approche variationnelle se heurte à la difficulté de définir proprement le moment scalaire p dans l'espace d'énergie $\mathcal{E}(\mathbb{R})$. Cette fonctionnelle n'est pas bien définie sur $\mathcal{E}(\mathbb{R})$ par la formule (2). Lorsque v est une fonction de $\mathcal{E}(\mathbb{R})$ qui se relève sous la forme $v = \varrho \exp i\varphi$, la quantité

$$\langle iv', v \rangle_{\mathbb{C}} = -\varrho^2 \varphi',$$

est de carré intégrable, mais pas nécessairement intégrable, sur \mathbb{R} . Par contre, la fonction $(1 - \varrho^2)\varphi'$ est intégrable sur \mathbb{R} . Aussi est-il possible de définir le moment par la formule

$$\mathcal{P}(v) \equiv \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} (1 - \varrho^2) \varphi' + \frac{1}{2} \left(\lim_{x \rightarrow -\infty} \varphi(x) - \lim_{y \rightarrow +\infty} \varphi(y) \right), \quad (\text{I.77})$$

au moins lorsque la fonction v appartient à l'ensemble

$$\mathcal{Z}(\mathbb{R}) \equiv \{v \in \mathcal{E}(\mathbb{R}), \text{ t.q. } \lim_{x \rightarrow \pm\infty} v(x) \text{ existe}\}.$$

Ceci suggère de définir le moment scalaire comme l'intégrale impropre

$$\mathcal{P}(v) \equiv \lim_{R \rightarrow +\infty} \frac{1}{2} \int_{-R}^R \langle iv', v \rangle_{\mathbb{C}}. \quad (\text{I.78})$$

La fonctionnelle \mathcal{P} est bien définie sur $\mathcal{Z}(\mathbb{R})$, et les deux formules (I.77) et (I.78) coïncident lorsque v ne s'annule pas sur \mathbb{R} . De plus, lorsque w est une fonction de $H^1(\mathbb{R})$, la quantité $\mathcal{P}(v + w)$ est donnée par

$$\mathcal{P}(v + w) = \mathcal{P}(v) + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} \langle iw', w \rangle_{\mathbb{C}} + \int_{\mathbb{R}} \langle iv', w \rangle_{\mathbb{C}}. \quad (\text{I.79})$$

Cette relation est cruciale. La définition formelle (2) n'apparaît que parce qu'il s'agit de la manière la plus simple de définir une fonctionnelle qui satisfasse, au moins formellement, la propriété (I.79). Toute fonctionnelle qui satisfait la relation (I.79) peut être qualifiée de moment scalaire. Elle vérifiera les deux propriétés qui sont requises ici : être conservée le long du flot de l'équation de Gross-Pitaevskii, et avoir pour différentielle au sens de Gâteaux l'application

$$d\mathcal{P}(v)(w) = \int_{\mathbb{R}} \langle iv', w \rangle_{\mathbb{C}}.$$

Cette interprétation du moment scalaire conduit à une seconde façon de le définir qui s'abstrait de l'existence de limites à l'infini, laquelle est requise par la définition (I.78). Lorsque v est une fonction de $\mathcal{Z}(\mathbb{R})$ qui ne s'annule pas sur \mathbb{R} , et w est une fonction de $H^1(\mathbb{R})$ telle que $v + w$ ne s'annule pas non plus sur \mathbb{R} , les phases des fonctions v et $v + w$ ont des limites identiques en $\pm\infty$. À la vue des formules (I.77) et (I.79), la fonctionnelle p , définie par

$$p(v) \equiv \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} (1 - \varrho^2) \varphi', \quad (\text{I.80})$$

pour une fonction $v = \varrho \exp i\varphi$, vérifie elle-aussi l'identité (I.79). La définition (I.80) présente l'avantage de s'étendre à toutes les fonctions d'énergie finie qui ne s'annulent pas sur \mathbb{R} . Par

contre, elle n'a plus de sens dès lors que v peut s'annuler. Cependant, les formules (I.77) et (I.78) assurent que

$$p(v) = \lim_{R \rightarrow +\infty} \frac{1}{2} \left(\int_{-R}^R \langle iv', v \rangle_{\mathbb{C}} + \varphi_+(R) - \varphi_-(-R) \right). \quad (\text{I.81})$$

Les fonctions φ_{\pm} désignent ici les phases à l'infini de la fonction v . Comme cette fonction est d'énergie finie, elle ne s'annule pas sur des voisinages de $\pm\infty$, et y possède donc des phases φ_{\pm} , qui sont définies modulo 2π .

Il se trouve que la limite dans le membre droit de l'équation (I.81) existe quelle que soit la fonction $v \in \mathcal{E}(\mathbb{R})$ considérée. Elle ne dépend pas modulo π du choix des phases φ_{\pm} . Cette propriété permet de définir le moment $[p]$ sur l'espace d'énergie entier par l'identité

$$[p](v) = \lim_{R \rightarrow +\infty} \frac{1}{2} \left(\int_{-R}^R \langle iv', v \rangle_{\mathbb{C}} + \varphi_+(R) - \varphi_-(-R) \right) \text{ modulo } \pi.$$

La fonctionnelle $[p]$ est alors bien définie et continue pour la distance $d_{A,\mathcal{E}}$ sur l'espace $\mathcal{E}(\mathbb{R})$, à valeurs dans $\mathbb{R}/\pi\mathbb{Z}$. Elle vérifie de plus la propriété (I.79), de sorte qu'elle est conservée par le flot de l'équation de Gross-Pitaevskii.

Pour conclure la preuve du Théorème I.6, il ne reste plus qu'à résoudre le problème de minimisation (I.73), lequel est maintenant bien défini. Tout minimiseur de ce problème est une onde progressive de vitesse σ . Puisque le moment $[p]$ des ondes progressives u_c définies par les formules (3) vaut

$$[p](u_c) = \frac{\pi}{2} - \arctan\left(\frac{c}{\sqrt{2-c^2}}\right) - \frac{c}{2}\sqrt{2-c^2} \text{ modulo } \pi,$$

et que toutes ces valeurs sont différentes modulo π , la seule vitesse possible est $\sigma = 0$. À translation et multiplication par un nombre complexe de module un près, le soliton noir u_0 est donc l'unique minimiseur du problème (I.73).

Par ailleurs, les arguments de concentration-compacité invoquées pour les preuves des Théorèmes I.2 et I.3 garantissent ici aussi la compacité à translation près de toute suite minimisante $(v_n)_{n \in \mathbb{N}}$ du problème (I.73). Quitte à extraire, il existe une suite de nombres réels $(a_n)_{n \in \mathbb{N}}$, ainsi qu'un nombre réel θ , tels que

$$d_{A,\mathcal{E}}(v_n(\cdot - a_n), \exp i\theta u_0(\cdot)) \rightarrow 0,$$

lorsque $n \rightarrow +\infty$. Cette compacité à translation près supplée sans difficulté, la propriété de compacité (I.76) que nous avons invoquée dans l'esquisse précédente. Ainsi avons-nous réuni, certes modulo π , mais ce n'est pas non plus une difficulté, tous les ingrédients pour conclure quant à la stabilité orbitale du soliton noir u_0 par cette approche variationnelle.

La preuve de la Proposition I.3 est de nature différente. Elle repose sur l'interprétation du décalage de phase $a(t)$ en tant que centre de masse de la solution $\Psi(t)$ au temps t , lequel est défini formellement par la relation

$$m(\psi(t)) \equiv \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} x(1 - |\Psi(x,t)|^2) dx.$$

Cette quantité n'est pas conservée par l'équation de Gross-Pitaevskii, mais son évolution est donnée par la formule

$$\frac{d}{dt}(m(\Psi(t))) = 2p(\Psi(t)). \quad (\text{I.82})$$

L'introduction d'une fonction plateau $\chi \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ donne un sens au centre de masse m à travers la formule

$$m_\chi(v) \equiv \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} x\chi(x)(1 - |v(x)|^2) dx.$$

La relation (I.82) n'est plus satisfaite que de manière approchée

$$\frac{d}{dt}(m_\chi(\Psi(t))) = 2 \int_{\mathbb{R}} \partial_x(x\chi(x)) \langle i\partial_x \Psi(x, t), \Psi(x, t) \rangle_{\mathbb{C}} dx. \quad (\text{I.83})$$

Lorsque la solution $\Psi(t)$ est proche à ε près du soliton noir u_0 au sens de la distance $d_{A,\varepsilon}$, la quantité dans le second membre de l'équation (I.83) est contrôlée par le paramètre ε , à un facteur multiplicatif près. La croissance au cours du temps de la quantité $m_\chi(\Psi(t))$ est au plus de l'ordre de $\varepsilon|t|$.

Par ailleurs, lorsque χ est une fonction plateau égale à 1 sur le segment $[-R, R]$, et à 0 en dehors du segment $[-2R, 2R]$, avec R assez grand, la valeur de $m_\chi(u_0)$ est très proche de 0. Celle de $m_\chi(u_0(\cdot - a))$ est donc très proche de a , dès que $|a|$ est négligeable devant R . Lorsque la conclusion (I.71) du Théorème I.6 est vérifiée, le décalage de position $a(t)$ évolue donc au plus comme $\varepsilon|t|$ au cours du temps, et satisfait donc l'inégalité (I.72).

I.3 Le régime ondes longues vers l'équation de Korteweg-de Vries

a. Énoncé des principaux résultats

Rappelons pour commencer que la description du régime ondes longues vers l'équation de Korteweg-de Vries se ramène à l'analyse dans la limite $\varepsilon \rightarrow 0$, des fonctions N_ε^\pm et W_ε^\pm , définies à partir d'une solution $\Psi \equiv \sqrt{\rho} \exp i\varphi$ de l'équation de Gross-Pitaevskii par les changements d'échelles

$$\begin{cases} \rho(x, t) \equiv 1 - \frac{\varepsilon^2}{6} N_\varepsilon^\pm(y^\pm, \tau), \\ v(x, t) = 2\partial_x \varphi(x, t) \equiv \frac{\varepsilon^2}{6\sqrt{2}} W_\varepsilon^\pm(x, t). \end{cases}$$

Les variables lentes y^\pm et τ sont ici données par

$$y^\pm \equiv \varepsilon(x \pm \sqrt{2}t), \text{ et } \tau \equiv \frac{\varepsilon^3}{2\sqrt{2}}t.$$

Les exposants \pm renvoient aux repères mobiles qui se déplacent vers la droite pour les exposants $+$, vers la gauche pour les exposants $-$, à vitesse constante égale à $\sqrt{2}$. Les deux jeux de variables sont équivalents grâce au changement de variables $\tau \mapsto -\tau$. Dans la suite, nous nous limitons aux variables dans le repère qui se déplace vers la gauche. Nous nous contentons d'énoncer la manière dont les résultats pour ce repère s'adaptent à l'autre jeu de variables.

Les fonctions $N_\varepsilon \equiv N_\varepsilon^-$ et $W_\varepsilon \equiv W_\varepsilon^-$ sont solutions des équations (11) et (12). Les fonctions $U_\varepsilon \equiv (N_\varepsilon + W_\varepsilon)/2$ et $V_\varepsilon \equiv (N_\varepsilon - W_\varepsilon)/2$ satisfont les équations (13) et (14). L'objectif de l'analyse est d'établir qu'à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$, les fonctions U_ε sont solutions de l'équation de Korteweg-de Vries. Comme pour les autres régimes asymptotiques du Paragraphe I.1.3, l'analyse commence par la preuve que les solutions N_ε et W_ε sont bien définies, si possible globalement en temps. En collaboration avec F. Béthuel, J.-C. Saut et D. Smets, nous avons vérifié cette affirmation, et fournit des estimations dans tous les espaces $H^k(\mathbb{R})$ des solutions N_ε et W_ε en fonction du paramètre ε et des données initiales N_ε^0 et W_ε^0 .

Théorème I.7 ([16, 17]). *Soit $k \in \mathbb{N}$ et $K_0 \geq 0$. On considère une famille de données initiales N_ε^0 et W_ε^0 telles que*

$$\|N_\varepsilon^0\|_{H^k(\mathbb{R})} + \varepsilon \|\partial_x^{k+1} N_\varepsilon^0\|_{L^2(\mathbb{R})} + \|W_\varepsilon^0\|_{H^k(\mathbb{R})} \leq K_0. \quad (\text{I.84})$$

Pour ε suffisamment petit, il existe un unique couple $(N_\varepsilon, W_\varepsilon) \in \mathcal{C}^0(\mathbb{R}, H^{k+1}(\mathbb{R}) \times H^k(\mathbb{R}))$ de solutions des équations (11) et (12) pour les données initiales N_ε^0 et W_ε^0 . De plus, il existe une

constante positive K , qui ne dépend que de K_0 et k , telle que

$$\forall \tau \in \mathbb{R}, \|N_\varepsilon(\cdot, \tau)\|_{H^k(\mathbb{R})} + \varepsilon \|\partial_x^{k+1} N_\varepsilon(\cdot, \tau)\|_{L^2(\mathbb{R})} + \|W_\varepsilon(\cdot, \tau)\|_{H^k(\mathbb{R})} \leq K \exp K\tau. \quad (\text{I.85})$$

Remarque. Dans les variables N_ε^+ et W_ε^+ , le résultat est identique. Comme $N_\varepsilon^+(0) = N_\varepsilon^-(0) = N_\varepsilon^0$ et $W_\varepsilon^+(0) = W_\varepsilon^-(0) = W_\varepsilon^0$, les estimations (I.85) sont valables simultanément pour les deux jeux de variables N_ε^\pm et W_ε^\pm .

Remarque. L'estimation exponentielle (I.85) n'est pas optimale pour $k \leq 3$. Lorsque $k \leq 3$, la borne exponentielle $K \exp K\tau$ se réduit à une borne constante K uniforme en temps. Cette propriété résulte de l'intégrabilité de l'équation de Gross-Pitaevskii par la méthode du scattering inverse en dimension un. Pour une raison identique, nous pensons que l'estimation (I.85) n'est pas non plus optimale lorsque $k > 4$. L'estimation optimale devrait être uniforme en temps. Une amélioration de l'estimation (I.85) ne modifierait cependant pas le taux de convergence vers l'équation de Korteweg-de Vries donnée par les formules (I.87) et (I.92). Ce taux resterait exponentiel, au moins avec les méthodes d'énergie que nous avons employées pour le calculer.

Notre premier résultat de convergence concerne les données bien préparées. Même si les énoncés diffèrent sur la forme, ce résultat est équivalent à ceux établis simultanément par D. Chiron et F. Rousset [36] en dimension un. Rappelons qu'une donnée est bien préparée lorsque l'un des deux fronts d'ondes U_ε ou V_ε a une valeur initiale négligeable par rapport au paramètre ε . Sous cette hypothèse, l'autre front d'ondes est régi par l'équation de Korteweg-de Vries dans la limite $\varepsilon \rightarrow 0$. Cette observation conduit à l'estimation suivante.

Théorème I.8 ([16, 17]). *Soit $k \in \mathbb{N}$ et $K_0 \geq 0$. On considère une famille de données initiales N_ε^0 et W_ε^0 telles que*

$$\|N_\varepsilon^0\|_{H^{k+5}(\mathbb{R})} + \varepsilon \|\partial_x^{k+6} N_\varepsilon^0\|_{L^2(\mathbb{R})} + \|W_\varepsilon^0\|_{H^{k+5}(\mathbb{R})} \leq K_0, \quad (\text{I.86})$$

et on note \mathcal{N} et \mathcal{W} , les solutions de l'équation de Korteweg-de Vries, respectivement N_ε et W_ε , les solutions des équations (11) et (12), de mêmes données initiales N_ε^0 et W_ε^0 . Il existe des constantes strictement positives ε_1 et K_1 , qui dépendent de K_0 et k , telles que

$$\|N_\varepsilon(\cdot, \tau) - \mathcal{N}(\cdot, \tau)\|_{H^k(\mathbb{R})} + \|W_\varepsilon(\cdot, \tau) - \mathcal{W}(\cdot, \tau)\|_{H^k(\mathbb{R})} \leq K_1(\varepsilon^2 + \|N_\varepsilon^0 - W_\varepsilon^0\|_{H^k(\mathbb{R})}) \exp K_1\tau, \quad (\text{I.87})$$

quels que soient $0 < \varepsilon < \varepsilon_1$ et $\tau \in \mathbb{R}$.

Remarque. Pour les variables N_ε^+ et W_ε^+ , l'estimation équivalente s'écrit sous la forme

$$\|N_\varepsilon^+(\cdot, \tau) - \mathcal{N}^+(\cdot, \tau)\|_{H^k(\mathbb{R})} + \|W_\varepsilon^+(\cdot, \tau) - \mathcal{W}^+(\cdot, \tau)\|_{H^k(\mathbb{R})} \leq K_1(\varepsilon^2 + \|N_\varepsilon^0 + W_\varepsilon^0\|_{H^k(\mathbb{R})}) \exp K_1\tau, \quad (\text{I.88})$$

où \mathcal{N}^+ et \mathcal{W}^+ sont les solutions de l'équation de Korteweg-de Vries

$$\partial_\tau \mathcal{U} - \partial_x^3 \mathcal{U} - \mathcal{U} \partial_x \mathcal{U} = 0, \quad (\text{I.89})$$

pour les données initiales N_ε^0 et W_ε^0 . Les estimations (I.87) et (I.88) ont lieu simultanément, et pour les mêmes constantes ε_1 et K_1 .

Remarque. La perte de six dérivées entre l'hypothèse (I.86) et l'inégalité (I.87) résulte de la façon dont sont estimés les termes présents au second membre des équations (13) et (14), ainsi que de la volonté d'énoncer une borne optimale par rapport au petit paramètre ε . Nous reviendrons sur cette dernière affirmation dans la suite. Il suffit d'interpoler l'inégalité (I.87) avec les inégalités (I.85) pour établir la convergence des fonctions N_ε et W_ε vers les fonctions \mathcal{N} et \mathcal{W} dans les espaces $H^j(\mathbb{R})$ pour $k < j < k + 5$ (au moins lorsque la quantité $\|N_\varepsilon^0 - W_\varepsilon^0\|_{H^k(\mathbb{R})}$ tend vers 0 lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$).

L'estimation (I.87) ne montre la convergence des fonctions N_ε et W_ε vers les solutions \mathcal{N} et \mathcal{W} de l'équation de Korteweg-de Vries que si les données initiales vérifient

$$\|N_\varepsilon^0 - W_\varepsilon^0\|_{H^k(\mathbb{R})} \rightarrow 0, \quad (\text{I.90})$$

lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$. L'approximation est alors valable jusqu'à des temps de l'ordre de

$$T_\varepsilon = \underset{\varepsilon \rightarrow 0}{o} \left(\min \left\{ \frac{|\ln(\varepsilon)|}{\varepsilon^3}, \frac{|\ln(\|N_\varepsilon^0 - W_\varepsilon^0\|_{H^k(\mathbb{R})})|}{\varepsilon^3} \right\} \right),$$

dans la variable de temps originelle t .

Lorsque les données initiales ne vérifient plus la condition (I.90), l'estimation (I.87) n'est pas meilleure que la borne (I.85) du Théorème I.7. Afin de prouver la convergence du front d'ondes U_ε vers l'équation de Korteweg-de Vries à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$, il est nécessaire de quantifier ces interactions avec l'autre front d'ondes V_ε . Un moyen d'y parvenir consiste à localiser, même de manière très faible, les données initiales considérées. Il suffit ainsi de supposer que les données initiales N_ε^0 et W_ε^0 possèdent des primitives bornées, c'est-à-dire qu'elles appartiennent à l'espace $\mathcal{M}(\mathbb{R})$ défini par

$$\mathcal{M}(\mathbb{R}) \equiv \left\{ f \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}), \text{ t.q. } \|f\|_{\mathcal{M}(\mathbb{R})} \equiv \sup_{(a,b) \in \mathbb{R}^2} \left| \int_a^b f(x) dx \right| < +\infty \right\},$$

pour montrer que les fronts d'ondes U_ε satisfont l'équation de Korteweg-de Vries lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$.

Théorème I.9 ([16, 17]). *Soit $k \in \mathbb{N}$ et $K_0 \geq 0$. On considère une famille de données initiales N_ε^0 et W_ε^0 telles que*

$$\|N_\varepsilon^0\|_{\mathcal{M}(\mathbb{R})} + \|W_\varepsilon^0\|_{\mathcal{M}(\mathbb{R})} + \|N_\varepsilon^0\|_{H^{k+5}(\mathbb{R})} + \varepsilon \|\partial_x^{k+6} N_\varepsilon^0\|_{L^2(\mathbb{R})} + \|W_\varepsilon^0\|_{H^{k+5}(\mathbb{R})} \leq K_0. \quad (\text{I.91})$$

On note \mathcal{U} , la solution de l'équation de Korteweg-de Vries pour la donnée initiale $U_\varepsilon^0 = (N_\varepsilon^0 + W_\varepsilon^0)/2$, et on pose $U_\varepsilon = (N_\varepsilon + W_\varepsilon)/2$, où N_ε et W_ε sont les solutions des équations (11) et (12) pour les données initiales N_ε^0 et W_ε^0 . Il existe des constantes strictement positives ε_2 et K_2 , qui dépendent de K_0 et k , telles que

$$\forall 0 < \varepsilon < \varepsilon_2, \forall \tau \in \mathbb{R}, \|U_\varepsilon(\cdot, \tau) - \mathcal{U}(\cdot, \tau)\|_{H^k(\mathbb{R})} \leq K_2 \varepsilon^2 \exp K_2 \tau. \quad (\text{I.92})$$

Remarque. Pour la variable V_ε^+ , l'estimation équivalente s'écrit

$$\|V_\varepsilon^+(\cdot, \tau) - \mathcal{V}(\cdot, \tau)\|_{H^k(\mathbb{R})} \leq K_2 \varepsilon^2 \exp K_2 \tau, \quad (\text{I.93})$$

où $V_\varepsilon^+ \equiv (N_\varepsilon^+ - W_\varepsilon^+)/2$, et \mathcal{V}^+ est solution de l'équation de Korteweg-de Vries (I.89) pour la donnée initiale $V_\varepsilon^0 = (N_\varepsilon^0 - W_\varepsilon^0)/2$. Les estimations (I.92) et (I.93) ont lieu simultanément, et pour les mêmes constantes ε_2 et K_2 .

Remarque. Comme pour le Théorème I.8, la perte de six dérivées entre l'hypothèse (I.91) et l'inégalité (I.92) peut se récupérer en interpolant cette dernière inégalité avec les estimations (I.85).

L'estimation (I.87) montre que l'approximation par l'équation de Korteweg-de Vries est valable jusqu'à des temps de l'ordre de

$$T_\varepsilon = \underset{\varepsilon \rightarrow 0}{o} \left(\frac{|\ln(\varepsilon)|}{\varepsilon^3} \right),$$

dans la variable de temps originelle t . Dans les mêmes conditions, c'est-à-dire pour des données initiales $a_\varepsilon^0 \equiv \varepsilon N_\varepsilon^0$ et $v_\varepsilon^0 \equiv \varepsilon W_\varepsilon^0$, l'estimation (I.17), établie par F. Béthuel, R. Danchin et D. Smets [11] pour l'approximation vers l'équation des ondes libres, s'écrit

$$\|a_\varepsilon(\cdot, \varepsilon t) - \mathbf{a}(\cdot, \varepsilon t)\|_{H^{s-2}(\mathbb{R}^N)} + \|v_\varepsilon(\cdot, \varepsilon t) - \mathbf{v}(\cdot, \varepsilon t)\|_{H^{s-2}(\mathbb{R}^N)} \leq K\varepsilon^3 t. \quad (\text{I.94})$$

La comparaison entre les estimations (I.92) et (I.94) confirme que l'approximation par l'équation de Korteweg-de Vries n'est pas valable sur des temps beaucoup plus longs que celle par l'équation des ondes libres, avec un gain seulement de l'ordre de $|\ln(\varepsilon)|$. L'approximation par l'équation de Korteweg-de Vries prend par contre le pas sur celle par l'équation des ondes libres dès que le temps originel t est de l'ordre de $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$. Sous les hypothèses du Théorème I.9, les solutions convenablement mises à l'échelle de l'équation de Gross-Pitaevskii se comportent d'abord essentiellement comme l'équation des ondes libres, puis chacun des deux fronts d'ondes ainsi créés évolue suivant une équation de Korteweg-de Vries.

Les estimations (I.87) et (I.92) sont optimales, au sens où le facteur ε^2 au second membre de ces inégalités est le meilleur possible. Il suffit de considérer comme données initiales N_ε^0 et W_ε^0 , les quantités associées aux solitons u_c donnés par la formule (3) pour vérifier cette affirmation. Si le paramètre ε est fixé de sorte que $\varepsilon^2 = 2 - c^2$, les fonctions N_ε^0 et W_ε^0 valent

$$N_\varepsilon^0 = N^0 \text{ et } W_\varepsilon^0 = \sqrt{1 - \frac{\varepsilon^2}{2}} \frac{N^0}{1 - \frac{\varepsilon^2}{6} N^0},$$

où N^0 est le soliton de vitesse 1 de l'équation de Korteweg-de Vries

$$N^0(x) = \frac{3}{\text{ch}^2\left(\frac{x}{2}\right)}.$$

Comme les solitons u_c sont translatés à vitesse constante c par le flot de l'équation de Gross-Pitaevskii, l'évolution des solutions N_ε et W_ε de données initiales N_ε^0 et W_ε^0 vaut simplement

$$N_\varepsilon(y, \tau) = N^0\left(y - \frac{4}{\varepsilon^2} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{\varepsilon^2}{2}}\right) \tau\right),$$

et

$$W_\varepsilon(y, \tau) = W_\varepsilon^0\left(y - \frac{4}{\varepsilon^2} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{\varepsilon^2}{2}}\right) \tau\right).$$

Quant à la solution \mathcal{N} de l'équation de Korteweg-de Vries de donnée initiale N^0 , elle est égale à

$$\mathcal{N}(y, \tau) = N^0(y - \tau).$$

La différence entre les solutions N_ε et \mathcal{N} s'estime par l'inégalité

$$\|N_\varepsilon(\cdot, \tau) - \mathcal{N}(\cdot, \tau)\|_{L^2(\mathbb{R})} \approx K\varepsilon^2 |\tau|,$$

lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, où K est une constante indépendante de ε . Il en va de même pour les quantités W_ε et U_ε . Le facteur ε^2 dans les inégalités (I.87) et (I.92) ne peut être amélioré. Ce n'est sans doute pas le cas de la croissance exponentielle en temps. Elle est néanmoins inhérente aux méthodes d'énergie sur lesquelles repose les inégalités (I.87) et (I.92), et qu'il est maintenant temps de détailler.

b. Quelques éléments des preuves des Théorèmes I.8 et I.9

L'analyse du régime ondes longues vers l'équation de Korteweg-de Vries se décompose en deux étapes. Il s'agit d'abord de dériver les estimations (I.85) des solutions N_ε et W_ε des équations (11) et (12). Ces estimations servent ensuite à contrôler les termes au second membre de l'équation (13) de manière à obtenir les convergences (I.87) ou (I.92).

Les estimations (I.85) reposent sur deux arguments de nature différente. Pour les exposants $k \leq 3$, elles découlent de l'intégrabilité de l'équation de Gross-Pitaevskii par la méthode du scattering inverse en dimension un. Pour les exposants supérieurs, elles résultent de l'estimation d'énergie (I.16) calculée par F. Béthuel, R. Danchin et D. Smets [11] dans le cas de l'équation des ondes libres.

En sus des propriétés déjà évoquées au Paragraphe I.2.3, la méthode du scattering inverse fournit l'existence, au moins formelle, d'une infinité de quantités intégrales $(I_n)_{n \in \mathbb{N}}$, qui sont invariantes le long du flot de l'équation de Gross-Pitaevskii (voir l'article de V.E. Zakharov et A.B. Shabat [140]). Lorsque Ψ désigne une solution de l'équation de Gross-Pitaevskii, les fonctions $(f_n(\Psi))_{n \in \mathbb{N}}$ définies par les formules de récurrence

$$f_1(\Psi) \equiv -\frac{1}{2}|\Psi|^2,$$

et

$$f_{n+1}(\Psi) \equiv \overline{\Psi} \partial_x \left(\frac{f_n(\Psi)}{\Psi} \right) + \sum_{j=1}^{n-1} f_j(\Psi) f_{n-j}(\Psi),$$

satisfont des lois de conservations scalaires de la forme

$$\partial_t f_n(\Psi) = \partial_x g_n(\Psi).$$

Au moins formellement, les quantités intégrales

$$I_n(\Psi) \equiv \int_{\mathbb{R}} f_n(\Psi)$$

sont conservées le long du flot de l'équation de Gross-Pitaevskii. Une première difficulté survient du fait que les fonctions $f_n(\Psi)$ ne sont en général pas intégrables lorsque Ψ est d'énergie finie. C'est le cas de la quantité $f_1(\Psi)$, qui vaut $-1/2$ en dehors d'un segment $[a, b]$, lorsque Ψ est une fonction d'énergie finie, constante en dehors de $[a, b]$.

Au moins pour les indices n inférieurs ou égaux à quatre, il est possible de renormaliser les quantités $I_n(\Psi)$, en prenant des combinaisons linéaires de ces quantités, de façon à obtenir deux familles d'invariants intégraux E_n et p_n bien définis dans l'espace d'énergie $\mathcal{E}(\mathbb{R})$. Les quantités E_n sont des équivalents d'ordre n de l'énergie de Ginzburg-Landau E , qui est égale à E_1 . Les quantités p_n sont des analogues d'ordre supérieur du moment scalaire p , qui vaut identiquement p_1 . Les énergies $E_n(\Psi)$ contrôlent la norme H^{n-1} de la dérivée Ψ' . Aussi les solutions Ψ sont-elles contrôlées de manière uniforme en temps dans les espaces d'énergie d'ordre n définis par

$$\mathcal{E}^n(\mathbb{R}) \equiv \mathcal{E}(\mathbb{R}) \cap \mathcal{Z}^n(\mathbb{R}).$$

Lorsqu'une donnée initiale Ψ_0 appartient à $\mathcal{E}^n(\mathbb{R})$, la solution associée Ψ demeure dans l'espace $\mathcal{E}^n(\mathbb{R})$. Il existe une constante K , qui ne dépend que de la norme $\|\Psi_0\|_{\mathcal{Z}^n(\mathbb{R})}$, telle que

$$\forall t \in \mathbb{R}, \quad \|\Psi(\cdot, t)\|_{\mathcal{Z}^n(\mathbb{R})} \leq K.$$

Cette propriété demeure après les changements d'échelles (10). Pour $n \leq 4$, les énergies E_n et les moments p_n vérifient la relation

$$E_n(N_\varepsilon, W_\varepsilon) \pm \sqrt{2}p_n(N_\varepsilon, W_\varepsilon) = \frac{\varepsilon^{2n+1}}{18} \left(E_{n-1}^{\text{KdV}} \left(\frac{N_\varepsilon \pm W_\varepsilon}{2} \right) + o_{\varepsilon \rightarrow 0}(1) \right). \quad (\text{I.95})$$

Dans cette équation, la quantité E_{n-1}^{KdV} désigne l'invariant d'ordre $n-1$ de l'équation de Korteweg-de Vries. La fonctionnelle E_0^{KdV} est, à un facteur $1/2$ près, la masse L^2 , tandis que E_1^{KdV} est le hamiltonien de l'équation de Korteweg-de Vries donné par

$$E_1^{\text{KdV}}(v) \equiv \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} (v')^2 - \frac{1}{6} \int_{\mathbb{R}} v^3.$$

Lorsque deux données initiales N_ε^0 et W_ε^0 vérifient les hypothèses (I.84) pour $k = n-1$, la quantité $E_{n-1}^{\text{KdV}}(N_\varepsilon^0 \pm W_\varepsilon^0)/2$ est bornée par une constante K , qui ne dépend que de K_0 . Quant aux quantités $E_n(N_\varepsilon, W_\varepsilon) \pm \sqrt{2}p_n(N_\varepsilon, W_\varepsilon)$, elles sont conservées par le flot associé aux équations (11) et (12), lesquelles ne sont que la traduction de l'équation de Gross-Pitaevskii dans les variables N_ε et W_ε . Il s'ensuit que

$$\left| E_{n-1}^{\text{KdV}} \left(\frac{N_\varepsilon(\cdot, t) \pm W_\varepsilon(\cdot, t)}{2} \right) \right| \leq A \left| E_{n-1}^{\text{KdV}} \left(\frac{N_\varepsilon^0 \pm W_\varepsilon^0}{2} \right) \right| \leq AK.$$

De manière similaire aux énergies E_n , les invariants E_{n-1}^{KdV} contrôlent les normes H^{n-1} . Aussi l'inégalité précédente assure-t-elle un contrôle uniforme en temps des fonctions N_ε et W_ε dans les espaces $H^k(\mathbb{R})$ pour $k \leq 3$. Une telle propriété demeure sans doute pour les exposants plus grands, mais sa preuve nécessite la renormalisation de tous les invariants I_n , puis leur mise à l'échelles dans les variables N_ε et W_ε , afin de vérifier la relation (I.95), qui est le coeur de l'argument précédent. Bien que ceci occasionne l'apparition d'une divergence exponentielle en temps, qui n'affecte d'ailleurs en rien les convergences (I.87) et (I.92), nous avons préféré étendre les estimations (I.85) aux exposants k plus grands par des méthodes d'énergie.

Nous nous sommes en fait contentés d'adapter les estimations d'énergie obtenues par F. Béthuel, R. Danchin et D. Smets [11] dans le cadre du régime ondes longues vers l'équation des ondes libres. Les variables a_ε et v_ε associées à ce dernier régime s'expriment en fonction des variables N_ε et W_ε sous la forme

$$\begin{cases} a_\varepsilon(y, s) \equiv -\frac{\varepsilon}{3\sqrt{2}} N_\varepsilon \left(y + \sqrt{2}s, \frac{\varepsilon^2}{2\sqrt{2}}s \right), \\ v_\varepsilon(y, s) \equiv \frac{\varepsilon}{6\sqrt{2}} W_\varepsilon \left(y + \sqrt{2}s, \frac{\varepsilon^2}{2\sqrt{2}}s \right). \end{cases}$$

Toute estimation d'énergie des variables a_ε et v_ε fournit une estimation pour les variables N_ε et W_ε . En particulier, l'inégalité (I.16) sur les quantités $\Gamma^k(b_\varepsilon, z_\varepsilon)$ s'écrit dans les variables N_ε et W_ε ,

$$\gamma_\varepsilon^k(\tau) \leq \gamma_\varepsilon^k(0) \exp \left| \int_0^\tau \mathcal{A}_\varepsilon(s) ds \right| + \frac{18}{\varepsilon^3} E(\Psi_0) \left(\exp \left| \int_0^\tau \mathcal{A}_\varepsilon(s) ds \right| - 1 \right). \quad (\text{I.96})$$

Dans cette formule, γ_ε^k désigne l'expression de la quantité $\Gamma^k(b_\varepsilon, z_\varepsilon)$ dans les variables N_ε et W_ε , laquelle vaut

$$\gamma_\varepsilon^k \equiv \left\| \partial_x^k N_\varepsilon \right\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + \left\| M_\varepsilon^{\frac{1}{2}} \partial_x^k Y_\varepsilon \right\|_{L^2(\mathbb{R})}^2,$$

où $M_\varepsilon \equiv 1 - \varepsilon^2 N_\varepsilon/6$ et $Y_\varepsilon \equiv W_\varepsilon + i\varepsilon \partial_x N_\varepsilon / \sqrt{2} M_\varepsilon$. Quant à la fonction \mathcal{A}_ε , elle est définie par

$$\mathcal{A}_\varepsilon \equiv K(1 + \varepsilon \|N_\varepsilon\|_{L^\infty}) (\|\partial_x N_\varepsilon\|_{L^\infty} + \|\partial_x Y_\varepsilon\|_{L^\infty}),$$

où K est une constante qui ne dépend que de k . Comme les fonctions N_ε et W_ε sont uniformément bornées en temps dans l'espace $H^3(\mathbb{R})$, la fonction \mathcal{A}_ε est uniformément bornée en temps dans l'espace $\mathcal{C}^1(\mathbb{R})$. D'après la formule (I.96), les quantités γ_ε^k sont donc contrôlées de manière au plus exponentielle en temps, ce qui conduit aux estimations (I.85), puisque les quantités γ_ε^k contrôlent, à leur tour, les normes H^k des fonctions N_ε et W_ε .

La preuve des inégalités (I.87) et (I.92) repose elle-aussi sur des estimations d'énergie. La différence Z_ε entre la solution U_ε de l'équation (13) et la solution \mathcal{U} de l'équation de Korteweg-de Vries de même donnée initiale U_ε^0 satisfait l'équation

$$\partial_\tau Z_\varepsilon + \partial_x^3 Z_\varepsilon + \mathcal{U} \partial_x Z_\varepsilon + Z_\varepsilon \partial_x \mathcal{U} + Z_\varepsilon \partial_x Z_\varepsilon = \partial_x F_\varepsilon - \varepsilon^2 \partial_x R_\varepsilon,$$

dans laquelle les fonctions F_ε et R_ε sont données par les formules (15) et (16). Étant donné un entier $k \in \mathbb{N}$, la quantité

$$\mathcal{Z}_\varepsilon^k(\tau) \equiv \int_0^\tau \int_{\mathbb{R}} (\partial_x^k Z_\varepsilon)^2,$$

est donc solution de l'équation

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \partial_\tau \mathcal{Z}_\varepsilon^k(\tau) = & - \int_0^\tau \int_{\mathbb{R}} \partial_x^{k+1} (\mathcal{U} Z_\varepsilon) \partial_x^k Z_\varepsilon - \frac{1}{2} \int_0^\tau \int_{\mathbb{R}} \partial_x^{k+1} (Z_\varepsilon^2) \partial_x^k Z_\varepsilon \\ & + \int_0^\tau \int_{\mathbb{R}} \partial_x^{k+1} F_\varepsilon \partial_x^k Z_\varepsilon - \varepsilon^2 \int_0^\tau \int_{\mathbb{R}} \partial_x^{k+1} R_\varepsilon \partial_x^k Z_\varepsilon. \end{aligned} \quad (\text{I.97})$$

La démonstration de l'inégalité (I.87) se ramène à contrôler les termes au second membre de l'identité (I.97), de façon à obtenir une inégalité de la forme

$$\partial_\tau \mathcal{Z}_\varepsilon^k(\tau) \leq K \left(\text{sign}(\tau) \mathcal{Z}_\varepsilon^k(\tau) + \varepsilon^4 \exp K|\tau| \right), \quad (\text{I.98})$$

où K est une constante qui ne dépend que de k et K_0 . Il suffit ensuite d'appliquer le lemme de Gronwall à l'inégalité (I.98) pour obtenir l'estimation (I.87).

L'expression (I.92) se prouve de manière similaire. Sous les hypothèses du Théorème I.8, l'inégalité (I.98) reste vraie si le facteur ε^4 dans son second membre est remplacé par un facteur $\varepsilon^4 + \|N_\varepsilon^0 + W_\varepsilon^0\|_{H^k(\mathbb{R})}^2$. Cette modification est à l'origine de la différence entre les inégalités (I.87) et (I.92).

Le passage de l'identité (I.97) à l'inégalité (I.98) se fait par récurrence sur l'entier k . Les fonctions U_ε et V_ε dans les définitions de Z_ε , F_ε et R_ε sont bornées par les estimations (I.85). Les invariants E_n^{KdV} de l'équation de Korteweg-de Vries permettent de contrôler de manière uniforme en temps, la solution \mathcal{U} de l'équation de Korteweg-de Vries de donnée initiale U_ε^0 dans les espaces $H^k(\mathbb{R})$, dès que U_ε^0 appartient à ces espaces. Ces deux arguments suffisent à estimer les premier, second et quatrième termes du second membre de l'identité (I.97) pour lesquels l'hypothèse de récurrence ou la présence d'un facteur ε^2 permet d'obtenir le facteur ε^4 de l'inégalité (I.98).

Pour le troisième terme, qui est donné par

$$\int_0^\tau \int_{\mathbb{R}} \partial_x^{k+1} F_\varepsilon \partial_x^k Z_\varepsilon = I_\varepsilon(\tau) + J_\varepsilon(\tau),$$

où

$$I_\varepsilon(\tau) \equiv \int_0^\tau \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{1}{6} \partial_x^{k+1} (V_\varepsilon^2) - \partial_x^{k+3} V_\varepsilon + \frac{1}{3} \sum_{j=0}^k C_{k+1}^j \partial_x^j U_\varepsilon \partial_x^{k+1-j} V_\varepsilon \right) \partial_x^k Z_\varepsilon,$$

et

$$J_\varepsilon(\tau) \equiv \frac{1}{3} \int_0^\tau \int_{\mathbb{R}} \partial_x^{k+1} U_\varepsilon V_\varepsilon \partial_x^k Z_\varepsilon,$$

cet argument ne suffit plus. Faire apparaître un facteur ε^4 requiert d'invoquer l'équation (14), qui s'écrit également sous la forme

$$\partial_x V_\varepsilon = \frac{\varepsilon^2}{8} \left(-\partial_\tau V_\varepsilon + \partial_x G_\varepsilon + \varepsilon^2 \partial_x R_\varepsilon \right). \quad (\text{I.99})$$

Dès qu'apparaît une dérivée de V_ε , il suffit de remplacer cette dérivée par la formule (I.99) pour obtenir un gain d'un facteur ε^2 . Quitte à appliquer deux fois cet argument, et à intégrer en temps et en espace, ceci permet de contrôler tous les termes dans l'expression de I_ε par un facteur ε^4 comme requis par l'inégalité (I.98).

Reste à évaluer la quantité J_ε qui ne dépend que de la fonction V_ε , et non plus de ses dérivées. Deux alternatives sont possibles, lesquelles conduisent aux deux résultats de convergence (I.87) et (I.92). Pour des données bien préparées, au sens où la quantité $\|V_\varepsilon^0\|_{H^k(\mathbb{R})}$ tend vers 0 lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, il suffit d'appliquer à nouveau des méthodes d'énergie à l'équation (I.99) pour obtenir l'estimation

$$\forall \tau \in \mathbb{R}, \quad \|V_\varepsilon(\cdot, \tau)\|_{H^k(\mathbb{R})} \leq K (\|V_\varepsilon^0\|_{H^k(\mathbb{R})} + \varepsilon^2) \exp K |\tau|.$$

L'inégalité (I.98), où le facteur $\varepsilon^4 + \|V_\varepsilon^0\|_{H^k(\mathbb{R})}^2$ remplace le facteur ε^4 , est une conséquence directe de cette estimation.

Lorsque les données ne sont plus bien préparées, il demeure permis d'introduire une primitive Υ_ε de la fonction V_ε . Cette primitive satisfait l'équation

$$\partial_\tau \Upsilon_\varepsilon + \frac{8}{\varepsilon^2} \partial_x \Upsilon_\varepsilon = G_\varepsilon + \varepsilon^2 R_\varepsilon - G_\varepsilon(-R) - \varepsilon^2 R_\varepsilon(-R) + \frac{8}{\varepsilon^2} V_\varepsilon(-R), \quad (\text{I.100})$$

où le nombre R est choisi suffisamment grand pour que les termes qui en dépendent soient négligeables de manière indépendante de ε . Le remplacement de la fonction V_ε par la dérivée $\partial_x \Upsilon_\varepsilon$ dans la fonctionnelle J_ε fait aussi gagner un facteur ε^2 , lequel est suffisant pour notre propos, à condition que toutes les quantités dans la formule (I.100) puissent être bornées.

C'est ici que réside la dernière difficulté de la preuve. À ce stade, nous n'avons aucune borne sur les primitives Υ_ε . Pour en obtenir une, il suffit de se placer dans l'espace $\mathcal{M}(\mathbb{R})$ des primitives bornées, puis de faire appel au dernier invariant de l'équation de Gross-Pitaevskii, l'invariant I_1 formellement défini comme

$$I_1(\Psi) \equiv \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} (1 - |\Psi|^2),$$

et qui correspond à la masse L^2 . Comme la fonction $1 - |\Psi|^2$ n'est en général pas intégrable sur \mathbb{R} , mais seulement de carré intégrable, cet invariant n'a a priori pas de sens. Par contre, il peut se définir de manière rigoureuse comme une intégrale impropre. Les deux quantités

$$m^\pm(\Psi) = \frac{1}{2} \left(\limsup_{x \rightarrow +\infty} (\inf) \int_0^x (1 - |\Psi|^2) + \limsup_{y \rightarrow -\infty} (\inf) \int_y^0 (1 - |\Psi|^2) \right),$$

lorsqu'elles sont définies à l'instant initial, sont en effet conservées le long du flot de l'équation de Gross-Pitaevskii. Lorsqu'elles sont de plus égales à l'instant initial, la notion de masse peut se définir de manière rigoureuse par la formule

$$m(\Psi(\cdot, t)) \equiv m^+(\Psi(\cdot, t)) = m^-(\Psi(\cdot, t)).$$

Cette quantité est alors conservée le long du flot de l'équation de Gross-Pitaevskii.

Malencontreusement, cette quantité ne contrôle pas la norme $\|\cdot\|_{\mathcal{M}(\mathbb{R})}$ de la fonction $1 - |\Psi|^2$, donc après changement d'échelles, la norme uniforme de la primitive Υ_ε . Cependant, la preuve de

la conservation des quantités m^\pm passe par la démonstration que l'équation de Gross-Pitaevskii est bien posée dans l'espace

$$\mathcal{E}_{\mathcal{M}}(\mathbb{R}) \equiv \{\psi \in \mathcal{E}(\mathbb{R}), \text{ t.q. } 1 - |\psi|^2 \in \mathcal{M}(\mathbb{R})\}.$$

En particulier, la norme $\|1 - |\Psi|^2\|_{\mathcal{M}(\mathbb{R})}$ est bornée de manière affine en temps. Dans les variables convenablement mises à l'échelle, cette borne affine se transpose en l'inégalité

$$\|\Upsilon_\varepsilon(\cdot, \tau)\|_{L^\infty(\mathbb{R})} = \|V_\varepsilon(\cdot, \tau)\|_{\mathcal{M}(\mathbb{R})} \leq K \left(\|N_\varepsilon^0\|_{\mathcal{M}(\mathbb{R})} + \|W_\varepsilon^0\|_{\mathcal{M}(\mathbb{R})} + |\tau| \right),$$

dernier ingrédient dans la preuve de l'inégalité (I.98), ainsi que dans cette description succincte des preuves des Théorèmes I.8 et I.9.

Chapitre II

Le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock

Ce chapitre est consacré à l'analyse du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock. Après avoir rappelé les premiers résultats mathématiques au sujet de ce modèle, nous nous concentrerons sur l'existence des états fondamentaux à N électrons pour le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit, puis sur la renormalisation de leur charge, et le calcul d'un développement asymptotique de la densité de charges du vide polarisé par rapport au petit paramètre α_{ph} . Avant de s'attaquer à ces deux points, commençons par préciser la nature des approximations qui conduisent au modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock à partir de l'électrodynamique quantique.

II.1 Introduction

II.1.1 La dérivation du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock

P. Chaix et D. Iracane [30, 29] (voir également l'article de revue de C. Hainzl, M. Lewin, É. Séré et J.-P. Solovej [80]) ont introduit le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock comme une approximation de type Hartree-Fock de l'électrodynamique quantique. Cette approximation cherche à décrire l'état électronique fondamental occupé par des électrons relativistes, de type Hartree-Fock, qui interagissent avec le vide polarisé, et qui sont soumis à un champ extérieur électrostatique créé par une densité de charges ν . Il ne s'agit pas de décrire tous les effets prédits par l'électrodynamique quantique, mais plutôt de construire un modèle variationnel, de type Hartree-Fock, qui soit consistant sur le plan mathématique, et qui décèle, de manière non perturbative, les phénomènes décrits par l'électrodynamique quantique (dans la mesure des interactions prises en compte par le modèle). En principe, cette formulation variationnelle a pour avantage de faciliter le calcul numérique de l'état électronique associée à la densité de charges ν .

Le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock se dérive formellement à partir du hamiltonien, lui-aussi formel, \mathbb{H} , de l'électrodynamique quantique. Dans la jauge de Coulomb, et dans des unités physiques telles que les constantes \hbar , $4\pi\epsilon_0$ et c soient égales à 1, ce hamiltonien s'écrit

$$\begin{aligned} \mathbb{H}(\Psi) = & \int \Psi^*(x) \left(\boldsymbol{\alpha} \cdot (-i\nabla - A_{\text{pho}}(x) - A_{\text{ext}}(x)) + m\boldsymbol{\beta} \right) \Psi(x) dx + \int V_{\text{ext}}(x) \rho_{\Psi}(x) dx \\ & + \frac{\alpha}{2} \int \int \frac{\rho_{\Psi}(x) \rho_{\Psi}(y)}{|x-y|} dx dy + \frac{1}{8\pi\alpha} \int \left(|\nabla \times A_{\text{pho}}(x)|^2 + |E_{\text{pho}}(x)|^2 \right) dx. \end{aligned} \quad (\text{II.1})$$

Il agit sur l'espace de Fock

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_e \otimes \mathcal{F}_p,$$

où \mathcal{F}_e désigne l'espace de Fock fermionique des électrons, et \mathcal{F}_p , l'espace de Fock bosonique des photons. Dans cette formule, $\Psi(x)$ renvoie à l'opérateur de champs en seconde quantification,

qui annihile un électron en x . L'opérateur de densité ρ_Ψ est défini par

$$\rho_\Psi(x) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma=1}^4 \left(\Psi^*(x)_\sigma \Psi(x)_\sigma - \Psi(x)_\sigma \Psi^*(x)_\sigma \right).$$

Le champ électromagnétique externe est représenté par les potentiels électrostatiques V_{ext} , et magnétiques A_{ext} , tandis que E_{pho} et A_{pho} désignent les opérateurs de champs électromagnétiques des photons. Le premier terme au second membre de la formule (II.1) décrit l'énergie cinétique des électrons, ainsi que leurs interactions avec le champ A_{ext} et les photons. Le second terme prend en compte les interactions électrostatiques entre les électrons et le potentiel extérieur V_{ext} , tandis que le troisième tient compte des interactions coulombiennes propres des électrons. Le dernier terme correspond à l'énergie cinétique propre des photons.

L'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock se déduit du hamiltonien \mathbb{H} à travers deux approximations. La première néglige le rôle joué par les photons, et se restreint au cas où le champ magnétique externe est nul, ce qui revient à poser $A_{ext} = A_{pho} = E_{pho} = 0$. Cette première approximation est préjudiciable dans la mesure où les interactions entre électrons et photons sont primordiales afin de rendre compte de la structure électronique autour d'une densité de charges ν . Elles expliquent des phénomènes tels que le décalage de Lamb des niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène. L'introduction des photons dans le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock est possible, au moins formellement, mais elle soulève des difficultés mathématiques. Il s'agit cependant d'une direction naturelle dans laquelle étendre les résultats mathématiques mentionnés dans la suite.

La seconde approximation est de type Hartree-Fock. Les états électroniques de type Hartree-Fock sont les états $|\Omega_P\rangle$ de l'espace fermionique \mathcal{F}_e qui sont déterminés par la donnée de leur matrice de densité à un corps

$$P(x, y)_{\sigma, \tau} = \langle \Omega_P | \Psi^*(x)_\sigma \Psi(y)_\tau | \Omega_P \rangle. \quad (\text{II.2})$$

Lorsque $\Psi = \Psi_1 \wedge \dots \wedge \Psi_N$ désigne un état Hartree-Fock de rang N , la matrice P est comme auparavant égale à

$$P(x, y) \equiv \sum_i^N \Psi_i(x) \Psi_i(y)^*.$$

Cette expression se généralise à des états Hartree-Fock de rang infini, en remplaçant la somme finie par une série. Après une première renormalisation, au moins formelle, de la formule (II.1), l'énergie d'un état électronique $|\Omega_P\rangle \otimes |0\rangle$ de ce type vaut

$$\langle 0 | \otimes \langle \Omega_P | \mathbb{H} | \Omega_P \rangle \otimes | 0 \rangle = E_V^{rHF}(\Gamma) + K.$$

Dans cette expression, la constante de renormalisation K est infinie lorsque le volume de l'espace dans lequel est confiné le système est infini. L'opérateur Γ est la matrice de densité renormalisée à un corps,

$$\Gamma(x, y)_{\sigma, \tau} = \frac{1}{2} \langle \Omega_P | \Psi^*(x)_\sigma \Psi(y)_\tau - \Psi(y)_\tau \Psi^*(x)_\sigma | \Omega_P \rangle. \quad (\text{II.3})$$

Cette matrice est reliée à la matrice de densité à un corps P par la formule

$$P = \Gamma + \frac{1}{2} Id. \quad (\text{II.4})$$

L'énergie de Hartree-Fock de la matrice de densité renormalisée à un corps Γ est définie par

$$\mathcal{E}_{V_{ext}}^{rHF}(\Gamma) = \text{tr}(D^0 \Gamma) + \int V_{ext}(x) \rho_\Gamma(x) dx + \frac{\alpha}{2} \int \int \frac{\rho_\Gamma(x) \rho_\Gamma(y)}{|x-y|} dx dy - \frac{\alpha}{2} \int \int \frac{|\Gamma(x, y)|^2}{|x-y|} dx dy. \quad (\text{II.5})$$

Dans la formule (II.5), l'opérateur de Dirac $D^0 \equiv -i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + m\boldsymbol{\beta}$ tient compte de la masse m de l'électron. L'opérateur de densité de l'état électronique $|\Omega_P\rangle$ est donné par l'identité

$$\rho_\Gamma(x) \equiv \langle \Omega_P | \rho_\Psi(x) | \Omega_P \rangle.$$

Le premier terme du second membre de la formule (II.5) est l'énergie cinétique des électrons, le second terme, leur énergie d'interaction avec le potentiel extérieur V_{ext} . Quand ce potentiel décrit une interaction coulombienne avec une densité de charges ν , la fonction V_{ext} vaut

$$V_{ext}(x) \equiv -\alpha \int \frac{\nu(y)}{|x-y|} dy.$$

Comme dans le cas non relativiste, les deux derniers termes de la formule (II.5) décrivent les interactions électrostatiques directes et d'échange.

De manière analogue au cas non relativiste, les points critiques de l'énergie (II.5) sont solutions de l'équation auto-consistante

$$[P, D^\Gamma] \equiv PD^\Gamma - D^\Gamma P = 0,$$

où D^Γ désigne l'opérateur de Fock associé à Γ , soit l'opérateur

$$D^\Gamma = D^0 + V_{ext} + \alpha \rho_\Gamma * \frac{1}{|x|} - \alpha \frac{\Gamma(x, y)}{|x-y|}. \quad (\text{II.6})$$

Un minimiseur Γ de l'énergie (II.5) satisfait de plus l'équation

$$P = \chi_{(-\infty, 0]}(D^\Gamma).$$

L'interprétation est celle de la mer de Dirac. Les électrons virtuels du vide polarisé, représentés par le projecteur P , remplissent tous les niveaux d'énergie de l'opérateur D^Γ . De manière similaire, un minimiseur Γ_N dans un secteur de charge $-Ne$, c'est-à-dire sous la contrainte $\text{tr}(\Gamma_N) = N$, vérifie l'équation

$$P_N = \chi_{]-\infty, \mu_N]}(D^{\Gamma_N}),$$

où μ_N est le niveau de Fermi de l'état électronique $|\Omega_{P_N}\rangle$. L'opérateur de Fock D^{Γ_N} est donné par la formule (II.6). Le projecteur $P_N^- \equiv \chi_{]-\infty, 0]}(D^{\Gamma_N})$ décrit le vide polarisé par le potentiel extérieur V_{ext} et les N électrons, lesquels sont eux-même représentés par le projecteur $\gamma_N \equiv \chi_{]0, \mu_N]}(D^{\Gamma_N})$ et remplissent donc tous les niveaux d'énergie positifs inférieurs à μ_N .

La différence essentielle avec le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock tient au fait qu'à travers la matrice de densité renormalisée à un corps Γ , l'énergie $E_{V_{ext}}^{rHF}$ n'est pas définie à partir d'une référence donnée par le vide libre P_-^0 . Ce n'est que lors de la dérivation du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock qu'apparaît cette référence, laquelle est à la base de la consistance mathématique de ce modèle. Au contraire, les différents termes de l'énergie $E_{V_{ext}}^{rHF}(\Gamma)$ n'ont pas de sens lorsque P est un projecteur orthogonal, car l'opérateur $\Gamma = P - Id/2$ ne peut être compact en dimension infinie. La dérivation de l'énergie de Hartree-Fock (II.5) reste purement formelle.

Afin de corriger ce problème, C. Hainzl, M. Lewin et J.-P. Solovej [81] ont proposé une procédure qui donne un sens, sous une forme un peu différente, à l'énergie (II.5). Leur argument repose sur une réduction à la dimension finie de l'analyse précédente. Le système est restreint à une boîte $C_L = [-L/2, L/2]^3$, de taille L , avec des conditions de bord périodiques, et une coupure ultraviolette Λ dans le domaine de Fourier. En d'autres termes, les opérateurs P et Γ n'agissent plus sur l'espace de dimension infinie $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$, mais sur l'espace de dimension finie,

$$\mathcal{H}^{L, \Lambda} \equiv \left\{ \Psi = \sum_{k \in R^{L, \Lambda}} a_k \exp i\langle k, \cdot \rangle_{\mathbb{R}^3}, a_k \in \mathbb{C}^4 \right\},$$

où $R^{L,\Lambda} \equiv \{k \in (2\pi/L) \mathbb{Z}^3, \text{ t.q. } |k| \leq \Lambda\}$. La version périodisée de l'énergie de Hartree-Fock (II.5) s'écrit

$$E_\nu^L(\Gamma) = \text{tr}(D^0\Gamma) - \alpha \int_{C_L} \int_{C_L} \nu_L(x) G_L(x-y) \rho_\Gamma(y) dx dy + \frac{\alpha}{2} \int_{C_L} \int_{C_L} \rho_\Gamma(x) G_L(x-y) \rho_\Gamma(y) dx dy - \frac{\alpha}{2} \int_{C_L} \int_{C_L} |\Gamma(x,y)|^2 G_L(x-y) dx dy. \quad (\text{II.7})$$

Dans cette formule, la fonction ν_L est la version périodisée de la densité de charges ν définie par

$$\nu_L(x) \equiv \left(\frac{\sqrt{2\pi}}{L}\right)^3 \sum_{k \in R^{L,\Lambda}} \widehat{\nu}(k) \exp i\langle k, x \rangle_{\mathbb{R}^3},$$

où $\widehat{\nu}$ désigne la transformée de Fourier de ν . Le potentiel de Coulomb périodisé G_L vaut

$$G_L(z) \equiv \frac{4\pi}{L^3} \sum_{k \in (2\pi/L) \mathbb{Z}^3 \setminus \{0\}} \left(\frac{1}{|k|^2} \exp i\langle k, z \rangle_{\mathbb{R}^3} \right) + K_L,$$

où la constante K_L est fixée de sorte que G_L soit une fonction positive. Afin que le second terme de la formule (II.7) soit bien défini, il est naturel de supposer que la fonction ν appartienne à l'espace de Coulomb,

$$\mathcal{C}(\mathbb{R}^3) \equiv \left\{ f \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}), \text{ t.q. } \|f\|_{\mathcal{C}}^2 \equiv \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\widehat{f}(k)|^2}{|k|^2} dk < +\infty \right\}.$$

Quant à la fonction $\Gamma(x,y)$, elle désigne le noyau de l'opérateur Γ , lequel est désormais de rang fini. Enfin, la densité de charges ρ_Γ reste égale à

$$\rho_\Gamma(x) \equiv \text{tr}_{\mathbb{C}^4}(\Gamma(x,x)) = \frac{1}{L^3} \sum_{(j,k) \in (R^{L,\Lambda})^2} \text{tr}_{\mathbb{C}^4}(\widehat{\Gamma}(j,k)) \exp i\langle j-k, x \rangle_{\mathbb{R}^3}.$$

L'énergie de Hartree-Fock périodisée est bien définie sur l'enveloppe convexe des opérateurs Γ tels que $P = \Gamma + Id/2$ soit un projecteur orthogonal, à savoir

$$\mathcal{G}^{L,\Lambda} \equiv \left\{ \Gamma \in \mathcal{L}(\mathcal{H}^{L,\Lambda}), \text{ t.q. } \Gamma^* = \Gamma \text{ et } -\frac{1}{2}Id \leq \Gamma \leq \frac{1}{2}Id \right\}.$$

L'existence d'un minimiseur de l'énergie de Hartree-Fock périodisée dans cet ensemble est garantie par le résultat suivant dû à C. Hainzl, M. Lewin et J.-P. Solovej.

Proposition ([81]). *Soit $m > 0$, $0 \leq \alpha < 4/\pi$, $\Lambda > 0$, $L > 0$, et $\nu \in \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$ telle que $\widehat{\nu}$ soit continue sur \mathbb{R}^3 . Le problème de minimisation*

$$\mathcal{E}_\nu^L \equiv \inf \{ E_\nu^L(\Gamma), \Gamma \in \mathcal{G}^{L,\Lambda} \},$$

possède un minimiseur Γ_ν^L , qui s'écrit sous la forme $\Gamma_\nu^L = P_\nu^L - Id/2$, où P_ν^L est un projecteur orthogonal. Lorsque $\nu = 0$, le minimiseur Γ_0^L est unique, et invariant par translation : il se présente comme un multiplicateur de Fourier $\gamma_0^L(k)$ dans le domaine de Fourier.

Remarque. L'extension du problème de minimisation à l'enveloppe convexe $\mathcal{G}^{L,\Lambda}$ est classique pour les modèles de type Hartree-Fock. Elle facilite la résolution du problème de minimisation sans modifier la forme des minimiseurs éventuels, qui demeurent ici du type $\Gamma = P - Id/2$ (voir l'article d'E.H. Lieb [100]).

La démarche entreprise par C. Hainzl, M. Lewin et J.-P. Solovej se poursuit par le passage à la limite thermodynamique, c'est-à-dire à la limite $L \rightarrow +\infty$. Ce passage à la limite requiert de fixer au préalable la coupure ultraviolette Λ . Les opérateurs déduits de Γ_0^L et P_0^L à la limite $L \rightarrow +\infty$, n'agiront pas sur l'espace $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$, mais seulement sur le sous-espace

$$\mathcal{H}^\Lambda \equiv \left\{ \Psi \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4), \text{ t.q. } \text{Supp}(\widehat{\Psi}) \subset B(0, \Lambda) \right\}.$$

Ce passage à la limite fournit une définition consistante du vide libre, lequel sert ensuite de référence à la définition de l'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock.

Théorème ([81]). *Soit $m > 0$, $0 \leq \alpha < 4/\pi$ et $\Lambda > 0$. Il existe un opérateur auto-adjoint Γ_0 de $\mathcal{L}(\mathcal{H}^\Lambda)$ tel que*

$$\|\Gamma_0^L - \Gamma_0\|_{\mathcal{L}(\mathcal{H}^{L,\Lambda})} \rightarrow 0,$$

lorsque $L \rightarrow +\infty$. Cet opérateur s'écrit sous la forme $\Gamma_0 \equiv \mathcal{P}_-^0 - Id/2$, où \mathcal{P}_-^0 est le projecteur spectral sur le spectre négatif de l'opérateur

$$\mathcal{D}^0 \equiv D^0 - \alpha \frac{\Gamma_0(x, y)}{|x - y|}. \quad (\text{II.8})$$

L'opérateur Γ_0 est solution de l'équation auto-consistante

$$\Gamma_0 = -\frac{\text{sign}(\mathcal{D}^0)}{2}. \quad (\text{II.9})$$

Dans les variables de Fourier, l'opérateur \mathcal{D}^0 vaut

$$\widehat{\mathcal{D}^0}(p) \equiv g_1(|p|)\boldsymbol{\alpha} \cdot p + g_0(|p|)\boldsymbol{\beta}. \quad (\text{II.10})$$

Les fonctions g_0 et g_1 sont définies et de classe \mathcal{C}^∞ sur $[0, \Lambda]$, où elles satisfont la relation $m \leq mg_1 \leq g_0$.

Remarque. Le projecteur spectral \mathcal{P}_0^- est de rang infini, de sorte que l'opérateur Γ_0 n'est pas compact. Par les formules (II.9) et (II.10), il est par contre invariant par translation. Son noyau $\Gamma_0(x, y)$ s'écrit sous la forme $\Gamma_0(x, y) = (2\pi)^{-3/2} \check{\gamma}_0(x - y)$, où γ_0 est le multiplicateur de Fourier associé à Γ_0 , et $\check{\gamma}_0$ désigne sa transformée de Fourier inverse.

Suivant l'interprétation de la mer de Dirac, le projecteur spectral \mathcal{P}_0^- représente le vide libre pour le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock. Ce projecteur est différent du projecteur spectral P_0^- sur le spectre négatif de l'opérateur de Dirac D^0 . H. Siedentop et E.H. Lieb [102] (voir aussi [81]) ont en effet établi que

$$g_0(0) = m \left(1 + \frac{\alpha}{\pi} \text{argsh} \left(\frac{\Lambda}{m} \right) + \mathcal{O}(\alpha^2) \right),$$

lorsque $\alpha \rightarrow 0$. Cette propriété peut surprendre. Elle s'explique par la prise en compte des interactions entre électrons virtuels de la mer de Dirac. Le second terme au second membre de l'équation (II.8) provient de l'énergie électrostatique d'échange des électrons. Comme ce terme est absent du modèle réduit, le projecteur spectral \mathcal{P}_0^- se ramène au projecteur P_-^0 dans ce cas-là.

Le vide libre ainsi défini est neutre. Cette affirmation repose sur les relations (II.9) et (II.10), qui conduise à l'expression

$$\gamma^0(p) = -\frac{\widehat{\mathcal{D}^0}(p)}{2|\widehat{\mathcal{D}^0}(p)|} = -\frac{g_1(|p|)}{2\sqrt{g_1(|p|)^2|p|^2 + g_0(|p|)^2}} \boldsymbol{\alpha} \cdot p - \frac{g_0(|p|)}{2\sqrt{g_1(|p|)^2|p|^2 + g_0(|p|)^2}} \boldsymbol{\beta},$$

du multiplicateur de Fourier γ_0 . La densité de charges ρ_{Γ_0} de l'opérateur Γ_0 vaut alors

$$\rho_{\Gamma_0}(x) = \text{tr}_{\mathbb{C}^4}(\Gamma_0(x, x)) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{B(0, \Lambda)} \text{tr}_{\mathbb{C}^4}(\gamma_0(p)) dp = 0.$$

Le potentiel électrostatique qu'elle crée est identiquement nul, de sorte que le vide libre est bien neutre. Cette propriété est primordiale lorsqu'il s'agit de choisir le projecteur \mathcal{P}_0^- comme référence pour la définition rigoureuse de l'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock. Nous reviendrons sur cette affirmation dans la suite.

L'autre motif de ce choix se trouve dans l'analyse de la limite thermodynamique $L \rightarrow +\infty$ des minimiseurs Γ_ν^L associés à une densité de charges ν non nulle. Décrire cette limite requiert de définir, cette fois-ci de manière rigoureuse, l'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock,

$$\begin{aligned} E_\nu^{BDF}(Q) = & \text{tr}_{\mathcal{P}_0^-}(\mathcal{D}^0 Q) - \alpha \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\nu(x)\rho_Q(y)}{|x-y|} dx dy + \frac{\alpha}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_Q(x)\rho_Q(y)}{|x-y|} dx dy \\ & - \frac{\alpha}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|Q(x, y)|^2}{|x-y|} dx dy. \end{aligned} \quad (\text{II.11})$$

Dans cette expression, l'opérateur $Q \equiv P - \mathcal{P}_0^-$ représente la différence entre la matrice de densité à un corps P de l'état Hartree-Fock considéré, et le projecteur spectral \mathcal{P}_0^- du vide libre. C'est un opérateur de Hilbert-Schmidt sur l'espace de Hilbert \mathcal{H}^Λ . En général, la trace d'un opérateur de Hilbert-Schmidt n'a pas de sens. La définir de manière rigoureuse est nécessaire afin de donner un sens à la notion d'état électronique à N électrons, ainsi qu'à l'énergie cinétique des électrons. Sa définition rigoureuse demande de se restreindre aux opérateurs Q dans l'ensemble¹

$$\mathfrak{S}_{\mathcal{P}_0^-}^\Lambda \equiv \left\{ A \in \mathfrak{S}_2(\mathcal{H}^\Lambda), \text{ t.q. } (\mathcal{P}_0^- A \mathcal{P}_0^-, (I - \mathcal{P}_0^-)A(I - \mathcal{P}_0^-)) \in \mathfrak{S}_1(\mathcal{H}^\Lambda)^2 \right\}.$$

Les notations $\mathfrak{S}_1(\mathcal{H}^\Lambda)$ et $\mathfrak{S}_2(\mathcal{H}^\Lambda)$ désignent ici les espaces de Schatten des opérateurs à trace, respectivement de Hilbert-Schmidt, sur \mathcal{H}^Λ . La trace d'un opérateur A de $\mathfrak{S}_{\mathcal{P}_0^-}^\Lambda$ est définie par

$$\text{tr}_{\mathcal{P}_0^-}(A) \equiv \text{tr}(\mathcal{P}_0^- A \mathcal{P}_0^-) + \text{tr}((I - \mathcal{P}_0^-)A(I - \mathcal{P}_0^-)). \quad (\text{II.12})$$

L'introduction de cette définition par C. Hainzl, M. Lewin et É. Séré [77], repose sur le fait qu'elle est bien définie pour tout opérateur de Hilbert-Schmidt Q de la forme $Q = P - \mathcal{P}_0^-$, où P est un projecteur orthogonal (voir aussi [4]). L'expression (II.12) prolonge de plus la définition usuelle de la trace. Ces deux notions sont identiques pour un opérateur à trace.

En tant qu'opérateur de Hilbert-Schmidt sur l'espace \mathcal{H}^Λ , l'opérateur Q a un noyau $Q(x, y)$, qui appartient à l'espace $L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$, et dont la transformée de Fourier est supportée dans l'ensemble $B(0, \Lambda) \times B(0, \Lambda)$. La densité de charges ρ_Q de l'opérateur Q peut donc se définir par

$$\widehat{\rho}_Q(k) \equiv \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{|p \pm k/2| < \Lambda} \text{tr}_{\mathbb{C}^4} \left(\widehat{Q} \left(p + \frac{k}{2}, p - \frac{k}{2} \right) \right) dk, \quad (\text{II.13})$$

expression qui n'est rien d'autre que la transformée de Fourier de la fonction $x \mapsto \text{tr}_{\mathbb{C}^4}(Q(x, x))$. Muni de cette dernière définition, tous les termes de l'énergie (II.11) prennent une signification rigoureuse. Nous reviendrons au Paragraphe II.1.2 sur l'analyse mathématique de cette énergie, mais commençons par énoncer le résultat de convergence de C. Hainzl, M. Lewin et J.-P. Solovej qui justifie son introduction.

1. Une solution, en apparence plus simple, consiste à restreindre les opérateurs Q à l'espace des opérateurs à trace $\mathfrak{S}_1(\mathcal{H}^\Lambda)$. Cette solution n'est pas envisageable, parce que les minimiseurs de l'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock ne sont pas en général des opérateurs à trace (voir la Proposition II.1 dans le cas du modèle réduit).

Théorème ([81]). Soit $m > 0$, $0 \leq \alpha < 4/\pi$, $\Lambda > 0$, $L > 0$, et $\nu \in \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$ telle que $\hat{\nu}$ soit continue sur \mathbb{R}^3 . Quitte à extraire, le noyau $Q_\nu^L(x, y)$, défini par

$$Q_\nu^L(x, y) \equiv \Gamma_\nu^L(x, y) - \Gamma_0^L(x, y) = P_\nu^L(x, y) - P_0^L(x, y), \quad (\text{II.14})$$

converge uniformément sur tout compact de $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ vers un minimiseur Q_ν de l'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock E_ν^{BDF} dans l'ensemble

$$\mathcal{Q}^\Lambda \equiv \{Q \in \mathfrak{S}_{\mathcal{P}_-^0}^\Lambda, \text{ t.q. } Q^* = Q \text{ et } -\mathcal{P}_-^0 \leq Q \leq Id - \mathcal{P}_-^0\}.$$

De plus,

$$E_\nu^L(\Gamma_\nu^L) - E_0^L(\Gamma_0^L) \rightarrow E_\nu^{BDF}(Q_\nu) = \mathcal{E}_\nu^{BDF} \equiv \inf \{E_\nu^{BDF}(Q), Q \in \mathcal{Q}^\Lambda\}, \quad (\text{II.15})$$

lorsque $L \rightarrow +\infty$.

Remarque. Le problème de minimisation de la formule (II.15) admet une solution (voir le Paragraphe II.1.2). Notons également que le théorème précédent reste valable pour le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit en remplaçant l'opérateur \mathcal{D}^0 par l'opérateur de Dirac D^0 , et le projecteur spectral \mathcal{P}_-^0 , par P_-^0 .

Remarque. C. Hainzl, M. Lewin et É. Séré [78] ont établi que le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock s'effondrait dans la limite où la coupure ultraviolette Λ converge elle-aussi vers $+\infty$. Nous reviendrons sur cette affirmation au Paragraphe II.1.2.

Les convergences (II.14) et (II.15) justifient le choix du projecteur spectral \mathcal{P}_-^0 , et de son énergie, comme références dans le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock. Lorsque l'énergie de Hartree-Fock du vide polarisée Γ_ν^L est renormalisée par la soustraction de celle du vide libre Γ_0^L , le passage à la limite thermodynamique $L \rightarrow +\infty$ est permis, et la limite n'est rien d'autre que l'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock. Ce n'est plus vrai sans cette renormalisation. C. Hainzl, M. Lewin et J.-P. Solovej ont montré que l'énergie du vide libre $E_0^L(\Gamma_0^L)$ converge vers $+\infty$, lorsque $L \rightarrow +\infty$.

De manière simultanée, les opérateurs de densité à un corps Γ_ν^L et P_ν^L , également renormalisés par soustraction des opérateurs Γ_0^L et P_0^L associés au vide libre, sont convergents à la limite $L \rightarrow +\infty$. Leur limite Q_ν appartient à un espace $\mathfrak{S}_{\mathcal{P}_-^0}^\Lambda$ dans lequel les notions de noyau et de densité de charges prennent sens. Il apparaît donc comme naturel de prendre en compte les états électroniques de type Hartree-Fock, non pas directement à travers leur matrice de densité à un corps P , ou sa version renormalisée Γ , mais à travers la différence Q entre la matrice P , et le projecteur \mathcal{P}_-^0 du vide libre. Ce choix est d'autant plus approprié que le vide libre est neutre. Comme la densité de charges $\rho_{\mathcal{P}_-^0}$ est identiquement nulle, les densités de charges des opérateurs Q et P sont identiques, ce qui autorise à exprimer les interactions électrostatiques directes en fonction de la densité ρ_Q .

Pour conclure cette dérivation du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock, notons que la convergence à la limite thermodynamique, non plus du vide polarisé, mais des états électroniques à N électrons, soit des minimiseurs de l'énergie E_ν^L sous la contrainte d'une trace égale à N , reste à notre connaissance, ouverte. Cette convergence serait une pierre de plus dans la justification du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock, dont nous allons maintenant décrire l'analyse mathématique.

II.1.2 L'analyse mathématique du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock

L'étude du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock repose, pour l'essentiel, sur une série de travaux de C. Hainzl, M. Lewin et É. Séré [77, 78, 79] que nous allons maintenant rappeler. Nous renvoyons à l'article de revue [80] pour de plus amples détails.

Leur premier résultat² concerne la définition de l'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock, et le fait que cette quantité soit bornée inférieurement sur l'ensemble \mathcal{Q}^Λ .

Proposition ([77, 81, 79]). *Soit $\Lambda > 0$, $\alpha \geq 0$, et $\nu \in \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$.*

i) *L'énergie \mathcal{E}_ν^{BDF} , donnée par la formule (II.11), est bien définie sur l'ensemble $\mathfrak{S}_{\mathcal{P}_-^\Lambda}$. En particulier, l'application $Q \mapsto \rho_Q$ est une application linéaire continue de l'espace $\mathfrak{S}_{\mathcal{P}_-^\Lambda}$, muni de la norme*

$$\|Q\|_{\mathfrak{S}_{\mathcal{P}_-^\Lambda}} \equiv \|Q\|_{\mathfrak{S}_2} + \|\mathcal{P}_-^0 Q \mathcal{P}_-^0\|_{\mathfrak{S}_1} + \|(Id - \mathcal{P}_-^0)Q(Id - \mathcal{P}_-^0)\|_{\mathfrak{S}_1},$$

dans l'espace $L^2(\mathbb{R}^3) \cap \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$.

ii) *Lorsque $0 \leq \alpha \leq 4/\pi$, l'énergie \mathcal{E}_ν^{BDF} est bornée inférieurement sur l'ensemble \mathcal{Q}^Λ . Plus précisément,*

$$\forall Q \in \mathcal{Q}^\Lambda, E_\nu^{BDF}(Q) + \frac{\alpha}{2}D(\nu, \nu) \geq 0, \quad (\text{II.16})$$

où

$$D(\nu, \nu) \equiv \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\nu(x)\nu(y)}{|x-y|} dx dy. \quad (\text{II.17})$$

Lorsque $\nu = 0$, cette égalité est une égalité si et seulement $Q = 0$.

L'inégalité (II.16), initialement dérivée par V. Bach, J.-M. Barbaroux, B. Helffer et H. Siedentop [5] (voir aussi [31]), est cruciale afin d'analyser les problèmes de minimisation qui définissent le vide polarisé et les états fondamentaux à N électrons. Cette inégalité se déduit de celle de Kato [92],

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|f(x)|^2}{|x|} dx \leq \frac{\pi}{2} \langle f, |\nabla|f \rangle_{L^2},$$

à travers la relation

$$\int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|Q(x, y)|^2}{|x-y|} dx dy \leq \frac{\pi}{2} \text{tr}(|\mathcal{D}^0|Q^2).$$

Cette dernière relation est à l'origine de la condition $\alpha \leq 4/\pi$. Notons que cette condition ne pose pas problème, puisque la constante de structure fine α est de l'ordre de 0.0073. Cette condition n'est pas requise par le modèle réduit puisqu'elle concerne le terme d'échange.

Le fait que l'opérateur nul soit l'unique minimiseur de l'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock en l'absence de densité de charges extérieure est cohérent avec l'interprétation du vide libre comme le projecteur orthogonal \mathcal{P}_-^0 . Le vide polarisé est de même défini comme le projecteur $P_\nu \equiv Q_\nu + \mathcal{P}_-^0$, où Q_ν est un minimiseur du problème de minimisation de la formule (II.15). Notons que les opérateurs Q de \mathcal{Q}^Λ de la forme $Q = P - \mathcal{P}_-^0$, où P est un projecteur orthogonal, sont les points extrémaux de l'ensemble convexe \mathcal{Q}^Λ (voir [77]). Sous certaines hypothèses sur la densité de charges ν , un minimiseur Q_ν de l'énergie (II.11) sur \mathcal{Q}^Λ est extrémal, donc de la forme $Q_\nu = P_\nu - \mathcal{P}_-^0$, où P_ν est un projecteur orthogonal. C. Hainzl, M. Lewin et É. Séré [77, 78] (voir aussi [81]) ont montré l'existence d'un tel minimiseur.

Théorème ([77, 78, 81]). *Soit $\Lambda > 0$, $0 \leq \alpha < 4/\pi$ et $\nu \in \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$.*

i) *L'énergie E_ν^{BDF} possède un minimiseur Q_ν sur \mathcal{Q}^Λ , qui s'écrit sous la forme $Q_\nu = P_\nu - \mathcal{P}_-^0$, où P_ν est un projecteur orthogonal.*

ii) *Ce minimiseur Q_ν est solution de l'équation auto-consistante*

$$P_\nu = Q_\nu + \mathcal{P}_-^0 = \chi_{] -\infty, 0]}(\mathcal{D}^{Q_\nu}), \quad (\text{II.18})$$

2. Dans cet énoncé, ainsi que dans toute la suite, la masse m de l'électron est normalisée à 1.

où l'opérateur de Fock D^{Q_ν} est donné par

$$D^{Q_\nu} \equiv \mathcal{D}^0 + \alpha(\rho_{Q_\nu} - \nu) * \frac{1}{|x|} - \alpha \frac{Q_\nu(x, y)}{|x - y|}.$$

iii) Lorsque la densité de charges ν vérifie la condition

$$\left(\frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{2\alpha}{4 - \pi\alpha}} + 2^{\frac{11}{6}} \pi^{\frac{1}{6}} \right) \alpha \|\nu\|_{\mathcal{C}} \leq 1 - \frac{\pi}{4} \alpha, \quad (\text{II.19})$$

le minimiseur Q_ν est unique, et vérifie

$$N_\nu \equiv \text{tr}_{\mathcal{P}^0_-}(Q_\nu) = 0. \quad (\text{II.20})$$

L'existence du minimiseur Q_ν résulte d'arguments de concentration-compacité. Un minimiseur quelconque de l'énergie (II.11) sur l'ensemble \mathcal{Q}^Λ ne satisfait pas l'équation (II.18), mais l'équation

$$Q_\nu = \chi_{(-\infty, 0]}(\mathcal{D}^{Q_\nu}) + \tau\gamma - \mathcal{P}^0_-,$$

où $\tau \in [0, 1]$, et γ est un projecteur de rang 1, d'image incluse dans le noyau de l'opérateur de Fock D^{Q_ν} . La condition (II.19) garantit que ce noyau est réduit au singleton $\{0\}$, ce qui explique l'unicité du minimiseur Q_ν , sous cette condition.

Le vide polarisé par la densité de charges ν est représenté par le projecteur spectral P_ν . L'interprétation de la mer de Dirac est satisfaite à travers l'équation auto-consistante (II.18). Lorsque le potentiel électrostatique créé par la densité de charges ν n'est pas trop fort, le vide polarisé est neutre par l'identité (II.20). Pour des potentiels électrostatiques plus forts, il n'est pas exclu que le vide polarisé puisse être chargé.

Le comportement des minimiseurs Q_ν à la limite $\Lambda \rightarrow +\infty$ est donné par la proposition suivante, également due à C. Hainzl, M. Lewin et É. Séré.

Proposition ([78]). *Soit $0 \leq \alpha < 4/\pi$ et $\nu \in \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$. On note Q_ν^Λ , un minimiseur de l'énergie E_ν^{BDF} sur l'ensemble \mathcal{Q}^Λ . Alors,*

$$\|\mathcal{D}^0|^{\frac{1}{2}} Q_\nu^\Lambda\|_{\mathfrak{S}_2} \rightarrow 0, \text{ et } \alpha \|\rho_{Q_\nu^\Lambda} - \nu\|_{\mathcal{C}} \rightarrow 0,$$

lorsque $\Lambda \rightarrow +\infty$. En particulier,

$$E_\nu^{BDF}(Q_\nu^\Lambda) \rightarrow -\frac{\alpha}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\nu(x)\nu(y)}{|x - y|} dx dy, \quad (\text{II.21})$$

lorsque $\Lambda \rightarrow +\infty$.

À la limite $\Lambda \rightarrow +\infty$, l'opérateur Q_ν^Λ converge vers l'opérateur nul, alors que sa densité de charges $\rho_{Q_\nu^\Lambda}$ converge vers la fonction ν . La densité de charges limite ne peut s'interpréter comme celle de l'opérateur limite. En d'autres termes, le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock n'a plus de sens physique à la limite $\Lambda \rightarrow +\infty$. Prendre cette limite n'est pas un moyen de s'abstraire de la coupure ultraviolette Λ . La supprimer n'est pas non plus une solution. Hormis la difficulté à définir proprement l'énergie (II.11) sans cette coupure, au moins formellement, l'infimum de l'énergie sans coupure est donné par le second membre de la formule (II.21). Il ne pourra être atteint lorsque la fonction ν sera non nulle. Cet effondrement de la théorie à la limite $\Lambda \rightarrow +\infty$ confirme les analyses de L.D. Landau [97], et L.D. Landau et I.Y. Pomeranchuk [98]. Notons qu'à l'inverse, une renormalisation adéquate de la charge donne des développements perturbatifs de la densité de charge $\rho_{Q_\nu^\Lambda}$ qui se trouvent être indépendants de Λ (voir le Paragraphe II.3).

Dans le cas du modèle réduit, soit pour l'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock réduite définie par

$$E_\nu^{rBDF}(Q) \equiv \text{tr}_{P_-^0}(D^0 Q) - \alpha \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\nu(x)\rho_Q(y)}{|x-y|} dx dy + \frac{\alpha}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_Q(x)\rho_Q(y)}{|x-y|} dx dy, \quad (\text{II.22})$$

C. Hainzl, M. Lewin et É. Séré ont démontré un résultat analogue.

Théorème ([78]). *Soit $\Lambda > 0$, $\alpha \geq 0$ et $\nu \in \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$.*

i) *L'énergie réduite E_ν^{rBDF} possède un minimiseur Q_ν sur \mathcal{Q}^Λ .*

ii) *Ce minimiseur Q_ν est solution de l'équation auto-consistante*

$$P_\nu \equiv Q_\nu + P_-^0 = \chi_{]-\infty, 0[}(D^{Q_\nu}) + \gamma, \quad (\text{II.23})$$

où D^{Q_ν} est l'opérateur de Fock donné par

$$D^{Q_\nu} \equiv D^0 + \alpha(\rho_{Q_\nu} - \nu) * \frac{1}{|\cdot|},$$

tandis que γ est un opérateur de rang fini, de noyau intégral égal à

$$\gamma(x, y) = \sum_{i=1}^M \tau_i \psi_i(x) \psi_i(y)^*.$$

Les nombres réels τ_i sont compris entre 0 et 1. La famille $(\psi_i)_{1 \leq i \leq M}$ forme une base orthonormée du noyau de l'opérateur D^{Q_ν} .

iii) *Lorsque la densité de charges ν vérifie la condition*

$$2^{\frac{11}{6}} \pi^{\frac{1}{6}} \alpha \|\nu\|_{\mathcal{C}} < 1, \quad (\text{II.24})$$

l'opérateur γ est nul. Le minimiseur Q_ν est unique, et satisfait

$$N_\nu \equiv \text{tr}_{P_-^0}(Q_\nu) = 0. \quad (\text{II.25})$$

Comme dans le cas non réduit, la condition (II.24) garantit que le noyau de l'opérateur de Fock D^{Q_ν} est réduit au singleton $\{0\}$. Suivant l'interprétation de la mer de Dirac, l'opérateur P_ν est alors le projecteur spectral sur le spectre négatif de l'opérateur de Fock D^{Q_ν} . Il représente l'état électronique du vide polarisé, qui est neutre par la formule (II.25).

Lorsque la condition (II.24) n'est plus satisfaite, l'opérateur P_ν n'est plus nécessairement un projecteur. Le niveau d'énergie nulle peut être occupé partiellement. Cette carence est inhérente aux modèles de type Hartree-Fock réduit (voir l'article de J.-P.Solovej [130]). La densité de charges ρ_{Q_ν} , associée aux minimiseurs Q_ν , reste cependant définie de manière unique de par la stricte concavité du dernier terme de la formule (II.22).

Quant aux états électroniques à N électrons, leur détermination passe par l'analyse du problème de minimisation sous contrainte

$$\mathcal{E}_\nu^{BDF}(q) \equiv \inf \left\{ E_\nu^{BDF}(Q), Q \in \mathcal{Q}^\Lambda \text{ t.q. } \text{tr}_{P_-^0}(Q) = q \right\}, \quad (\text{II.26})$$

ici étendu au cas où q n'est plus nécessairement un entier N , mais un nombre réel quelconque. La résolution de ce problème est plus délicate que celle du problème sans contrainte de la formule (II.15). Il demeure, à notre connaissance, ouvert dans sa complète généralité (voir [79] pour sa résolution dans certaines limites). La difficulté provient du fait que les secteurs de charges

$$\mathcal{Q}^\Lambda(q) \equiv \{Q \in \mathcal{Q}^\Lambda, \text{ t.q. } \text{tr}_{P_-^0}(Q) = q\},$$

ne sont pas fermés pour la convergence faible dans l'espace $\mathfrak{S}_{\mathcal{P}_-^0}^\Lambda$. Une nouvelle fois, des arguments de concentration-compacité permettent de contourner cette difficulté. Comme annoncé dans l'introduction, C. Hainzl, M. Lewin et É. Séré [79] ont ainsi établi la condition suivante pour l'existence d'un minimiseur Q_q du problème (II.26).

Théorème ([79]). *Soit $\Lambda > 0$, $0 \leq \alpha < \frac{4}{\pi}$ et $\nu \in \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$.*

i) Si la condition

$$\forall k \in \mathbb{R}^*, \mathcal{E}_\nu^{BDF}(q) < \mathcal{E}_\nu^{BDF}(q - k) + E_0^{BDF}(k), \quad (\text{II.27})$$

est satisfaite, alors, le problème de minimisation (II.26) admet un minimiseur Q_q . La condition (II.27) est équivalente à la condition (25), lorsque $q = N$ est entier.

ii) Un minimiseur Q_q est solution de l'équation auto-consistante

$$P_q \equiv Q_q + \mathcal{P}_-^0 = \chi_{]-\infty, \mu_q]}(D^{Q_q}) + \tau\gamma,$$

où μ_q est le niveau de Fermi de l'état électronique associé. L'opérateur de Fock D^{Q_q} est égal à

$$D^{Q_q} \equiv \mathcal{D}^0 + \alpha(\rho_{Q_q} - \nu) * \frac{1}{|x|} - \alpha \frac{Q_q(x, y)}{|x - y|}. \quad (\text{II.28})$$

Le nombre réel τ est nul lorsque q est entier, et vaut $[q] + 1 - q$, sinon. L'opérateur γ est un projecteur de rang 1, d'image incluse dans le noyau de l'opérateur $D^{Q_q} - \mu_q \text{Id}$.

Lorsque $q = N$ est entier, le vide, polarisé par la présence des N électrons et de la densité de charges ν , est représenté par le projecteur spectral $P_N^- \equiv \chi_{]-\infty, 0]}(D^{Q_N})$, tandis que la structure électronique est décrite par le projecteur spectral $P_N^e \equiv \chi_{]0, \mu_N]}(D^{Q_N})$. Le projecteur $P_N = P_N^- + P_N^e$ tient, quant à lui, compte de l'ensemble des électrons réels et virtuels. Lorsque le potentiel électrostatique engendré par la densité de charges ν n'est pas trop fort, c'est-à-dire sous une condition de la forme (II.19), le projecteur P_N^- vérifie la condition

$$\text{tr}_{\mathcal{P}_-^0}(P_N^- - \mathcal{P}_-^0) = 0,$$

ce qui induit que la trace du projecteur P_N^e vaut

$$\text{tr}_{\mathcal{P}_-^0}(P_N^e) = \text{tr}_{\mathcal{P}_-^0}(P_N - \mathcal{P}_-^0) = \text{tr}_{\mathcal{P}_-^0}(Q_N) = N.$$

Le vide polarisé est neutre, et la structure électronique réelle comporte N électrons. Ces électrons occupent les niveaux d'énergie positifs de l'opérateur de Fock D^{Q_N} qui sont inférieurs au niveau de Fermi μ_N , lequel est alors strictement positif.

A priori, rien n'exclut que le nombre N ne soit négatif, ou que la densité de charges ν ne soit négative. Dans ces deux cas, un minimiseur du problème (II.26) ne décrit plus une structure électronique à N électrons, mais une structure positronique à N positrons. La différence avec le cas électronique se manifeste par le signe du niveau de Fermi μ_N qui est alors strictement négatif, comme mentionné dans l'introduction.

C. Hainzl, M. Lewin et É. Séré ont enfin exhibé deux cas de figure dans lesquels la condition (II.27) est remplie, de sorte que le problème de minimisation (II.26) possède des solutions. Le premier cas correspond à la limite dans laquelle la constante de structure fine α tend vers 0, pour une densité de charges ν de la forme $\nu = \mathbf{n}/\alpha$, où \mathbf{n} est une fonction fixée de $\mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$. Nous renvoyons à l'article [79] pour de plus amples détails quant à ce premier cas.

Le second cas est celui de la limite non relativiste où la vitesse de la lumière c tend vers $+\infty$. L'analyse de cette limite passe par un nouveau choix d'unités dans lequel le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock ne dépend plus de la constante de structure fine α , désormais égale à

1, mais de la vitesse de la lumière c . Ce changement d'unités se manifeste par le fait que le paramètre α disparaît de la définition (II.11), et que l'opérateur de Dirac D^0 vaut désormais $D^0 \equiv -ic\alpha \cdot \nabla + c^2\beta$. L'ensemble des résultats précédents demeurent valables avec ce nouveau choix d'unité. Le modèle limite dans la limite non relativiste $c \rightarrow +\infty$ est le modèle de Hartree-Fock avec spin 1/2, définie à partir de l'énergie

$$F_\nu^{HF}(\Psi) \equiv \text{tr} \left(-\frac{\Delta}{2} \gamma_\Psi \right) - \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\nu(x)\rho_\Psi(y)}{|x-y|} dx dy + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_\Psi(x)\rho_\Psi(y)}{|x-y|} dx dy \\ - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\gamma_\Psi(x,y)|^2}{|x-y|} dx dy,$$

où $\Psi \equiv (\Psi_1, \dots, \Psi_N)$ est un n -uplet orthonormé, non plus dans $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$, mais dans $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)$. L'opérateur de densité à un corps γ_Ψ reste le projecteur de noyau

$$\gamma_\Psi(x, y) \equiv \sum_{i=1}^N \Psi_i(x) \Psi_i(y)^*,$$

tandis que la densité de charges ρ_Ψ demeure donnée par $\rho_\Psi(x) \equiv \text{tr}_{\mathbb{C}^2}(\gamma_\Psi(x, x))$. Un état fondamental à N électrons pour ce modèle est un minimiseur du problème de minimisation

$$\mathcal{F}_\nu^{HF}(N) \equiv \inf \{ F_\nu^{HF}(\Psi), \Psi = (\Psi_1, \dots, \Psi_N) \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)^N \text{ t.q. } \langle \Psi_i, \Psi_j \rangle_{L^2} = \delta_{i,j} \}. \quad (\text{II.29})$$

Dans la limite non relativiste, la structure électronique à N électrons pour le le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock converge vers cet état fondamental à N électrons.

Théorème ([79]). *Soit $\Lambda_0 > 0$, et $\nu \in L^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}_+) \cap \mathcal{C}(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}_+)$ tel que $\int_{\mathbb{R}^3} \nu = Z \geq 0$. On suppose que*

$$0 < N < Z + 1. \quad (\text{II.30})$$

i) Il existe une constante $c_0 > 0$ telle que, quel que soit $c \geq c_0$, l'énergie E_ν^{BDF} , associée à la coupure ultraviolette $\Lambda = c\Lambda_0$, admet un minimiseur Q_N^c dans le secteur de charge $Q^{c\Lambda_0}(N)$. De plus, l'énergie minimisante $E_\nu^{BDF}(Q_N^c)$ satisfait

$$\mathcal{E}_\nu^{BDF} - Ng_0(0) \rightarrow \mathcal{F}_\nu^{HF}(N),$$

lorsque $c \rightarrow +\infty$, où g_0 renvoie à la fonction de la formule (II.10).

ii) Un minimiseur Q_N^c s'écrit sous la forme $Q_N^c = \chi_{]-\infty, 0]}(D^{Q_N^c}) + \gamma_N^c - \mathcal{P}_-$, où $D^{Q_N^c}$ est l'opérateur de Fock de la formule (II.28), et $\gamma_N^c \equiv \chi_{]0, \mu_N]}(D^{Q_N^c})$ est un projecteur orthogonal de noyau intégral

$$\gamma_N^c(x, y) \equiv \sum_{i=1}^N \Psi_i^c(x) \Psi_i^c(y)^*.$$

Dans ces expressions, $\Psi^c \equiv (\Psi_1^c, \dots, \Psi_N^c)$ est une famille orthonormée de $\mathcal{H}^{c\Lambda_0}$, et μ_N est le niveau de Fermi de cette structure électronique à N électrons.

iii) Il existe un minimiseur $\psi \equiv (\psi_1, \dots, \psi_N) \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)^N$ du problème (II.29) tel que, quitte à extraire,

$$\Psi^c \rightarrow ((\psi_1, 0, 0), \dots, (\psi_N, 0, 0)) \text{ dans } H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)^N,$$

lorsque $c \rightarrow +\infty$.

Remarque. La condition (II.30) garantit que le problème (II.29) possède des minimiseurs (voir les articles de E.H. Lieb et B. Simon [103], et P.-L. Lions [109]).

Cet énoncé apparaît comme une nouvelle justification du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock, en tant que modèle de Hartree-Fock relativiste. Non seulement ce modèle est consistant sur le plan mathématique, mais de plus, il converge dans la limite non relativiste vers le modèle de Hartree-Fock classique.

II.2 La construction des états fondamentaux du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit

a. Énoncé des principaux résultats

Dans le cas du modèle réduit, les états fondamentaux à N électrons sont décrits par les minimiseurs Q_N du problème de minimisation sous contrainte

$$\mathcal{E}_\nu^{rBDF}(N) \equiv \inf \{E_\nu^{rBDF}(Q), Q \in \mathcal{Q}^\Lambda(N)\}, \quad (\text{II.31})$$

où le secteur de charge $\mathcal{Q}^\Lambda(N)$ reste défini par

$$\mathcal{Q}^\Lambda(N) \equiv \{Q \in \mathcal{Q}^\Lambda, \text{ t.q. } \text{tr}_{P_-^0}(Q) = N\}.$$

Ce problème s'étend sans difficulté au cas où un nombre réel q remplace l'entier N . À travers des arguments de concentration-compacité, sa résolution passe par l'écriture d'une condition de type Hunziker-van Winter-Zhislin, semblable à la condition (II.27). En collaboration avec M. Lewin et É. Séré, nous avons tiré profit de cette condition pour établir le théorème suivant.

Théorème II.1 ([67]). *Soit $\Lambda > 0$, $\alpha \geq 0$, et $\nu \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$ tel que $\int_{\mathbb{R}^3} \nu = Z \in \mathbb{R}$. Il existe deux constantes $q_m \in [-\infty, q_M]$ et $q_M \in [q_m, +\infty]$ qui satisfont les conditions suivantes.*

(i) *L'énergie E_ν^{rBDF} admet un minimiseur Q_q dans l'ensemble $\mathcal{Q}^\Lambda(q)$ si et seulement si*

$$q_m \leq q \leq q_M.$$

(ii) *Sous cette condition, un minimiseur Q_q est solution de l'équation auto-consistante*

$$P_q = Q_q + P_-^0 = \chi_{]-\infty, \mu_q[}(D^{Q_q}) + \gamma_q. \quad (\text{II.32})$$

L'opérateur de Fock D^{Q_q} est égal à

$$D^{Q_q} \equiv D^0 + \alpha(\rho_{Q_q} - \nu) * \frac{1}{|\cdot|}.$$

Le nombre $\mu_q \in [-1, 1]$ est le niveau de Fermi de l'état électronique associé à l'opérateur P_q . L'opérateur γ_q est auto-adjoint, de rang fini si $\mu_q \neq \pm 1$, à trace, sinon, et d'image incluse dans le noyau de l'opérateur $D^{Q_q} - \mu_q \text{Id}$. Il satisfait la condition $0 \leq \gamma_q \leq \text{Id}$.

(iii) *Si q_ν désigne la trace du minimiseur Q_ν de l'énergie E_ν^{rBDF} sur \mathcal{Q}^Λ , construit dans [78], alors, q_ν et Z appartiennent au segment $[q_m, q_M]$.*

Comme dans le cas non réduit, lorsque $q = N$ est entier, l'opérateur P_N s'interprète comme l'état électronique des électrons réels et virtuels. Lorsque le potentiel électrostatique engendré par la densité de charges ν n'est pas trop fort, c'est-à-dire sous une condition similaire à la condition (II.24), l'opérateur γ_N est identiquement nul. L'opérateur P_N se réduit au projecteur spectral sur les niveaux d'énergie inférieurs au niveau de Fermi μ_N de l'opérateur de Fock D^{Q_N} . Le vide polarisé est représenté par le projecteur spectral $P_N^- \equiv \chi_{]-\infty, 0]}(D^{Q_N})$, tandis que la structure électronique est donnée par le projecteur spectral $P_N^e \equiv \chi_{]0, \mu_N]}(D^{Q_N})$. Le vide polarisé est neutre. Le rang du projecteur P_N^e est égal à N . La structure électronique comporte bien N électrons.

La principale différence avec le cas non réduit réside dans la propriété (iii). Le Théorème II.1 garantit l'existence de minimiseurs Q_q pour une gamme de valeurs du nombre q qui s'étend entre q_ν et Z . Sous la condition (II.24), le nombre q_ν est nul. Aussi existe-t-il une structure électronique

à N électrons pour tout entier N entre 0 et Z . Ceci est pertinent sur le plan physique, au sens où il ne peut en principe exister de telles structures que lorsque N est compris entre 0 et $Z + 1$.

Par contre, le Théorème II.1 n'exclut en rien la possibilité qu'il existe des structures électro-niques à N électrons, ou $|N|$ positrons, dans le cas où N est négatif, pour des valeurs quelconques de l'entier N . Nier cette possibilité passe par le calcul de bornes sur les valeurs q_m et q_M . Ce calcul est délicat, et à notre connaissance, toujours ouvert, pour une coupure ultraviolette Λ aussi peu régulière que celle que nous avons considérée jusqu'ici, laquelle revient à tronquer toutes les transformées de Fourier afin qu'elles soient à support dans la boule $B(0, \Lambda)$.

Cette coupure brutale n'est pas l'unique façon de donner un sens au modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock. Rappelons qu'une définition consistante de ce modèle passe par la résolution de deux difficultés. La première provient du spectre négatif de l'opérateur de Dirac. Elle se résout grâce à l'interprétation de la mer de Dirac, qui contourne cette difficulté à travers le choix des projecteurs spectraux \mathcal{P}_-^0 , respectivement P_-^0 dans le cas réduit, comme représentation du vide libre, et donc comme référence de tous les opérateurs considérés.

La seconde difficulté trouve son origine dans la faible croissance de la transformée de Fourier $\widehat{D}^0(p)$ de l'opérateur de Dirac, qui n'est qu'affine lorsque $|p|$ est grand. Le recours à la coupure ultraviolette utilisée jusqu'ici revient à remplacer l'opérateur de Dirac D^0 par l'opérateur D^χ de transformée de Fourier

$$\widehat{D}^\chi(p) = (\boldsymbol{\alpha} \cdot p + \beta) \left(1 + \chi \left(\frac{|p|^2}{\Lambda^2} \right) \right),$$

où χ désigne la fonction donnée par

$$\chi(r) \equiv 0, \text{ si } 0 \leq r < 1, \text{ et } \chi(r) \equiv +\infty, \text{ si } r \geq 1.$$

Cette première approche est suffisamment brutale pour que la transformée de Fourier \widehat{D}^χ soit discontinue sur le cercle $\partial B(0, \Lambda)$. Cette discontinuité est l'une des causes de la difficulté à obtenir des estimations précises des valeurs q_m et q_M .

Une approche alternative consiste à remplacer l'opérateur de Dirac D^0 par l'opérateur D^ζ , dont la transformée de Fourier est définie par

$$\widehat{D}^\zeta(p) = (\boldsymbol{\alpha} \cdot p + \beta) \left(1 + \zeta \left(\frac{|p|^2}{\Lambda^2} \right) \right).$$

Dans cette expression, ζ désigne une fonction positive, croissante et régulière sur \mathbb{R}_+ , qui croît suffisamment vite à l'infini (voir le Théorème II.3 pour des hypothèses plus précises). L'analyse du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit développée jusqu'ici s'adapte à cette nouvelle coupure ultraviolette. L'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock réduite est désormais définie par

$$E_\nu^\zeta(Q) \equiv \text{tr}_{P_-^\zeta} \left(D^\zeta Q \right) - \alpha \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\nu(x) \rho_Q(y)}{|x-y|} dx dy + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_Q(x) \rho_Q(y)}{|x-y|} dx dy. \quad (\text{II.33})$$

Dans cette formule, l'opérateur $P_-^\zeta = \chi_{(-\infty, 0]}(D^\zeta)$ est le projecteur spectral sur le spectre négatif de D^ζ . Il représente le vide libre, et sert de référence à la définition de tous les opérateurs qui apparaissent dans ce nouveau modèle. De manière identique à la trace $\text{tr}_{P_-^0}$, la trace $\text{tr}_{P_-^\zeta}$ est ainsi définie par l'identité

$$\text{tr}_{P_-^\zeta}(Q) = \text{tr}(P_-^\zeta Q P_-^\zeta) + \text{tr}((Id - P_-^\zeta)Q(Id - P_-^\zeta)).$$

L'énergie (II.33) est bien définie sur l'espace

$$\mathfrak{S}^\zeta \equiv \left\{ Q \in \mathfrak{S}_2(\mathcal{H}), \text{ t.q. } |D^\zeta|^{\frac{1}{2}} Q \in \mathfrak{S}_2(\mathcal{H}), |D^\zeta|^{\frac{1}{2}} P_-^\zeta Q P_-^\zeta |D^\zeta|^{\frac{1}{2}} \in \mathfrak{S}_1(\mathcal{H}), \right. \\ \left. \text{et } |D^\zeta|^{\frac{1}{2}} (Id - P_-^\zeta) Q (Id - P_-^\zeta) |D^\zeta|^{\frac{1}{2}} \in \mathfrak{S}_1(\mathcal{H}) \right\},$$

où \mathcal{H} désigne l'espace de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$. Sous des hypothèses raisonnables sur la fonction ζ , elle possède un minimiseur Q^ζ dans l'ensemble

$$\mathcal{Q}^\zeta = \{Q \in \mathfrak{S}^\zeta, \text{ t.q. } -P_-^\zeta \leq Q \leq Id - P_-^\zeta\},$$

lequel décrit dans ce nouveau modèle, l'état électronique du vide polarisé par la densité ν .

Théorème II.2 ([67]). *Soit $\Lambda > 0$, $\alpha \geq 0$ et $\nu \in \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$. On suppose que la fonction ζ est définie, positive, croissante et de classe \mathcal{C}^3 sur \mathbb{R}_+ , qu'elle est nulle en 0, et qu'elle satisfait les conditions*

$$\forall r \geq 1, \zeta(r) \geq \varepsilon r^{\frac{\varepsilon}{2}},$$

où $\varepsilon > 0$, et

$$\forall (p, r) \in \{1, 2, 3\} \times \mathbb{R}_+, (1 + |r|^p)\zeta^{(p)}(r) \leq K(1 + \zeta(r)),$$

où K désigne une constante positive.

i) L'énergie E_ν^ζ est bien définie sur \mathfrak{S}^ζ , et possède un minimiseur Q^ζ sur \mathcal{Q}^ζ .

ii) Ce minimiseur Q^ζ est solution de l'équation auto-consistante

$$P^\zeta \equiv Q^\zeta + P_-^\zeta = \chi_{]-\infty, 0[}(D^{Q^\zeta}) + \gamma^\zeta,$$

où D^{Q^ζ} est l'opérateur de Fock donné par

$$D^{Q^\zeta} \equiv D^\zeta + \alpha(\rho_{Q^\zeta} - \nu) * \frac{1}{|\cdot|},$$

tandis que γ^ζ est un opérateur de rang fini, de noyau intégral égal à

$$\gamma^\zeta(x, y) = \sum_{i=1}^M \tau_i \psi_i(x) \psi_i(y)^*.$$

Les nombres réels τ_i sont compris entre 0 et 1. La famille $(\psi_i)_{1 \leq i \leq M}$ forme une base orthonormée du noyau de l'opérateur D^{Q^ζ} .

iii) Il existe une constante strictement positive θ_ζ telle que, si

$$\alpha \|\nu\|_c \leq \theta_\zeta, \tag{II.34}$$

l'opérateur γ^ζ est nul. Le minimiseur Q^ζ est alors unique, et vérifie

$$q_\nu^\zeta \equiv \text{tr}_{P_-^\zeta}(Q^\zeta) = 0. \tag{II.35}$$

Le Théorème II.2 est une adaptation à la nouvelle coupure ultraviolette du résultat de C. Hainzl, M. Lewin et É. Séré [78] pour la coupure brutale. L'interprétation est identique. Sous la condition (II.34), le vide polarisé est représenté par le projecteur spectral P^ζ sur le spectre négatif de l'opérateur de Fock D^{Q^ζ} . Ce vide reste neutre par l'identité (II.35).

De manière similaire, la construction des états fondamentaux à N électrons s'étend à ce nouveau modèle.

Théorème II.3 ([67]). *Soit $\Lambda > 0$, $\alpha \geq 0$, et $\nu \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$ tel que $\int_{\mathbb{R}^3} \nu = Z \in \mathbb{R}$. On suppose que la fonction ζ satisfait les hypothèses du Théorème II.2, et on note $\mathcal{Q}^\zeta(q)$, le secteur de charges défini par*

$$\forall q \in \mathbb{R}, \mathcal{Q}^\zeta(q) \equiv \{Q \in \mathcal{Q}^\zeta, \text{ t.q. } \text{tr}_{P_-^\zeta}(Q) = q\}.$$

Il existe alors deux constantes $q_m^\zeta \in [-\infty, q_M^\zeta]$ et $q_M^\zeta \in [q_m^\zeta, +\infty]$ qui satisfont les conditions suivantes.

(i) L'énergie E_ν^ζ admet un minimiseur Q_q^ζ dans le secteur de charge $\mathcal{Q}^\zeta(q)$ si et seulement si

$$q_m^\zeta \leq q \leq q_M^\zeta.$$

(ii) Sous cette condition, un minimiseur Q_q^ζ est solution de l'équation auto-consistante

$$P_q^\zeta = Q_q^\zeta + P_-^\zeta = \chi_{]-\infty, \mu_q^\zeta[}(D^{Q_q^\zeta}) + \gamma_q^\zeta.$$

L'opérateur de Fock $D^{Q_q^\zeta}$ est égal à

$$D^{Q_q^\zeta} \equiv D^\zeta + \alpha(\rho_{Q_q^\zeta} - \nu) * \frac{1}{|\cdot|}.$$

Le nombre $\mu_q^\zeta \in [-1, 1]$ est le niveau de Fermi de l'état électronique associé à l'opérateur P_q^ζ . L'opérateur γ_q^ζ est auto-adjoint, de rang fini si $\mu_q^\zeta \neq \pm 1$, à trace, sinon, et d'image incluse dans le noyau de l'opérateur $D^{Q_q^\zeta} - \mu_q^\zeta Id$. Il satisfait la condition $0 \leq \gamma_q^\zeta \leq Id$.

(iii) Le nombre q_ν^ζ de la formule (II.35), et le nombre Z , appartiennent au segment $[q_m^\zeta, q_M^\zeta]$.

L'avantage à choisir cette coupure ultraviolette plus régulière se manifeste lorsqu'il s'agit de calculer des bornes sur les nombres q_m^ζ et q_M^ζ . Dans le cas où la fonction ζ est égale à

$$\zeta(r) = r, \tag{II.36}$$

nous avons pu reprendre à notre compte un argument développé par E.H. Lieb [101] dans le cas non relativiste, pour obtenir les estimations suivantes.

Théorème II.4 ([67]). *Soit $\Lambda > 4$. On suppose que la fonction ζ est donnée par la formule (II.36), tandis que la fonction $\nu \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$ est positive, radiale, et satisfait la condition $\int_{\mathbb{R}^3} \nu = Z \in \mathbb{R}$. Il existe alors des constantes strictement positives α_0 , θ_0 et K telles que les nombres q_ν^ζ , q_m^ζ et q_M^ζ du Théorème II.3, satisfont*

$$-K \frac{Z\alpha \ln(\Lambda) + \frac{1}{\Lambda} + \alpha \|\nu\|_{\mathcal{C}}^2}{1 - K\alpha \ln(\Lambda)} \leq q_m^\zeta \leq q_\nu^\zeta = 0, \tag{II.37}$$

et

$$Z \leq q_M^\zeta \leq \frac{2Z + K(Z\alpha \ln(\Lambda) + \frac{1}{\Lambda} + \alpha \|\nu\|_{\mathcal{C}}^2)}{1 - K\alpha \ln(\Lambda)}, \tag{II.38}$$

dès que $0 \leq \alpha \leq \alpha_0$, $\alpha \|\nu\|_{\mathcal{C}} \leq \theta_0 < 1$, et $K\alpha \ln(\Lambda) < 1$.

Remarque. Les hypothèses techniques, comme l'identité (II.36), ou les trois conditions sur le paramètre α , la densité ν , et la coupure ultraviolette Λ , semblent nécessaires pour adapter la preuve d'E.H. Lieb [101]. Le résultat demeure sans doute valable sous des hypothèses plus faibles.

Dans la limite non relativiste, c'est-à-dire lorsque $\alpha \rightarrow 0$, $\Lambda \rightarrow +\infty$, et $\alpha \ln(\Lambda) \rightarrow 0$, et pour une densité de charges ν fixée, les valeurs limites q_m^∞ et q_M^∞ des nombres q_m^ζ et q_M^ζ satisfont

$$0 = q_m^\infty < Z \leq q_M^\infty \leq 2Z. \tag{II.39}$$

Cette inégalité est identique à celle calculée par E.H. Lieb [101] pour le modèle de Hartree-Fock réduit (non relativiste). Pour ce dernier modèle [130], comme pour le modèle non réduit [131], J.-P. Solovej a amélioré la borne $2Z$ en une estimation de la forme $Z + K$, dans laquelle la constante K est indépendante de Z . Cette dernière estimation demeure sans doute valable que ce soit pour la coupure ultraviolette régulière, la coupure ultraviolette brutale, ou même, le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock non réduit.

b. Quelques éléments de la preuve du Théorème II.1

La construction des états fondamentaux à N électrons pour le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit repose sur des arguments similaires à ceux développés par C. Hainzl, M. Lewin et É. Séré [79] pour le modèle non réduit. La principale difficulté demeure l'absence de stabilité des secteurs de charges $\mathcal{Q}^\Lambda(q)$ par rapport à la convergence faible dans l'espace $\mathfrak{S}_{P_0}^\Lambda$. Cet obstacle se contourne à l'aide d'arguments de concentration-compacité qui procurent une condition de type Hunziker-van Winter-Zhislin sur la compacité d'une suite minimisante du problème (II.31). Étant donné un nombre réel q , une suite minimisante est compacte si et seulement si

$$\forall k \in \mathbb{R}^*, \mathcal{E}_\nu^{rBDF}(q) < \mathcal{E}_\nu^{rBDF}(q - k) + \mathcal{E}_0^{rBDF}(k). \quad (\text{II.40})$$

Cette condition implique bien sûr l'existence d'un minimiseur Q_q du problème II.31.

La preuve du Théorème II.1 se réduit à déterminer l'ensemble des nombres réels q pour lesquels la condition (II.40) est satisfaite. Ceci passe par le calcul d'une estimation précise de l'énergie minimisante $\mathcal{E}_\nu^{rBDF}(q)$, donnée par les inégalités

$$|q| - \frac{\alpha}{2}D(\nu, \nu) \leq \mathcal{E}_\nu^{rBDF}(q) \leq |q|, \quad (\text{II.41})$$

où l'application D est celle de la formule (II.17). L'estimation inférieure résulte de l'inégalité

$$\text{tr}_{P_0^0}(Q) = \text{tr}(|D^0|(Id - P_-^0)Q(Id - P_-^0)) - \text{tr}(|D^0|P_-^0QP_-^0) \geq |q|,$$

qui découle des inégalités $|D^0| \geq Id$, et $-P_-^0 \leq Q \leq Id - P_-^0$, et implique à son tour, que

$$E_\nu^{rBDF}(Q) \geq |q| + \frac{\alpha}{2}D(\nu - \rho_Q, \nu - \rho_Q) - \frac{\alpha}{2}D(\nu, \nu) \geq |q| - \frac{\alpha}{2}D(\nu, \nu).$$

L'estimation supérieure repose sur la construction d'un opérateur test d'énergie cinétique proche de $|q|$, et d'énergie électrostatique négligeable. Lorsque q est entier, cet opérateur, déjà construit dans [79], est essentiellement un projecteur de rang q sur des éléments convenablement mis à l'échelle, de l'espace propre positif de l'opérateur de Dirac D^0 .

Lorsque la densité de charges ν est identiquement nulle, les inégalités (II.41) s'écrivent

$$\mathcal{E}_0^{rBDF}(q) = |q|.$$

La condition (II.40) se réduit alors à

$$\forall k \in \mathbb{R}^*, \mathcal{E}_\nu^{rBDF}(q) < \mathcal{E}_\nu^{rBDF}(q - k) + |k|. \quad (\text{II.42})$$

L'inégalité large est toujours vraie. Les fonctions $q \mapsto f^\pm(q) = \mathcal{E}_\nu^{rBDF}(q) \pm q$ sont monotones sur \mathbb{R} . Par les estimations (II.41), elles sont bornées inférieurement, et elles vérifient

$$\lim_{q \rightarrow \pm\infty} f^\pm(q) = +\infty.$$

La différence cruciale avec le cas non réduit provient de la convexité de l'énergie réduite E_ν^{rBDF} . Cette convexité implique celle des fonctions f^\pm , puis l'existence de deux nombres $q_m \in]-\infty, +\infty[$ et $q_M \in [q_m, +\infty[$, tels que f^+ soit constante sur $]-\infty, q_m]$, et strictement croissante sur $[q_m, +\infty[$, et de même, f^- soit constante sur $[q_M, +\infty[$, et strictement décroissante sur $]-\infty, q_M]$. L'inégalité (II.42) est alors vérifiée si et seulement si $q \in [q_m, q_M]$. En particulier, il existe un minimiseur Q_q du problème (II.31) pour toute valeur q dans ce segment.

Il reste à prouver que, si le problème (II.31) possède un minimiseur pour une certaine valeur q , alors le nombre q appartient au segment $[q_m, q_M]$. C'est le cas lorsque q prend la valeur q_ν de la trace du minimiseur global Q_ν . L'inégalité (II.42) est bien vérifiée, puisque

$$\forall q \neq q_\nu, \mathcal{E}_\nu^{rBDF}(q_\nu) \leq \mathcal{E}_\nu^{rBDF}(q) < \mathcal{E}_\nu^{rBDF}(q) + |q - q_\nu|.$$

Le nombre q_ν est donc compris entre q_m et q_M .

C'est aussi le cas pour une solution Q_q associée à une valeur q distincte de q_ν . Par la formule (27), que nous démontrerons au Paragraphe II.3, les densités ρ_{Q_q} et ρ_{Q_ν} sont distinctes, de sorte que, par la stricte convexité de l'énergie E_ν^{rBDF} par rapport à la densité ρ_Q ,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_\nu^{rBDF}(tq + (1-t)q_\nu) &\leq E_\nu^{rBDF}(tQ_q + (1-t)Q_\nu) < tE_\nu^{rBDF}(Q_q) + (1-t)E_\nu^{rBDF}(Q_\nu) \\ &= t\mathcal{E}_\nu^{rBDF}(q) + (1-t)\mathcal{E}_\nu^{rBDF}(q_\nu). \end{aligned}$$

La fonction \mathcal{E}_ν^{rBDF} est strictement convexe sur le segment $[q, q_\nu]$. Comme le segment $[q_m, q_M]$ est le lieu où la fonction \mathcal{E}_ν^{rBDF} est strictement convexe, le nombre q est compris entre q_m et q_M , ce qui conclut la preuve du point (i).

Nous ne nous étendons pas sur le point (ii). La dérivation rigoureuse de l'équation auto-consistante (II.32) est une adaptation d'arguments développés par C. Hainzl, M. Lewin et É. Séré [77] pour écrire l'équation (II.18). Nous renvoyons à cet article pour de plus amples détails.

Nous préférons nous tourner vers la preuve que le nombre Z appartient lui-aussi au segment $[q_m, q_M]$. Cette preuve repose sur le caractère intégrable de la densité ρ_{Q_q} d'un minimiseur Q_q . Quand cette propriété est satisfaite et que le nombre q est strictement inférieur à Z , le spectre de l'opérateur D^{Q_q} contient une suite de valeurs propres qui convergent vers 1. De manière similaire, pour $q > Z$, il contient une suite de valeurs propres qui convergent vers -1 (voir l'article de J.-M. Barbaroux, W. Farkas, B. Helffer, et H. Siedentop [6]). Si jamais le nombre Z est plus grand que q_M , valeur pour laquelle le problème (II.31) a un minimiseur Q_{q_M} , l'opérateur de Fock $D^{Q_{q_M}}$ possède une valeur propre λ strictement supérieure au niveau de Fermi μ_{q_M} . Étant donné un vecteur propre ψ_λ pour cette valeur propre, le projecteur p_λ sur la droite engendrée par la fonction ψ_λ permet de définir des opérateurs

$$Q(t) \equiv Q_{q_M} + tp_\lambda,$$

qui appartiennent à l'ensemble $\mathcal{Q}^\Lambda(q_M + t)$ pour chaque nombre $t \in [0, 1]$. Leur énergie vaut

$$E_\nu^{rBDF}(Q(t)) = E_\nu^{rBDF}(Q_{q_M}) + t\langle \psi_\lambda, D^{Q_{q_M}}(\psi_\lambda) \rangle_{L^2} + \mathcal{O}(t^2) = \mathcal{E}_\nu^{rBDF}(q_M) + \lambda t + \mathcal{O}(t^2),$$

de sorte que

$$f^-(q_M + t) \leq f^-(q_M) + (\lambda - 1)t + \mathcal{O}(t^2).$$

Comme $\lambda < 1$, cette inégalité contredit la définition du nombre q_M . En conclusion, le nombre Z est bien inférieur à q_M . Il est de même supérieur à q_m . La preuve de la propriété (iii) se réduit ainsi à montrer que la densité ρ_{Q_q} est intégrable.

Cette dernière affirmation repose sur l'équation auto-consistante (II.32), laquelle se décompose sous la forme

$$Q_q = Q_{vide} + Q_{elec} + \gamma q. \quad (\text{II.43})$$

Dans cette expression, les opérateurs Q_{vide} et Q_{elec} sont égaux à

$$Q_{vide} \equiv \chi_{]-\infty, 0]}(D^{Q_q}) - P_-^0, \text{ et } Q_{elec} \equiv \chi_{]0, \mu_q]}(D^{Q_q}).$$

Les opérateurs Q_{elec} et γ_q sont des opérateurs à trace. Les densités de charges ρ_{elec} et ρ_{γ_q} qui leur sont associées, sont intégrables. Quant à l'opérateur Q_{vide} , il s'exprime par la formule de Cauchy comme

$$Q_{vide} = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{D^{Q_q} + i\eta} - \frac{1}{D^0 + i\eta} \right) d\eta = \sum_{k=1}^3 \alpha^k Q_k + \alpha^4 Q'_4, \quad (\text{II.44})$$

où les opérateurs Q_k et Q'_4 sont donnés par

$$Q_k = \frac{(-1)^{k+1}}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{D^0 + i\eta} \left((\rho_{Q_q} - \nu) * \frac{1}{|\cdot|} \frac{1}{D^0 + i\eta} \right)^k d\eta, \quad (\text{II.45})$$

et

$$Q'_4 = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{D^0 + i\eta} (\rho_{Q_q} - \nu) * \frac{1}{|\cdot|} \right)^2 \frac{1}{D^{Q_q} + i\eta} \left((\rho_{Q_q} - \nu) * \frac{1}{|\cdot|} \frac{1}{D^0 + i\eta} \right)^2 d\eta.$$

Les opérateurs Q_3 et Q'_4 sont des opérateurs à trace. Les densités de charges ρ_{Q_3} et $\rho_{Q'_4}$ sont intégrables. La densité de charges ρ_{Q_2} est identiquement nulle (voir l'article de W.H. Furry [52]).

L'analyse de l'opérateur Q_1 est plus délicate. Au moins lorsque $q \neq Z$, cet opérateur n'est pas à trace. Dans le cas contraire, le minimiseur Q_q serait lui-même un opérateur à trace, ce qui contredirait la formule (27) (voir le Paragraphe II.3). La densité de charges ρ_{Q_1} est néanmoins intégrable. Sa transformée de Fourier vaut en effet

$$\widehat{\rho_{Q_1}}(k) = -B_\Lambda^0(k) (\widehat{\rho_{Q_q}}(k) - \widehat{\nu}(k)), \quad (\text{II.46})$$

où le multiplicateur B_Λ^0 est défini par

$$B_\Lambda^0(k) = -\frac{1}{\pi^2 |k|^2} \int_{|\ell \pm k/2| \leq \Lambda} \frac{(\ell + \frac{k}{2}) \cdot (\ell - \frac{k}{2}) + 1 - E(\ell + \frac{k}{2})E(\ell - \frac{k}{2})}{E(\ell + \frac{k}{2})E(\ell - \frac{k}{2})(E(\ell + \frac{k}{2}) + E(\ell - \frac{k}{2}))} d\ell.$$

D'après les équations (II.43) et (II.44), la densité ρ_{Q_1} satisfait l'équation de convolution

$$\rho_{Q_1} = -b_\Lambda^0 * (\alpha^3 \rho_{Q_3} + \alpha^4 \rho_{Q'_4} + \rho_{Q_{elec}} + \rho_{\gamma_q} - \nu). \quad (\text{II.47})$$

La fonction b_Λ^0 est ici définie par sa transformée de Fourier

$$\widehat{b_\Lambda^0} \equiv \frac{B_\Lambda^0}{1 + \alpha B_\Lambda^0}.$$

Grâce à une définition intégrale alternative du multiplicateur B_Λ^0 introduite par W. Pauli et M.E. Rose [124], elle se calcule de manière explicite. Elle vaut

$$\begin{aligned} B_\Lambda^0(k) = & \frac{1}{\pi |k|^3} \left(-\frac{4|k|Z_\Lambda(|k|)}{3} - \frac{2}{3} (|k|^2 - 2)(4 + |k|^2)^{\frac{1}{2}} \operatorname{argth} \left(\frac{|k|Z_\Lambda(|k|)}{\sqrt{4 + |k|^2}} \right) \right. \\ & + \frac{|k|^3}{3} \ln \left(\frac{1 + Z_\Lambda(|k|)}{1 - Z_\Lambda(|k|)} \right) + \frac{8E(\Lambda)^3}{3} \left(1 - \frac{3|k|^2}{4E(\Lambda)^2} \right) \ln \left(\frac{Z_\Lambda(|k|)}{E(\Lambda)} \right) + \frac{44}{9} E(\Lambda)^3 \\ & \left. - 2E(\Lambda)|k|^2 - 2(3E(\Lambda)^2 + 1 + |k|^2)Z_\Lambda(|k|) + 3E(\Lambda)Z_\Lambda(|k|)^2 - \frac{8}{9}Z_\Lambda(|k|)^3 \right), \end{aligned}$$

où $E(r) \equiv \sqrt{1 + r^2}$ et $Z_\Lambda(r) \equiv (E(\Lambda) - E(\Lambda - r))/r$. Par ce calcul, la fonction b_Λ^0 est de classe \mathcal{C}^∞ et intégrable sur \mathbb{R}^3 . La densité ρ_{Q_1} est ainsi intégrable, puisque toutes les densités au second membre de l'équation (II.47) le sont. Il suffit alors de revenir aux équations (II.43) et (II.44) pour vérifier que la densité de charges ρ_{Q_q} est elle-aussi intégrable sur \mathbb{R}^3 , et conclure la preuve du Théorème II.1.

c. Quelques éléments de la preuve du Théorème II.4

La preuve des estimations (II.37) et (II.38) repose sur des arguments introduits par E.H. Lieb [101] dans le cas non relativiste, où des estimations de même nature, les inégalités (II.39), sont valables. Nous ne décrivons ici que la preuve de l'estimation supérieure de q_M^ζ . La preuve de la première inégalité de la formule (II.37) est similaire. Les deux autres inégalités se déduisent de la condition (II.34), qui est satisfaite sous les hypothèses du Théorème II.4. Cette condition impose que la valeur de q_M^ζ soit nulle, ce qui entraîne que $q_m^\zeta \leq 0 \leq Z \leq q_M^\zeta$.

Le calcul de la borne supérieure sur q_M^ζ commence par la décomposition du minimiseur $Q_{q_M}^\zeta$ associé sous la forme

$$Q_{q_M}^\zeta = Q_{vide}^\zeta + \Gamma^\zeta, \quad (\text{II.48})$$

où $\Gamma^\zeta \equiv Q_{elec}^\zeta + \gamma_{q_M}^\zeta$. Puisque la condition (II.34) est satisfaite, l'opérateur $\gamma_{q_M}^\zeta$ est nul. L'opérateur Γ^ζ est réduit au projecteur spectral

$$\Gamma^\zeta = \chi_{]0, \mu_{q_M}]}(D^{Q_{q_M}^\zeta}). \quad (\text{II.49})$$

Quant au vide polarisé Q_{vide}^ζ , il est neutre. La trace de Γ^ζ est donc égale à q_M^ζ . Le projecteur Γ^ζ est de rang fini. Sa densité de charges ρ_{Γ^ζ} est positive et intégrable sur \mathbb{R}^3 , d'intégrale égale à

$$\int_{\mathbb{R}^3} \rho_{\Gamma^\zeta} = \text{tr}(\Gamma^\zeta) = q_M^\zeta.$$

Cette identité qui, rappelons-le, n'est pas vraie pour la densité $\rho_{Q_{q_M}^\zeta}$, est le fil conducteur de la preuve du Théorème II.4, au sens où elle fournit un moyen d'atteindre la valeur q_M^ζ , et de la comparer à Z . Encore faut-il deviner comment faire surgir cette intégrale de l'équation (II.48) ?

Dans la lignée des arguments d'E.H. Lieb, un moyen d'y parvenir est de déduire de la formule (II.49) que l'opérateur $(D^{Q_{q_M}^\zeta} - Id)\Gamma^\zeta$ est négatif. La trace $\text{tr}(|x|(D^{Q_{q_M}^\zeta} - Id)\Gamma^\zeta)$ est donc négative, ce qui conduit à l'inégalité

$$\text{tr}\left(|x|(D^\zeta - Id)\Gamma^\zeta\right) + \alpha \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|x|}{|x-y|} \rho_{\Gamma^\zeta}(x) (\rho_{Q_{q_M}^\zeta}(y) - \nu(y)) dx dy \leq 0. \quad (\text{II.50})$$

L'intégrale de la densité ρ_{Γ^ζ} émerge de la formule (II.50), lorsque l'on tente d'estimer le second terme de cette formule. Ce terme se décompose en effet sous la forme

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|x|}{|x-y|} \rho_{\Gamma^\zeta}(x) (\rho_{Q_{q_M}^\zeta}(y) - \nu(y)) dx dy &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|x|+|y|}{|x-y|} \rho_{\Gamma^\zeta}(x) \rho_{\Gamma^\zeta}(y) dx dy \\ &\quad - \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|x|}{|x-y|} \rho_{\Gamma^\zeta}(x) \nu(y) dx dy + \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|x|}{|x-y|} \rho_{\Gamma^\zeta}(x) \rho_{Q_{vide}^\zeta}(y) dx dy. \end{aligned} \quad (\text{II.51})$$

Puisque $|x-y| \leq |x|+|y|$, la première intégrale se minore à l'aide de l'intégrale de ρ_{Γ^ζ} par

$$\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|x|+|y|}{|x-y|} \rho_{\Gamma^\zeta}(x) \rho_{\Gamma^\zeta}(y) dx dy \geq \frac{1}{2} \left(\int_{\mathbb{R}^3} \rho_{\Gamma^\zeta} \right)^2 = \frac{(q_M^\zeta)^2}{2}.$$

Pour la seconde intégrale, remarquons que les densités de charges ν et ρ_{Γ^ζ} sont toutes deux positives et radiales. L'identité de Newton pour les fonctions radiales, qui s'écrit

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{f(|y|)}{|x-y|} dy = \frac{4\pi}{|x|} \int_0^{|x|} f(r)r^2 dr + 4\pi \int_{|x|}^{+\infty} f(r)r dr,$$

pour une fonction $f : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$, implique donc que

$$\int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|x|}{|x-y|} \rho_{\Gamma^\zeta}(x) \nu(y) dx dy \leq \left(\int_{\mathbb{R}^3} \nu \right) \left(\int_{\mathbb{R}^3} \rho_{\Gamma^\zeta} \right) = Z q_M^\zeta.$$

Notons que le caractère radial de la fonction ρ_{Γ^ζ} résulte du caractère minimisant de l'opérateur Q_{q_M} , et du caractère radial de la densité de charges ν .

Les estimations de la dernière intégrale de la formule (II.51), données par

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|x|}{|x-y|} \rho_{\Gamma^\zeta}(x) \rho_{Q_{\zeta}^{\nu}}(y) dx dy \leq & K \alpha q_M \left((\ln(\Lambda) + \alpha^2 D(\nu, \nu)) (q_M + Z) \right. \\ & \left. + \alpha^2 D(\nu, \nu) + \alpha^3 D(\nu, \nu)^2 \right), \end{aligned}$$

sont plus techniques. Il en va de même pour le premier terme de l'inégalité (II.50), qui est contrôlé par

$$\text{tr} \left(|x| (D^\zeta - Id) \Gamma^\zeta \right) \geq -K q_M \left(\frac{1}{\Lambda} + \alpha (q_M + Z + D(\nu, \nu)) \right), \quad (\text{II.52})$$

où K désigne une constante positive. Nous renvoyons à [67] pour de plus amples précisions à ce sujet. Notons simplement que l'estimation (II.52) résulte de l'inégalité

$$(-\Delta)|x| + |x|(-\Delta) \geq 0,$$

démontrée, elle-aussi, par E.H. Lieb [101]. La restriction du Théorème II.4 au cas où $\zeta(r) = r$ provient du recours à cette inégalité.

Quoi qu'il en soit, la combinaison de ces différentes inégalités fournit l'estimation supérieure (II.38) de q_M^ζ , dès que α , $\alpha \|\nu\|_{\mathcal{C}}$ et $\alpha \ln(\Lambda)$ satisfont les trois conditions du Théorème II.4.

II.3 La renormalisation de la charge pour le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit

a. Énoncé des principaux résultats

Les états électroniques à N électrons, décrits par le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit à travers les minimiseurs Q_N du Théorème II.1, sont des objets singuliers sur le plan mathématique. Bien que leurs densités ρ_{Q_N} soient intégrables, les opérateurs Q_N ne sont pas à trace, en général.

Proposition II.1 ([67]). *Soit $\Lambda > 0$, $\alpha \geq 0$, et $\nu \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$ tel que $\int_{\mathbb{R}^3} \nu = Z \in \mathbb{R}$. On note q_m et q_M , les deux valeurs extrémales définies dans l'énoncé du Théorème II.1, et on se donne un nombre réel q dans le segment $[q_m, q_M]$. La densité de charges ρ_{Q_q} d'un minimiseur Q_q de l'énergie E_ν^{rBDF} dans l'ensemble $\mathcal{Q}^\Lambda(q)$ est intégrable sur \mathbb{R}^3 . De plus, son intégrale satisfait*

$$\int_{\mathbb{R}^3} (\nu - \rho_{Q_q}) = \frac{Z - q}{1 + \alpha B_\Lambda}, \quad (\text{II.53})$$

où

$$B_\Lambda \equiv B_\Lambda^0(0) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\frac{\Lambda}{\sqrt{1+\Lambda^2}}} \frac{z^2 - \frac{z^4}{3}}{1 - z^2} dz.$$

Lorsque $q \neq Z$, l'opérateur Q_q n'est pas à trace.³

3. La question de savoir si l'opérateur Q_Z est à trace, demeure, à notre connaissance, ouverte.

Remarque. La Proposition II.1 demeure valable lorsque la coupure ultraviolette brutale est remplacée par une coupure plus régulière donnée par l'opérateur D^ζ . La densité de charges $\rho_{Q_q^\zeta}$ reste intégrable, et son intégrale satisfait l'identité (II.53), à la condition de remplacer la constante B_Λ par la valeur

$$B_\Lambda^\zeta \equiv \frac{1}{\pi} \int_0^1 \frac{z^2 - \frac{z^4}{3}}{(1-z^2)(1 + \zeta(\frac{z^2}{\Lambda^2(1-z^2)}))} dz.$$

L'opérateur Q_q^ζ n'est pas à trace lorsque $q \neq Z$. Dans la suite, nous nous limiterons à la coupure ultraviolette brutale. Nous renvoyons à [67] pour le cas de la coupure régulière.

Cette singularité mathématique soulève une difficulté quant à l'interprétation physique de l'opérateur Q_N . En principe, cet opérateur décrit N électrons à travers la condition $\text{tr}(Q_N) = N$. Cependant, le potentiel électrostatique total qu'il engendre, combiné à la densité ν , ne vaut pas $\alpha(Z - N)/|x|$, lorsque $|x|$ est assez grand, comme ce devrait être le cas, mais est de l'ordre de

$$V_{ph}(x) \approx \frac{\alpha}{1 + \alpha B_\Lambda} \frac{Z - N}{|x|}. \quad (\text{II.54})$$

Passer à la limite $\Lambda \rightarrow +\infty$ semble être une solution pour résoudre cette difficulté, et, qui plus est, se débarrasser de la coupure ultraviolette. Ce n'est pas le cas. La constante B_Λ diverge de manière logarithmique lorsque $\Lambda \rightarrow +\infty$, comme l'indique son développement à l'ordre deux,

$$B_\Lambda = \frac{2}{3\pi} \ln(\Lambda) - \frac{5}{9\pi} + \frac{2}{3\pi} \ln(2) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Lambda^2}\right). \quad (\text{II.55})$$

Par la formule (II.54), le potentiel V_{phys} s'évanouit donc dans cette limite, ce qui n'a guère de sens sur le plan physique.

Cette divergence logarithmique apparaît aussi en électrodynamique quantique. Elle se traite par un procédé de renormalisation de la charge, lequel consiste à admettre que la constante de structure fine mesurée, n'est pas la constante nue α , mais la constante observée α_{ph} , donnée par la formule (28). Ce procédé, qui revient à un changement d'unités, passe par la définition de quantités observées, en lieu et place des quantités nues introduites dans le modèle initial (voir l'ouvrage de F.J. Dyson [48]). Dans le cas du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit, le minimiseur global Q_ν , ou les minimiseurs sous contrainte Q_q , sont entièrement déterminés, à travers les équations (II.18) et (II.32), par la seule densité totale, $\nu - \rho_{Q_\nu}$, ou $\nu - \rho_{Q_q}$, au moins pour α suffisamment petit. On peut donc se contenter de définir une densité totale observée ρ_{ph} . La définition la plus cohérente est alors celle de la formule (30), laquelle garantit que le potentiel observé V_{ph} se présente sous la forme (29).

Se pose bien sûr la question de la pertinence de cette renormalisation dans le cas d'une approximation de l'électrodynamique quantique telle que le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit. Répondre à cette question nécessite de recouvrer, au moins de manière approchée, les résultats perturbatifs de l'électrodynamique quantique. Dans le cas du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit, il s'agit de développer la densité totale ρ_{ph} par rapport au petit paramètre α_{ph} , et de vérifier que les termes du développement sont identiques à ceux calculés par l'électrodynamique quantique dans les mêmes conditions, soit en particulier, en l'absence de photons.

Le développement calculé à partir de l'électrodynamique quantique est indépendant de la coupure ultraviolette Λ . Cette propriété passe par une renormalisation multiplicative du paramètre α , qui exprime la constante de structure fine observée α_{ph} sous la forme $\alpha_{ph} = Z_3 \alpha$ (voir les ouvrages de J.D. Bjorken et S.D. Drell [20] et de C. Itzykson et J.-B. Zuber [87]). La constante

positive Z_3 dépend de la coupure ultraviolette Λ à travers la formule (28), de sorte que tout développement perturbatif dépend maintenant de Z_3 , en lieu et place de Λ . Il n'en est rien. Dans le cas du vide polarisé représenté par le minimiseur global Q_ν de l'énergie E_ν^{rBDF} , les termes du développement de la densité totale observée ρ_{ph} sont indépendants de Z_3 .

Théorème II.5 ([68]). *Soit $m \in \mathbb{N}$, et $\nu \in L^2(\mathbb{R}^3) \cap \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$ telle que*

$$\int_{\mathbb{R}^3} \ln(1 + |k|)^{2m+2} |\widehat{\nu}(k)|^2 dk < +\infty.$$

On note $\rho_{ph}(\alpha_{ph}, Z_3)$, la densité totale observée, qui est définie, à partir de la densité ρ_{Q_ν} du minimiseur Q_ν de l'énergie E_ν^{rBDF} sur l'ensemble \mathcal{Q}^Λ , par les formules (28) et (30), où la coupure ultraviolette Λ est fixée de sorte que $B_\Lambda = (1 - Z_3)/\alpha_{ph}$.

(i) Étant donné un nombre $0 < \epsilon < 1/2$, il existe deux constantes K et a , qui ne dépendent que de m , ϵ et ν , et une famille de fonctions $(\nu_n)_{0 \leq n \leq m}$ de $L^2(\mathbb{R}^3) \cap \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$, telles que

$$\left\| \rho_{ph}(\alpha_{ph}, Z_3) - \sum_{n=0}^m \nu_n \alpha_{ph}^n \right\|_{L^2 \cap \mathcal{C}} \leq K \alpha_{ph}^{m+1}, \quad (\text{II.56})$$

quels que soient $0 \leq \alpha_{ph} \leq a$ et $\epsilon \leq Z_3 \leq 1 - \epsilon$.

(ii) La fonction ν_0 est identiquement égale à ν . Les fonctions ν_n sont définies par la relation de récurrence

$$\nu_1 \equiv \mathcal{U}(\nu_0), \text{ et } \nu_n \equiv \mathcal{U}(\nu_{n-1}) + \sum_{j=3}^n \sum_{n_1 + \dots + n_j = n-j} F_j(\nu_{n_1}, \dots, \nu_{n_j}), \quad (\text{II.57})$$

pour $n \geq 2$. Dans cette formule, \mathcal{U} désigne l'opérateur de Uehling défini comme le multiplicateur de Fourier associé à la fonction

$$U(k) \equiv \frac{|k|^2}{4\pi} \int_0^1 \frac{z^2 - \frac{z^4}{3}}{1 + \frac{|k|^2(1-z^2)}{4}} dz = \frac{12 - 5|k|^2}{9\pi|k|^2} + \frac{\sqrt{4 + |k|^2}}{3\pi|k|^3} (|k|^2 - 2) \ln \left(\frac{\sqrt{4 + |k|^2} + |k|}{\sqrt{4 + |k|^2} - |k|} \right).$$

Les non-linéarités $F_j(\mu_1, \dots, \mu_j)$ sont définies comme les densités de charges des opérateurs

$$Q_j(\mu_1, \dots, \mu_j) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{D^0 + i\eta} \prod_{n=1}^j \left(\mu_n * \frac{1}{|\cdot|} \frac{1}{D^0 + i\eta} \right) d\eta.$$

(iii) Les fonctions ν_n ne dépendent pas de la valeur de Z_3 , mais uniquement de la densité de charges extérieure ν .

Remarque. Soulignons à nouveau que le Théorème II.5 n'est démontré que pour le minimiseur global Q_ν de l'énergie E_ν^{rBDF} sur l'ensemble \mathcal{Q}^Λ . L'extension au cas d'un minimiseur Q_q dans un secteur de charges $\mathcal{Q}^\Lambda(q)$ reste, à notre connaissance, ouverte.

Outre qu'elles ne dépendent pas de la constante Z_3 , les valeurs des fonctions ν_n sont cohérentes avec les résultats de l'électrodynamique quantique. La fonction ν_0 est égale à la densité de charges extérieure ν , qui est la densité totale du système dans le cas non relativiste. La fonction ν_1 engendre un potentiel coulombien égal au potentiel de Uehling, lequel est donné par

$$V_{Ueh}(x) \equiv \alpha_{ph}^2 \nu_1 * \frac{1}{|x|} = \frac{\alpha_{ph}^2}{3\pi} \int_1^{+\infty} (t^2 - 1)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2}{t^2} + \frac{1}{t^4} \right) \left(\int_{\mathbb{R}^3} e^{-2|x-y|t} \frac{\nu(y)}{|x-y|} dy \right) dt.$$

Ce potentiel est le premier terme correctif, calculé par les méthodes perturbatives de l'électrodynamique quantique, pour le potentiel engendré par le vide polarisé.

Comme dans le cas de l'électrodynamique quantique, se pose la question de la convergence de la série $\sum \nu_n \alpha_{ph}^n$. Afin de tenter d'y répondre, nous avons calculé les estimations suivantes des fonctions ν_n .

Proposition II.2 ([68]). *Soit $\nu \in L^2(\mathbb{R}^3) \cap \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$. Il existe des constantes positives A et K telles que*

$$\|(1 + \mathcal{U})^{m-n}(\nu_n)\|_{L^2 \cap \mathcal{C}} \leq A^{n+1} \max \left\{ \|(1 + \mathcal{U})^m(\nu)\|_{L^2 \cap \mathcal{C}}, (K \log(m))^{\frac{mn}{2}} \|(1 + \mathcal{U})^m(\nu)\|_{L^2 \cap \mathcal{C}}^{n+1} \right\}, \quad (\text{II.58})$$

quels que soient $m \in \mathbb{N}$ et $0 \leq n \leq m$.

Même dans le cas d'une fonction ν dont la transformée de Fourier est à support compact, ce qui implique que

$$\|(1 + \mathcal{U})^m(\nu)\|_{L^2 \cap \mathcal{C}} \leq C^m,$$

pour une constante positive C , les estimations (II.58) sont loin de fournir la convergence de la série $\sum \nu_n \alpha_{ph}^n$, ou même de sa transformée de Borel $\sum \nu_n \alpha_{ph}^n / n!$, comme il est quelquefois envisagé. Elles inclinent plutôt à penser que le développement ne reste qu'asymptotique (voir l'article de F.J. Dyson [47] dans le cas de l'électrodynamique quantique). Cette question reste néanmoins, à notre connaissance, toujours ouverte.

b. Quelques éléments des preuves de la Proposition II.1 et du Théorème II.5

La preuve de la Proposition II.1 reprend les arguments développés dans la démonstration du Théorème II.1. Rappelons que le minimiseur Q_q s'écrit par les identités (II.43) et (II.44),

$$Q_q = \alpha Q_1 + \alpha^2 Q_2 + \alpha^3 Q_3 + \alpha^4 Q'_4 + Q_{elec} + \gamma_q. \quad (\text{II.59})$$

Dans ce développement, tous les opérateurs sont à trace, à l'exception possible des opérateurs Q_1 et Q_2 . La preuve du Théorème II.1 garantit cependant que la densité de charges ρ_{Q_1} est intégrable, tandis que ρ_{Q_2} est identiquement nulle.

L'égalité (II.53) repose sur une décomposition alternative de l'opérateur Q_q . Un opérateur Γ sur \mathcal{H}^Λ peut s'exprimer sous la forme

$$\Gamma = \Gamma^{++} + \Gamma^{--} + \Gamma^{+-} + \Gamma^{-+}.$$

Les opérateurs $\Gamma^{\pm\pm}$ sont ici donnés par $\Gamma^{\pm\pm} \equiv P_\pm^0 \Gamma P_\pm^0$, où $P_+^0 \equiv Id - P_-^0$. Lorsque Γ est un opérateur à trace, tous les opérateurs $\Gamma^{\pm\pm}$ restent à trace. De plus, comme P_-^0 et P_+^0 sont deux projecteurs orthogonaux, les traces de Γ^{+-} et Γ^{-+} sont nulles. Les intégrales de leur densité sont par suite également nulles.

Appliquer ces arguments à l'identité (II.59) conduit à l'expression

$$\int_{\mathbb{R}^3} \rho_{Q_q} = \int_{\mathbb{R}^3} \rho_{Q_q^{++}} + \int_{\mathbb{R}^3} \rho_{Q_q^{--}} + \alpha \int_{\mathbb{R}^3} \rho_{Q_1^{+-} + Q_1^{-+}}. \quad (\text{II.60})$$

Comme Q_q appartient à l'espace $\mathfrak{S}_{P_-^0}^\Lambda$, les opérateurs Q_q^{++} et Q_q^{--} sont à trace. La somme des intégrales de leurs densités vaut de plus

$$\int_{\mathbb{R}^3} \rho_{Q_q^{++}} + \int_{\mathbb{R}^3} \rho_{Q_q^{--}} = \text{tr}(Q_q^{++}) + \text{tr}(Q_q^{--}) = \text{tr}_{P_-^0}(Q_q) = q. \quad (\text{II.61})$$

L'opérateur Q_1 est, quant à lui, donné par la formule (II.45), laquelle implique que $Q_1^{++} = Q_1^{-} = 0$, soit que $Q_1 = Q_1^{+-} + Q_1^{-+}$. Par la formule (II.46), il s'ensuit que

$$\int_{\mathbb{R}^3} \rho_{Q_1^{+-} + Q_1^{-+}} = \int_{\mathbb{R}^3} \rho_{Q_1} = -B_\Lambda \left(\int_{\mathbb{R}^3} \rho_{Q_q} - \int_{\mathbb{R}^3} \nu \right).$$

Combinée aux formules (II.60) et (II.61), cette dernière identité procure la formule (II.53). Lorsque $q \neq Z$, l'opérateur Q_q ne peut donc être à trace. Dans ce cas, l'intégrale de la densité ρ_{Q_q} serait égale à q , ce qui démentirait la formule (II.53).

La preuve du Théorème II.5 découle, quant à elle, du développement de l'équation (II.23) par rapport à la constante de structure fine nue α . Par la formule de Cauchy, cette équation s'exprime de façon identique à l'équation (II.44) sous la forme

$$Q_\nu = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{D^{Q_\nu} + i\eta} - \frac{1}{D^0 + i\eta} \right) d\eta = \sum_{j=1}^{+\infty} \alpha^j Q_j^\Lambda. \quad (\text{II.62})$$

Nous avons ici supposé que la condition (II.24) est satisfaite, afin que l'opérateur γ dans la formule (II.23) soit nul. Les opérateurs Q_j^Λ sont donnés par

$$Q_j^\Lambda = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{D^0 + i\eta} \left(\Pi_\Lambda(\nu - \rho_{Q_\nu}) * \frac{1}{|\cdot|} \Pi_\Lambda \frac{1}{D^0 + i\eta} \right)^j d\eta.$$

La dépendance en la coupure ultraviolette Λ apparaît explicitement, à travers les opérateurs de coupure Π_Λ définis par

$$\forall f \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4), \widehat{\Pi_\Lambda(f)} \equiv \widehat{f} 1_{B(0, \Lambda)}.$$

Le développement (II.62), a priori formel, est à l'origine du développement asymptotique du Théorème II.5. Traduit en terme des transformées de Fourier des densités ρ_{Q_ν} et $\rho_{Q_j^\Lambda}$, il s'écrit

$$\widehat{\rho_{Q_\nu}}(k) = -\alpha B_\Lambda^0(k) (\widehat{\rho_{Q_\nu}}(k) - \widehat{\nu}(k)) + \widehat{F}_\Lambda(\alpha(\nu - \rho_{Q_\nu}))(k). \quad (\text{II.63})$$

La densité $\rho_{Q_1^\Lambda}$ est ici substituée par sa valeur (II.46). La non-linéarité F_Λ est égale à

$$F_\Lambda(\mu) \equiv \sum_{n \geq 1} F_{2n+1, \Lambda}(\mu, \dots, \mu), \quad (\text{II.64})$$

où les applications $F_{n, \Lambda}(\mu_1, \dots, \mu_n)$ désignent les densités de charges des opérateurs

$$Q_{n, \Lambda}(\mu_1, \dots, \mu_n) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{D^0 + i\eta} \prod_{j=1}^n \left(\Pi_\Lambda \mu_j * \frac{1}{|\cdot|} \Pi_\Lambda \frac{1}{D^0 + i\eta} \right) d\eta.$$

Les applications $F_{n, \Lambda}$ sont identiquement nulles lorsque n est pair (voir l'article de W.H. Furry [52]), ce qui explique la définition (II.64) de la fonctionnelle F_Λ .

Dans les variables observés α_{ph} et ρ_{ph} , définies par les formules (28) et (30), l'équation (II.63) se réduit à

$$(1 - \alpha_{ph} U_\Lambda(k)) \widehat{\rho_{ph}}(k) + \widehat{F}_\Lambda(\alpha_{ph} \rho_{ph})(k) = \widehat{\nu}_\Lambda(k),$$

où $U_\Lambda(k) \equiv B_\Lambda - B_\Lambda^0(k)$ et $\widehat{\nu}_\Lambda(k) \equiv \widehat{\nu}(k) 1_{B(0, 2\Lambda)}(k)$. La substitution dans cette équation de la fonction ρ_{ph} par un développement formel de la forme

$$\rho_{ph} = \sum_{n \geq 0} \nu_{n, \Lambda} \alpha_{ph}^n, \quad (\text{II.65})$$

fournit la valeur des coefficients $\nu_{n, \Lambda}$. Ils sont donnés par les relations de récurrence

$$\nu_{0, \Lambda} = \nu_\Lambda, \quad \nu_{1, \Lambda} = \mathcal{U}_\Lambda(\nu_\Lambda), \quad \text{et} \quad \nu_{n, \Lambda} = \mathcal{U}_\Lambda(\nu_{n-1, \Lambda}) + \sum_{j=3}^n \sum_{n_1 + \dots + n_j = n-j} F_{j, \Lambda}(\nu_{n_1, \Lambda}, \dots, \nu_{n_j, \Lambda}), \quad (\text{II.66})$$

pour $n \geq 2$, où \mathcal{U}_Λ désigne le multiplicateur de Fourier associé à la fonction U_Λ .

Le développement (II.56) s'obtient alors en deux étapes. Il s'agit d'abord de justifier le développement formel (II.65) comme un développement asymptotique jusqu'au rang m de la fonction ρ_{ph} . Sous les hypothèses du Théorème II.5, cette affirmation est vérifiée à travers l'inégalité

$$\left\| \rho_{ph} - \sum_{n=0}^m \nu_{n,\Lambda} \alpha_{ph}^n \right\|_{L^2 \cap \mathcal{C}} \leq K \alpha_{ph}^{m+1}, \quad (\text{II.67})$$

valable pour α_{ph} suffisamment petit.

Il s'avère ensuite nécessaire de comparer les coefficients $\nu_{n,\Lambda}$ aux fonctions ν_n . Les définitions (II.57) et (II.66) de ces deux familles de fonctions sont proches. La différence se réduit à l'introduction de la coupure ultraviolette Λ dans le second cas. Dans la limite $\Lambda \rightarrow +\infty$, cette coupure disparaît. En d'autres termes, les fonctions U_Λ et $F_{n,\Lambda}$ convergent, en un sens à préciser, vers les fonction U , respectivement, F_n . Nous renvoyons à [68] pour plus de précisions à ce sujet. Quoiqu'il en soit, les fonctions $\nu_{n,\Lambda}$ convergent vers les fonctions ν_n dans la limite $\Lambda \rightarrow +\infty$.

Cependant, ce n'est pas la limite $\Lambda \rightarrow +\infty$ qui est considérée dans le Théorème II.5, mais la limite $\alpha_{ph} \rightarrow 0$, avec une coupure ultraviolette Λ fixée de sorte que la quantité $Z_3 = 1 - \alpha_{ph} B_\Lambda$ soit constante. Cette relation est le point crucial de la preuve. Par la formule (II.55), la fonction B_Λ diverge de manière logarithmique lorsque $\Lambda \rightarrow +\infty$. Fixer la quantité $1 - \alpha_{ph} B_\Lambda$ revient à supposer que Λ est une fonction du paramètre α_{ph} de l'ordre de

$$\Lambda \approx \exp \frac{3\pi Z_3}{2\alpha_{ph}},$$

lorsque $\alpha_{ph} \rightarrow 0$. Le développement de Taylor à l'origine de l'inverse de cette fonction est identiquement nul. Il ne peut jouer aucun rôle dans le développement asymptotique de la densité observée ρ_{ph} . C'est cette dernière propriété qui explique que les fonctions limites ν_n ne puissent dépendre du coefficient Z_3 . Sous les hypothèses du Théorème II.5, ceci se traduit par les estimations

$$\forall 0 \leq n \leq m, \quad \|\nu_{n,\Lambda} - \nu_n\|_{L^2 \cap \mathcal{C}} \leq K \alpha_{ph}^{m+1-n}.$$

Le développement (II.56) est alors une conséquence directe de l'inégalité (II.67), ce qui achève la preuve du Théorème II.5, ainsi que l'analyse du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit.

Bibliographie

- [1] Z.S. Agranovich and V.A. Marchenko. *The inverse problem of scattering theory*. Gordon and Breach Science Publishers, New York, London, 1963. Translated from the Russian by B.D. Seckler.
- [2] T. Alazard and R. Carles. WKB analysis for the Gross-Pitaevskii equation with non-trivial boundary conditions at infinity. *Ann. Inst. Henri Poincaré, Analyse Non Linéaire*, 26(3) :959–977, 2009.
- [3] B. Alvarez-Samaniego and D. Lannes. Large time existence for 3D water-waves and asymptotics. *Invent. Mat.*, 171(3) :485–541, 2008.
- [4] J. Avron, R. Seiler, and Barry Simon. The index of a pair of projections. *J. Funct. Anal.*, 120(1) :220–237, 1994.
- [5] V. Bach, J.-M. Barbaroux, B. Helffer, and H. Siedentop. On the stability of the relativistic electron-positron field. *Commun. Math. Phys.*, 201(2) :445–460, 1999.
- [6] J.-M. Barbaroux, W. Farkas, B. Helffer, and H. Siedentop. On the Hartree-Fock equations of the electron-positron field. *Commun. Math. Phys.*, 255(1) :131–159, 2005.
- [7] W. Ben Youssef and T. Colin. Rigorous derivation of Korteweg-de Vries-type systems from a general class of nonlinear hyperbolic systems. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 34(4) :873–911, 2000.
- [8] T.B. Benjamin. The stability of solitary waves. *Proc. Roy. Soc. Lond., Ser. A*, 328(1573) :153–183, 1972.
- [9] S. Benzoni-Gavage, R. Danchin, and S. Descombes. On the well-posedness of the Euler-Korteweg model in several space dimension. *Indiana Univ. Math. J.*, 56(4) :1499–1579, 2007.
- [10] O.V. Besov, V.P. Il'in, and S.M. Nikolskii. *Integral representations of functions and imbeddings theorems*, volume I of *Scripta Series in Mathematics*. John Wiley and Sons, New York, 1978.
- [11] F. Béthuel, R. Danchin, and D. Smets. On the linear wave regime of the Gross-Pitaevskii equation. *J. Anal. Math.*, 110(1) :297–338, 2009.
- [12] F. Béthuel, P. Gravejat, and J.-C. Saut. Existence and properties of travelling waves for the Gross-Pitaevskii equation. In A. Farina and J.-C. Saut, editors, *Stationary and time dependent Gross-Pitaevskii equations*, volume 473 of *Contemp. Math.*, pages 55–104. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2008.
- [13] F. Béthuel, P. Gravejat, and J.-C. Saut. On the KP-I transonic limit of two-dimensional Gross-Pitaevskii travelling waves. *Dynamics of PDE*, 5(3) :241–280, 2008.
- [14] F. Béthuel, P. Gravejat, and J.-C. Saut. Travelling waves for the Gross-Pitaevskii equation II. *Commun. Math. Phys.*, 285(2) :567–651, 2009.
- [15] F. Béthuel, P. Gravejat, J.-C. Saut, and D. Smets. Orbital stability of the black soliton for the Gross-Pitaevskii equation. *Indiana Univ. Math. J.*, 57(6) :2611–2642, 2008.

- [16] F. Béthuel, P. Gravejat, J.-C. Saut, and D. Smets. On the Korteweg-de Vries long-wave approximation of the Gross-Pitaevskii equation I. *Int. Math. Res. Not.*, 2009(14) :2700–2748, 2009.
- [17] F. Béthuel, P. Gravejat, J.-C. Saut, and D. Smets. On the Korteweg-de Vries long-wave approximation of the Gross-Pitaevskii equation II. *Comm. Partial Differential Equations*, 35(1) :113–164, 2010.
- [18] F. Béthuel, G. Orlandi, and D. Smets. Vortex rings for the Gross-Pitaevskii equation. *J. Eur. Math. Soc.*, 6(1) :17–94, 2004.
- [19] F. Béthuel and J.-C. Saut. Travelling waves for the Gross-Pitaevskii equation I. *Ann. Inst. Henri Poincaré, Physique Théorique*, 70(2) :147–238, 1999.
- [20] J.D. Bjorken and S.D. Drell. *Relativistic quantum fields*. McGraw-Hill, New York-Toronto-London-Sydney, 1965.
- [21] J.L. Bona, T. Colin, and D. Lannes. Long wave approximations for water waves. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 178(3) :373–410, 2005.
- [22] J.L. Bona and Y.A. Li. Analyticity of solitary-wave solutions of model equations for long waves. *SIAM J. Math. Anal.*, 27(3) :725–737, 1996.
- [23] J.L. Bona and Y.A. Li. Decay and analyticity of solitary waves. *J. Math. Pures Appl.*, 76(5) :377–430, 1997.
- [24] J.L. Bona and R. Smith. The initial-value problem for the Korteweg-de Vries equation. *Philos. Trans. Roy. Soc. London Ser. A*, 278(1287) :555–601, 1975.
- [25] J. Bourgain. Fourier transform restriction phenomena for certain lattice subsets and applications to nonlinear evolution equations. Part II : the KDV-equation. *Geom. and Funct. Anal.*, 3(3) :209–262, 1993.
- [26] L. Brillouin. La mécanique ondulatoire de Schrödinger. Une méthode générale de résolution par approximations successives. *C. R. Acad. Sci. Paris*, 183 :24–26, 1926.
- [27] R. Carles. *Semi-classical analysis for nonlinear Schrödinger equations*, volume 67. World Scientific, Hackensack, NJ, 2008.
- [28] T. Cazenave and P.-L. Lions. Orbital stability of standing waves for some nonlinear Schrödinger equations. *Commun. Math. Phys.*, 85(4) :549–561, 1982.
- [29] P. Chaix. *Une méthode de champ moyen relativiste et application à l'étude du vide de l'électrodynamique quantique*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie (Paris 6), 1990.
- [30] P. Chaix and D. Iracane. From quantum electrodynamics to mean field theory : I. The Bogoliubov-Dirac-Fock formalism. *J. Phys. B*, 22 :3791–3814, 1989.
- [31] P. Chaix, D. Iracane, and P.-L. Lions. From quantum electrodynamics to mean field theory : II. Variational stability of the vacuum of quantum electrodynamics in the mean-field approximation. *J. Phys. B*, 22 :3815–3828, 1989.
- [32] D. Chiron. Travelling waves for the Gross-Pitaevskii equation in dimension larger than two. *Nonlinear Anal.*, 58(1-2) :175–204, 2004.
- [33] D. Chiron and M. Maris. Qualitative properties of travelling waves for the nonlinear Schrödinger equation with nonzero condition at infinity. I. *Preprint*, 2011.
- [34] D. Chiron and M. Maris. Qualitative properties of travelling waves for the nonlinear Schrödinger equation with nonzero condition at infinity. II. *Preprint*, 2011.
- [35] D. Chiron and F. Rousset. Geometric optics and boundary layers for nonlinear Schrödinger equations. *Commun. Math. Phys.*, 288(2) :503–546, 2009.
- [36] D. Chiron and F. Rousset. The KdV/KP-I limit of the nonlinear Schrödinger equation. *SIAM J. Math. Anal.*, 42(1) :64–96, 2010.

- [37] C. Coste. Nonlinear Schrödinger equation and superfluid hydrodynamics. *Eur. Phys. J. B*, 1(2) :245–253, 1998.
- [38] W. Craig. An existence theory for water waves and the Boussinesq and Korteweg-de Vries scaling limits. *Comm. Partial Differential Equations*, 10(8) :787–1003, 1985.
- [39] A. de Bouard and J.-C. Saut. Solitary waves of generalized Kadomtsev-Petviashvili equations. *Ann. Inst. Henri Poincaré, Analyse Non Linéaire*, 14(2) :211–236, 1997.
- [40] A. de Bouard and J.-C. Saut. Symmetries and decay of the generalized Kadomtsev-Petviashvili solitary waves. *SIAM J. Math. Anal.*, 28(5) :1064–1085, 1997.
- [41] A. de Laire. Non-existence for travelling waves with small energy for the Gross-Pitaevskii equation in dimension $N \geq 3$. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 347(7-8) :375–380, 2009.
- [42] G. de Vries and D.J. Korteweg. On the change of form of long waves advancing in a rectangular canal, and on a new type of long stationary wave. *Phil. Mag.*, 39 :422–433, 1895.
- [43] L. di Menza and C. Gallo. The black solitons of one-dimensional NLS equations. *Nonlinearity*, 20(2) :461–496, 2007.
- [44] P.A.M. Dirac. The quantum theory of the electron. *Proc. Roy. Soc. A*, 117 :610–624, 1928.
- [45] P.A.M. Dirac. The quantum theory of the electron. II. *Proc. Roy. Soc. A*, 118 :351–361, 1928.
- [46] P.A.M. Dirac. A theory of electrons and protons. *Proc. Roy. Soc. A*, 126 :360–365, 1930.
- [47] F.J. Dyson. Divergence of perturbation theory in quantum electrodynamics. *Phys. Rev.*, 85(4) :631–632, 1952.
- [48] F.J. Dyson. *Advanced quantum mechanics*. World Scientific, Hackensack, NJ, 2007. Translated by D. Derbes.
- [49] G.E. Falkovitch and S.K. Turitsyn. Stability of magnetoelastic solitons and self-focusing of sound in antiferromagnet. *Sov. Phys. JETP*, 62 :146–152, 1985.
- [50] A. Farina. From Ginzburg-Landau to Gross-Pitaevskii. *Monatsh. Math.*, 139 :265–269, 2003.
- [51] V. Fock. Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems. *Zts. f. Phys.*, 61(1-2) :126–148, 1930.
- [52] W.H. Furry. A symmetry theorem in the positron theory. *Phys. Rev.*, 51(2) :125–129, 1937.
- [53] C. Gallo. Schrödinger group on Zhidkov spaces. *Adv. Differential Equations*, 9(5-6) :509–538, 2004.
- [54] C. Gallo. The Cauchy problem for defocusing nonlinear Schrödinger equations with non-vanishing initial data at infinity. *Comm. Partial Differential Equations*, 33(4-6) :729–771, 2008.
- [55] I.M. Gel'fand and B.M. Levitan. On the determination of a differential equation from its spectral function. *Izvestiya Akad. Nauk. SSSR Ser. Mat.*, 15 :309–360, 1951.
- [56] P. Gérard. Remarques sur l'analyse semi-classique de l'équation de Schrödinger non linéaire. *Sémin. Équ. Dériv. Partielles 1992-1993*, Exp. N° XIII :11 pp., 1993.
- [57] P. Gérard. The Cauchy problem for the Gross-Pitaevskii equation. *Ann. Inst. Henri Poincaré, Analyse Non Linéaire*, 23(5) :765–779, 2006.
- [58] P. Gérard. The Gross-Pitaevskii equation in the energy space. In A. Farina and J.-C. Saut, editors, *Stationary and time dependent Gross-Pitaevskii equations*, volume 473 of *Contemp. Math.*, pages 129–148. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2008.

- [59] P. Gérard and Z. Zhang. Orbital stability of traveling waves for the one-dimensional Gross-Pitaevskii equation. *J. Math. Pures Appl.*, 91(2) :178–210, 2009.
- [60] O. Goubet. Two remarks on solutions of Gross-Pitaevskii equations on Zhidkov spaces. *Monatsh. Math.*, 151(1) :39–44, 2007.
- [61] P. Gravejat. Limit at infinity for travelling waves in the Gross-Pitaevskii equation. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 336(2) :147–152, 2003.
- [62] P. Gravejat. A non-existence result for supersonic travelling waves in the Gross-Pitaevskii equation. *Commun. Math. Phys.*, 243(1) :93–103, 2003.
- [63] P. Gravejat. Decay for travelling waves in the Gross-Pitaevskii equation. *Ann. Inst. Henri Poincaré, Analyse Non Linéaire*, 21(5) :591–637, 2004.
- [64] P. Gravejat. Limit at infinity and nonexistence results for sonic travelling waves in the Gross-Pitaevskii equation. *Differential Integral Equations*, 17(11-12) :1213–1232, 2004.
- [65] P. Gravejat. Asymptotics for the travelling waves in the Gross-Pitaevskii equation. *Asymptot. Anal.*, 45(3-4) :227–299, 2005.
- [66] P. Gravejat. First order asymptotics for the travelling waves in the Gross-Pitaevskii equation. *Adv. Differential Equations*, 11(3) :259–280, 2006.
- [67] P. Gravejat, M. Lewin, and É. Séré. Ground state and charge renormalization in a nonlinear model of relativistic atoms. *Commun. Math. Phys.*, 286(1) :179–215, 2009.
- [68] P. Gravejat, M. Lewin, and É. Séré. Renormalization and asymptotic expansion of Dirac’s polarized vacuum. *Commun. Math. Phys.*, in press, 2011.
- [69] E. Grenier. Semiclassical limit of the nonlinear Schrödinger equation in small time. *Proc. Amer. Math. Soc.*, 126(2) :523–530, 1998.
- [70] M. Grillakis, J. Shatah, and W.A. Strauss. Stability theory of solitary waves in the presence of symmetry I. *J. Funct. Anal.*, 74(1) :160–197, 1987.
- [71] M. Grillakis, J. Shatah, and W.A. Strauss. Stability theory of solitary waves in the presence of symmetry II. *J. Funct. Anal.*, 94(2) :308–348, 1990.
- [72] E.P. Gross. Hydrodynamics of a superfluid condensate. *J. Math. Phys.*, 4(2) :195–207, 1963.
- [73] C. Gui. Hamiltonian identities for elliptic partial differential equations. *J. Funct. Anal.*, 254(4) :904–933, 2008.
- [74] S. Gustafson, K. Nakanishi, and T.-P. Tsai. Scattering for the Gross-Pitaevskii equation. *Math. Res. Lett.*, 13(2) :273–285, 2006.
- [75] S. Gustafson, K. Nakanishi, and T.-P. Tsai. Global dispersive solutions for the Gross-Pitaevskii equation in two and three dimensions. *Ann. Henri Poincaré*, 8(7) :1303–1331, 2007.
- [76] S. Gustafson, K. Nakanishi, and T.-P. Tsai. Scattering theory for the Gross-Pitaevskii equation in three dimensions. *Commun. Cont. Math.*, 11(4) :657–707, 2009.
- [77] C. Hainzl, M. Lewin, and É. Séré. Existence of a stable polarized vacuum in the Bogoliubov-Dirac-Fock approximation. *Commun. Math. Phys.*, 257(3) :515–562, 2005.
- [78] C. Hainzl, M. Lewin, and É. Séré. Self-consistent solution for the polarized vacuum in a no-photon QED model. *J. Phys. A, Math. Gen.*, 38(20) :4483–4499, 2005.
- [79] C. Hainzl, M. Lewin, and É. Séré. Existence of atoms and molecules in the mean-field approximation of no-photon quantum electrodynamics. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 192(3) :453–499, 2009.

- [80] C. Hainzl, M. Lewin, É. Séré, and J.-P. Solovej. A minimization method for relativistic electrons in a mean-field approximation of quantum electrodynamics. *Phys. Rev. A*, 76(5) :052104, 2007.
- [81] C. Hainzl, M. Lewin, and J.-P. Solovej. The mean-field approximation in quantum electrodynamics. The no-photon case. *Commun. Pure Appl. Math.*, 60(4) :546–596, 2007.
- [82] D. Hartree. The wave-mechanics of an atom with a non-coulomb central field. Part I. *Proc. Camb. Philos. Soc.*, 24(1) :89–312, 1928.
- [83] W. Hunziker. On the spectra of Schrödinger multiparticle hamiltonians. *Helv. Phys. Acta*, 39(5) :451–462, 1966.
- [84] W. Hunziker and I.M. Sigal. The quantum N-body problem. *J. Math. Phys.*, 41(6) :3348–3509, 2000.
- [85] A.D. Ionescu, C.E. Kenig, and D. Tataru. Global well-posedness of the KP-I initial-value problem in the energy space. *Invent. Math.*, 173(2) :265–304, 2008.
- [86] S.V. Iordanskii and A.V. Smirnov. Three-dimensional solitons in He II. *JETP Lett.*, 27(10) :535–538, 1978.
- [87] C. Itzykson and J.-B. Zuber. *Quantum field theory*. Monographs and Textbooks on Pure and Applied Physics. McGraw Hill, New York, 1985.
- [88] S. Jin, C.D. Levermore, and D.W. Mc Laughlin. The behaviour of solutions of the NLS equation in the semiclassical limit. In N.M. Ercolani, I.R. Gabitov, C.D. Levermore, and D. Serre, editors, *Singular limits of dispersive waves*, volume 320 of *NATO ASI, Series B : Physics*, pages 253–256. Plenum Publishing Corporation, New York, 1994.
- [89] C.A. Jones, S.J. Putterman, and P.H. Roberts. Motions in a Bose condensate V. Stability of solitary wave solutions of nonlinear Schrödinger equations in two and three dimensions. *J. Phys. A, Math. Gen.*, 19 :2991–3011, 1986.
- [90] C.A. Jones and P.H. Roberts. Motions in a Bose condensate IV. Axisymmetric solitary waves. *J. Phys. A, Math. Gen.*, 15 :2599–2619, 1982.
- [91] B.B. Kadomtsev and V.I. Petviashvili. On the stability of solitary waves in weakly dispersing media. *Sov. Phys. Dokl.*, 15(6) :539–541, 1970.
- [92] T. Kato. *Perturbation theory for linear operators*, volume 132 of *Grundlehren der mathematischen Wissenschaften*. Springer-Verlag, Berlin, first edition, 1966.
- [93] T. Kato. On the cauchy problem for the (generalized) Korteweg-de Vries equation. *Adv. Math. Suppl. Stud., Stud. Appl. Math.*, 8 :93–128, 1983.
- [94] C.E. Kenig, G. Ponce, and L. Vega. Well-posedness of the initial value problem for the Korteweg-de Vries equation. *J. Amer. Math. Soc.*, 4(2) :323–347, 1991.
- [95] Y.S. Kivshar and B. Luther-Davies. Dark optical solitons : physics and applications. *Phys. Rep.*, 298(2-3) :81–197, 1998.
- [96] H.A. Kramers. Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung. *Zts. f. Phys.*, 39(10-11) :828–840, 1926.
- [97] L.D. Landau. *On the quantum theory of fields. Bohr Volume*. Pergamon Press, Oxford, 1955. Reprinted in *Collected papers of L.D. Landau*. Pergamon Press, Oxford, 1965.
- [98] L.D. Landau and I.Y. Pomeranchuk. On point interaction in quantum electrodynamics. *Dokl. Akad. Nauk SSSR (N.S.)*, 102 :489–492, 1955.
- [99] P.D. Lax. Integrals of nonlinear equations of evolution and solitary waves. *Commun. Pure Appl. Math.*, 21(5) :467–490, 1968.
- [100] E.H. Lieb. Variational principles for many-fermion systems. *Phys. Rev. Lett.*, 46(7) :457–459, 1981.

- [101] E.H. Lieb. Bound on the maximum negative ionization of atoms and molecules. *Phys. Rev. A*, 29(6) :3018–3028, 1984.
- [102] E.H. Lieb and H. Siedentop. Renormalization of the regularized relativistic electron-positron field. *Commun. Math. Phys.*, 213(3) :673–683, 2000.
- [103] E.H. Lieb and B. Simon. The Hartree-Fock theory for Coulomb systems. *Commun. Math. Phys.*, 53(3) :185–194, 1977.
- [104] F. Lin and J. Wei. Traveling wave solutions of the Schrödinger map equation. *Commun. Pure Appl. Math.*, 63(12) :1585–1621, 2010.
- [105] F. Lin and P. Zhang. Semiclassical limit of the Gross-Pitaevskii equation in an exterior domain. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 179(1) :79–107, 2006.
- [106] Z. Lin. Stability and instability of traveling solitonic bubbles. *Adv. Differential Equations*, 7(8) :897–918, 2002.
- [107] P.-L. Lions. The concentration-compactness principle in the calculus of variations. The locally compact case. I. *Ann. Inst. Henri Poincaré, Analyse Non Linéaire*, 1(2) :109–145, 1984.
- [108] P.-L. Lions. The concentration-compactness principle in the calculus of variations. The locally compact case. II. *Ann. Inst. Henri Poincaré, Analyse Non Linéaire*, 1(4) :223–283, 1984.
- [109] P.-L. Lions. Solutions of Hartree-Fock equations for Coulomb systems. *Commun. Math. Phys.*, 109(1) :33–97, 1987.
- [110] Yue Liu. Blow up and instability of solitary-wave solutions to a generalized Kadomtsev-Petviashvili equation. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 353(1) :191–208, 2000.
- [111] P.I. Lizorkin. On multipliers of Fourier integrals in the spaces $L_{p,\theta}$. *Proc. Steklov Inst. Math.*, 89 :269–290, 1967.
- [112] O. Lopes. Radial symmetry of minimizers for some translation and rotation invariant functionals. *J. Differential Equations*, 124(2) :378–388, 1996.
- [113] E. Madelung. Quantumtheorie in Hydrodynamische form. *Zts. f. Phys.*, 40 :322–326, 1926.
- [114] S.V. Manakov, V.E. Zakharov, L.A. Bordag, A.R. Its, and V.B. Matveev. Two-dimensional solitons of the Kadomtsev-Petviashvili equation and their interaction. *Phys. Lett. A*, 63(3) :205–206, 1977.
- [115] M. Maris. Traveling waves for nonlinear Schrödinger equations with nonzero conditions at infinity. *Preprint*, 2009.
- [116] Y. Martel and F. Merle. Asymptotic stability of solitons for subcritical generalized KdV equations. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 157(3) :219–254, 2001.
- [117] Y. Martel and F. Merle. Instability of solitons for the critical generalized Korteweg-de Vries equation. *Geom. and Funct. Anal.*, 11(1) :74–123, 2001.
- [118] Y. Martel and F. Merle. Asymptotic stability of solitons of the subcritical gKdV equations revisited. *Nonlinearity*, 18 :55–80, 2005.
- [119] Y. Martel and F. Merle. Stability of two soliton collision for nonintegrable gKdV equations. *Commun. Math. Phys.*, 286(1) :39–79, 2009.
- [120] Y. Martel and F. Merle. Inelastic interaction of nearly equal solitons for the quartic gKdV equation. *Invent. Math.*, 183(3) :563–648, 2011.
- [121] L. Molinet, J.-C. Saut, and N. Tzevtkov. Global well-posedness for the KP-I equation. *Math. Ann.*, 324(2) :255–275, 2002.

- [122] K. Nakanishi. Scattering theory for the Gross-Pitaevskii equation. In A. Farina and J.-C. Saut, editors, *Stationary and time dependent Gross-Pitaevskii equations*, volume 473 of *Contemp. Math.*, pages 149–158. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2008.
- [123] N. Papanicolaou and P.N. Spathis. Semitopological solitons in planar ferromagnets. *Non-linearity*, 12(2) :285–302, 1999.
- [124] W. Pauli and M.E. Rose. Remarks on the polarization effects in the positron theory. *Phys. Rev.*, 49(6) :462–465, 1936.
- [125] L.P. Pitaevskii. Vortex lines in an imperfect Bose gas. *Sov. Phys. JETP*, 13(2) :451–454, 1961.
- [126] S.I. Pohozaev. On the eigenfunctions of the equation $\Delta u + \lambda f(u) = 0$. *Sov. Math. Dokl.*, 6 :1408–1411, 1965.
- [127] M. Reed and B. Simon. *Methods of modern mathematical physics IV. Analysis of operators*. Texts and Monographs in Physics. Academic Press, New-York, second edition, 1980.
- [128] G. Schneider and C.E. Wayne. The long-wave limit for the water wave problem I. The case of zero surface tension. *Comm. Pure Appl. Math.*, 53(12) :1475–1535, 2000.
- [129] P.C. Schuur. *Asymptotic analysis of soliton problems. An inverse scattering approach*, volume 1232 of *Lecture Notes in Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 1986.
- [130] J.-P. Solovej. Proof of the ionization conjecture in a reduced Hartree-Fock model. *Invent. Math.*, 104(2) :291–311, 1991.
- [131] J.-P. Solovej. The ionization conjecture in Hartree-Fock theory. *Annals of Math.*, 158(2) :509–576, 2003.
- [132] É. Tarquini. A lower bound on the energy of travelling waves of fixed speed for the Gross-Pitaevskii equation. *Monatsh. Math.*, 151(4) :333–339, 2007.
- [133] S. Ukai. Local solutions of the Kadomtsev-Petviashvili equations. *J. Fac. Sci. Univ. Tokyo, Sect. 1 A Math.*, 36 :193–209, 1989.
- [134] C. van Winter. Theory of finite systems of particles. I. The Green function. *Danske Vid. Selsk. Mat. Fys. Skr.*, 2(8) :1–60, 1964.
- [135] J. Wei and W. Yao. Asymptotic axisymmetry of the subsonic traveling waves to the Gross-Pitaevskii equation. *Commun. Contemp. Math.*, in press, 2011.
- [136] M.I. Weinstein. Modulational stability of ground states of nonlinear Schrödinger equations. *SIAM J. Math. Anal.*, 16(3) :472–491, 1985.
- [137] M.I. Weinstein. Lyapunov stability of ground states of nonlinear dispersive evolution equations. *Commun. Pure Appl. Math.*, 39(1) :51–67, 1986.
- [138] G. Wentzel. Eine Verallgemeinerung der Quantenbedingungen für die Zwecke der Wellenmechanik. *Zts. f. Phys.*, 38(6-7) :518–529, 1926.
- [139] V.E. Zakharov and E.A. Kuznetsov. Multi-scales expansion in the theory of systems integrable by the inverse scattering transform. *Phys. D*, 18(1-3) :455–463, 1986.
- [140] V.E. Zakharov and A.B. Shabat. Interaction between solitons in a stable medium. *Sov. Phys. JETP*, 37 :823–828, 1973.
- [141] P. Zhang. Semiclassical limit of nonlinear Schrödinger equation (II). *J. Partial Diff. Eqs.*, 15(2) :83–96, 2002.
- [142] P.E. Zhidkov. *Korteweg-De Vries and nonlinear Schrödinger equations : qualitative theory*, volume 1756 of *Lecture Notes in Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 2001.
- [143] G.M. Zhislin. A study of the spectrum of the Schrödinger operator for a system of several particles. *Trudy Moskow. Mat. Obsc.*, 9 :81–120, 1960.