Introduction à la théorie spectrale

Eric CANCES

M2 ANEDP

1 - Opérateurs linéaires

Dans toute cette section, $\mathcal{H}$ est un espace de Hilbert réel ou complexe.

On note $\langle \cdot | \cdot \rangle$ le produit scalaire de $\mathcal{H}$ et $\| \cdot \|$ la norme associée.

Définition. Un opérateur linéaire (on dit souvent simplement un opérateur) sur $\mathcal{H}$ est une application linéaire $A : D(A) \to \mathcal{H}$, où $D(A)$ est un sous-espace vectoriel de $\mathcal{H}$ appelé le domaine de A.

Définition. Le sous-espace vectoriel

$$\Gamma(A) = \{(u, Au) \in \mathcal{H} \times \mathcal{H},\ u \in D(A)\}$$

de $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$ est appelé le graphe de A.

Définition. Soit A_1 et A_2 deux opérateurs sur $\mathcal{H}$. A_2 est appelé une extension de A_1, ce qu'on note $A_1 \subset A_2$, si $\Gamma(A_1) \subset \Gamma(A_2)$, c'est-à-dire si

$$D(A_1) \subset D(A_2) \quad \text{et} \quad \forall u \in D(A_1),\ A_2 u = A_1 u.$$

Définition-Théorème. Un opérateur A sur $\mathcal{H}$ est dit

- fermé si $\Gamma(A)$ est un sous-espace vectoriel fermé de $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$. $D(A)$, muni du produit scalaire $(u, v)_{\Gamma(A)} := \langle u|v\rangle + \langle Au|Av\rangle$, est alors un Hilbert;
- fermable s'il possède une extension fermée. Dans ce cas, la plus petite extension fermée de A, notée $\overline{A}$, est appelé la fermeture de A et on a $\Gamma(\overline{A}) = \overline{\Gamma(A)}$ (fermeture dans $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$ du graphe de A).

Définition. Un opérateur borné sur $\mathcal{H}$ est un opérateur A sur $\mathcal{H}$ de domaine $D(A) = \mathcal{H}$ et tel que

$$\|A\| := \sup_{u \in \mathcal{H}} \frac{\|Au\|}{\|u\|} < \infty.$$

En d'autres termes, un opérateur borné sur $\mathcal{H}$ est un élément de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$.

Définition. Un opérateur qui n'admet pas d'extension bornée est appelé un opérateur non-borné.

Définition. Un opérateur A sur $\mathcal{H}$ est dit positif si

$$\forall u \in D(A), \quad \langle u | Au \rangle \geq 0.$$

Exemple: $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$, $D(H_0) = H^2(\mathbb{R}^d)$, $H_0 = -\frac{1}{2}\Delta$

H_0 est un opérateur positif non-borné sur $L^2(\mathbb{R}^d)$.

2 - Opérateurs auto-adjoints

Dans toute cette section, $\mathcal{H}$ est un espace de Hilbert réel ou complexe.

On note $\langle \cdot | \cdot \rangle$ le produit scalaire de $\mathcal{H}$ et $\| \cdot \|$ la norme associée.

Définition. **Soit A un opérateur sur $\mathcal{H}$ à domaine dense $D(A)$, et $D(A^*)$ l'espace vectoriel défini par**

$$D(A^*) = \{v \in \mathcal{H} \mid \exists w_v \in \mathcal{H} \text{ t.q. } \forall u \in D(A),\ \langle Au|v\rangle = \langle u|w_v\rangle\}\,. \qquad (1)$$

L'opérateur linéaire A^* sur $\mathcal{H}$, de domaine $D(A^*)$, défini par

$$\forall v \in D(A^*), \quad A^*v = w_v,$$

(si w_v existe, il est unique (Riesz)) est appelé l'adjoint de A.

Remarque. **Si $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, alors $A^* \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ et A^* est caractérisé par :**

$$\forall (u,v) \in \mathcal{H} \times \mathcal{H}, \quad \langle Au|v\rangle = \langle u|A^*v\rangle.$$

On note $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ l'espace vectoriel des opérateurs auto-adjoints de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$.

Théorème. **L'adjoint A^* d'un opérateur à domaine dense A est fermé.**

Plus précisément, $\Gamma(A^*) = (\mathcal{U}\,(\Gamma(A)))^\perp$ où $\mathcal{U}$ est l'opérateur unitaire sur $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$ défini par $\mathcal{U}(u,v) = (v,-u)$.

Définition. **Un opérateur A sur $\mathcal{H}$ de domaine dense $D(A)$ est dit**

1. **symétrique si $A \subset A^*$, i.e. si $\forall (u, v) \in D(A) \times D(A),\ \langle Au|v\rangle = \langle u|Av\rangle$;**
2. **auto-adjoint si $A = A^*$.**

Théorème. **Tout opérateur symétrique est fermable. Tout opérateur auto-adjoint est fermé.**

Un opérateur symétrique A admet donc deux extensions fermées naturelles:

- **son extension minimale $A_{\min} = \overline{A}$ (qui est symétrique);**
- **son extension maximale $A_{\max} = A^*$ (qui n'est pas symétrique en général).**

Toute extension auto-adjointe A_a de A est telle que $A_{\min} \subset A_a \subset A_{\max}$.
Rq: un opérateur symétrique peut n'avoir aucune extension auto-adjointe.

Si A est auto-adjoint, alors $A_{\min} = A = A_{\max}$.

Si $A_{\min} = A_{\max}$, alors $\overline{A}$ est l'unique extension auto-adjointe de A. On dit alors que A est essentiellement auto-adjoint.

Exemple. **Soit Ω un ouvert régulier de $\mathbb{R}^d$, et T_1, T_2, T_3, T_4, T_5 les opérateurs sur$L^2(\Omega)$ définis par**

- $D(T_1) = C_c^\infty(\Omega), \quad \forall u \in D(T_1),\ T_1 u = -\Delta u$,
- $D(T_2) = H_0^2(\Omega), \quad \forall u \in D(T_2),\ T_2 u = -\Delta u$,
- $D(T_3) = \left\{ u \in L^2(\Omega) \mid \Delta u \in L^2(\Omega) \right\}, \quad \forall u \in D(T_3),\ T_3 u = -\Delta u$,
- $D(T_4) = H_0^1(\Omega) \cap H^2(\Omega), \quad \forall u \in D(T_4),\ T_4 u = -\Delta u$,
- $D(T_5) = \left\{ u \in H^2(\Omega) \,|\, \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \right\}, \quad \forall u \in D(T_5),\ T_5 u = -\Delta u \quad (\Omega \neq \mathbb{R}^d)$.

T_1 **est symétrique, mais n'est pas auto-adjoint.**
$T_2 = \overline{T_1}$ **et** $T_3 = T_1^*$ **sont les extensions minimales et maximales de** T_1**.**

T_4 **et** T_5 **sont deux réalisations auto-adjointes de** T_1**, appelées respectivement réalisation de Dirichlet et réalisation de Neumann.**

Si $\Omega = \mathbb{R}^d$**, alors** $T_2 = T_3 = T_4$ **et** T_1 **est essentiellement auto-adjoint.**

Comment prouver qu'un opérateur est auto-adjoint ?

- **Utiliser la définition de l'adjoint.**
- **Prouver que l'opérateur considéré est unitairement équivalent à un opérateur auto-adjoint.**
- **Utiliser le critère fondamental d'auto-adjonction ci-dessous :**

  Théorème. **Soit A un opérateur symétrique sur $\mathcal{H}$. Les trois assertions suivantes sont équivalentes:**

  1. **A est auto-adjoint;**
  2. **Ran $(A+i) =$ Ran $(A-i) = \mathcal{H}$;**
  3. **$\forall\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R},$ Ran $(A+\lambda) =$ Ran $(A+\overline{\lambda}) = \mathcal{H}$.**

- **Utiliser le théorème d'extension de Friedrichs.**
- **Utiliser le théorème de Kato-Rellich.**
- **A défaut, utiliser une autre technique plus sophistiquée.**

Théorème (extension de Friedrichs). Soit a_0 une forme bilinéaire (cas réel) ou sesquilinéaire (cas complexe) définie sur un sous-espace dense $\mathcal{C}$ de $\mathcal{H}$ et bornée inférieurement, en ce sens qu'il existe $C \in \mathbb{R}$ tel que

$$\forall v \in \mathcal{C}, \quad a_0(v,v) \geq C\|v\|^2.$$

1. **Soit V le complété de Cauchy de $\mathcal{C}$ dans $\mathcal{H}$ pour la norme associée au produit scalaire $(u,v)_{\mathcal{C}} = a_0(u,v) + (1-C)\langle u|v\rangle$. Alors, a_0 se prolonge de manière unique en une forme bilinéaire ou sesquilinéaire a sur V**

$$\mathcal{C} \subset V \subset \mathcal{H}, \qquad \forall v \in \mathcal{C},\ a(v,v) = a_0(v,v), \qquad \forall v \in V,\ a(v,v) \geq C\|v\|^2,$$

   et V, muni du produit scalaire $(u,v)_V = a(u,v) + (1-C)\langle u|v\rangle$, a une structure d'espace de Hilbert avec $\mathcal{C}$ dense dans V (pour $\|\cdot\|_V$).

2. **Soit $D(A) = \{u \in V \mid v \mapsto a(u,v)$ est continue sur V muni de la norme $\|\cdot\|_{\mathcal{H}}\}$. Alors, $D(A)$ est dense dans $\mathcal{H}$ et l'opérateur A de domaine $D(A)$ défini par**

$$\forall (u,v) \in D(A) \times V,\ \langle Au|v\rangle = a(u,v)$$

   est auto-adjoint sur $\mathcal{H}$.

   L'espace V est appelé le domaine de forme de A et la forme quadratique $v \mapsto a(v,v)$ la forme quadratique associée à A.

Théorème de Kato-Rellich.

Définition. **Soient A et B deux opérateurs sur $\mathcal{H}$. On dit que B est A-borné (ou relativement borné par rapport à A) si $D(A) \subset D(B)$ et s'il existe deux constantes réelles positives a et b telles que**

$$\forall u \in D(A), \quad \|Bu\| \leq a\|Au\| + b\|u\|.$$

L'infimum des a tels que la propriété ci-dessus soit vraie est appelée la borne relative de B par rapport à A.

Théorème (Kato-Rellich). **Soit A un opérateur auto-adjoint sur $\mathcal{H}$ et B un opérateur symétrique sur $\mathcal{H}$.**

Si B est A-borné de borne relative strictement inférieure à 1, alors l'opérateur $H = A + B$ de domaine $D(H) = D(A)$ est auto-adjoint.

3 - Spectre d'un opérateur linéaire

Dans toute cette section, $\mathcal{H}$ est un espace de Hilbert réel ou complexe.

Définition-Théorème. **Soit A un opérateur fermé sur $\mathcal{H}$ de domaine $D(A)$.**

- **L'ensemble ouvert $\rho(A) = \{z \in \mathbb{C} \mid (z - A) : D(A) \to \mathcal{H}$ inversible$\}$ est appelé l'ensemble résolvant de A. La fonction analytique**

$$\rho(A) \ni z \mapsto R_z(A) := (z - A)^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$$

est appelé la résolvante de A. On a $R_z(A) - R_{z'}(A) = (z' - z)R_z(A)R_{z'}(A)$.

- **L'ensemble fermé $\sigma(A) = \mathbb{C} \setminus \rho(A)$ est appelé le spectre de A.**

- **$\sigma(A) = \sigma_{\mathrm{p}}(A) \cup \sigma_{\mathrm{c}}(A) \cup \sigma_{\mathrm{r}}(A)$ (union disjointe avec cette définition - mais d'autres définitions existent pour lesquelles ce n'est pas le cas), où $\sigma_{\mathrm{p}}(A)$, $\sigma_{\mathrm{c}}(A)$ et $\sigma_{\mathrm{r}}(A)$ sont respectivement le spectre ponctuel, le spectre continu et le spectre résiduel de A définis par**

$$\sigma_{\mathrm{p}}(A) = \{z \in \mathbb{C} \mid (z - A) : D(A) \to \mathcal{H} \text{ non-injectif}\} = \{\text{valeurs propres de } A\}$$

$$\sigma_{\mathrm{c}}(A) = \left\{z \in \mathbb{C} \mid (z - A) : D(A) \to \mathcal{H} \text{ injectif}, \mathrm{Ran}(z - A) \neq \overline{\mathrm{Ran}(z - A)} = \mathcal{H}\right\}$$

$$\sigma_{\mathrm{r}}(A) = \left\{z \in \mathbb{C} \mid (z - A) : D(A) \to \mathcal{H} \text{ injectif}, \overline{\mathrm{Ran}(z - A)} \neq \mathcal{H}\right\}$$

- **Si A est auto-adjoint, alors $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ et $\sigma_{\mathrm{r}}(A) = \emptyset$.**

- **Si $A \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$, alors $\sigma(A) \subset [-\|A\|, \|A\|]$ et $\sigma(A) \cap \{-\|A\|, \|A\|\} \neq \emptyset$.**

4 - Opérateurs compacts

Dans toute cette section, $\mathcal{H}$ est un espace de Hilbert réel ou complexe séparable.

On note $\langle\cdot|\cdot\rangle$ le produit scalaire de $\mathcal{H}$ et $\|\cdot\|$ la norme associée.

Définition. **Un opérateur borné $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ est dit compact si, pour toute suite bornée $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}$ d'éléments de $\mathcal{H}$, on peut extraire de $(Au_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une sous-suite $(Au_{n_k})_{k\in\mathbb{N}}$ qui converge fortement dans $\mathcal{H}$.**

Théorème. **L'ensemble $\mathcal{K}(\mathcal{H})$ des opérateurs compacts de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ forme un $*$-idéal bilatère fermé de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$. L'espace $\mathcal{K}(\mathcal{H})$ est la fermeture dans $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ de l'espace des opérateurs de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ de rang fini.**

Théorème. **Soit A un opérateur auto-adjoint compact sur $\mathcal{H}$. Alors, il existe une suite $(\lambda_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de nombres réels qui converge vers 0 et une base hilbertienne $(e_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de $\mathcal{H}$ telle que**

$$\forall n \in \mathbb{N}, \quad Ae_n = \lambda_n e_n.$$

Notation Bra-ket de Dirac: **si un opérateur auto-adjoint A sur $\mathcal{H}$ peut être diagonalisé dans une base orthonormale $(e_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de $\mathcal{H}$, on note**

$$A = \sum_{n\in\mathbb{N}} \lambda_n |e_n\rangle\langle e_n|.$$

Théorème. **Soit A un opérateur auto-adjoint compact sur $\mathcal{H}$ et $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ une fonction borélienne. Alors l'opérateur $f(A)$ défini par**

$$f(A) = \sum_{n \in \mathbb{N}} f(\lambda_n) |e_n\rangle\langle e_n|$$

est indépendant de la décomposition spectrale de A considérée. De plus,

- **$f(A) \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$ si la fonction f est (par ex.) lipschitzienne et nulle en zéro;**
- **$f(A) \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ si la fonction f est localement bornée et à valeurs réelles;**
- **cette définition de $f(A)$ coïncide avec la définition usuelle si f est un polynôme ou si $f(\lambda) = (z - \lambda)^{-1}$ avec $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ (résolvante de A en z).**

Définition. **Soit $A \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$. On note $|A|$ l'opérateur auto-adjoint compact positif sur $\mathcal{H}$ défini par $|A| = \sqrt{A^* A}$.**

Notons que si $A \in \mathcal{K}(\mathcal{H}) \cap \mathcal{S}(\mathcal{H})$, les définitions

$$|A| = \sqrt{A^* A} \qquad \text{et} \qquad |A| = \sum_{n \in \mathbb{N}} |\lambda_n| |e_n\rangle\langle e_n|$$

coïncident.

Théorème. **Soit $A \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$. Alors, il existe une suite $(\sigma_n)_{n\in\mathbb{N}}$ décroissante de nombres réels positifs qui converge vers 0 et deux bases hilbertiennes $(e_n)_{n\in\mathbb{N}}$ et $(f_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de $\mathcal{H}$ telles que**

$$A = \sum_{n\in\mathbb{N}} \sigma_n |f_n\rangle\langle e_n|.$$

Les nombres σ_n sont appelés les valeurs singulières de l'opérateur A.

Remarque.

- **Le théorème ci-dessus est l'analogue du théorème de décomposition singulière (*Singular Value Decomposition*, SVD) d'une matrice carrée.**
- **On a $|A| = \sum_{n\in\mathbb{N}} \sigma_n |e_n\rangle\langle e_n|$.**
- **Si A est de rang fini, la suite $(\sigma_n)_{n\in\mathbb{N}}$ et nulle à partir d'un certain rang ($\sigma_n = 0$ pour $n > \mathrm{Rank}(A)$).**
- **Si A est auto-adjoint compact, alors on a, quitte à renuméroter les valeurs propres de A, $\sigma_n = |\lambda_n|$.**

Définition. Un opérateur fermé A sur un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ est dit à résolvante compacte s'il existe $z_0 \in \rho(A)$ tel que $R_{z_0}(A) \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$.

Remarque. Si A est à résolvante compacte, alors $R_z(A) \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$ pour tout $z \in \rho(A)$.

Théorème. Soit A un opérateur auto-adjoint sur $\mathcal{H}$ à résolvante compacte. Alors, il existe une suite $(\lambda_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de réels telle que $|\lambda_n| \to \infty$ et une base hilbertienne $(e_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de $\mathcal{H}$ telles que

$$\forall n \in \mathbb{N}, \quad Ae_n = \lambda_n e_n.$$

Application : Laplacien de Dirichlet sur un ouvert borné de $\mathbb{R}^d$.

5 - Théorème spectral et applications

On note $\mathcal{B}(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ l'algèbre commutative des fonctions boréliennes bornées.

Définition. **Une famille spectrale sur $\mathcal{H}$ est une famille $(P_\lambda)_{\lambda\in\mathbb{R}}$ de projecteurs orthogonaux de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ vérifiant les propriétés suivantes :**

1. $P_\lambda P_\mu = P_{\min(\lambda,\mu)}$**, pour tout** $(\lambda,\mu)\in\mathbb{R}\times\mathbb{R}$**;**

2. $\underset{\mu\to\lambda,\ \mu>\lambda}{\textbf{s-lim}} P_\mu = P_\lambda$**, pour tout** $\lambda\in\mathbb{R}$**;**

3. $\underset{\lambda\to-\infty}{\textbf{s-lim}} P_\lambda = 0$ **et** $\underset{\lambda\to+\infty}{\textbf{s-lim}} P_\lambda = I$**.**

Définition. **Soit $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ l'ensemble des boréliens de $\mathbb{R}$. Un mesure spectrale dans $\mathcal{H}$ est une famille $(\Pi_B)_{B\in\mathcal{B}(\mathbb{R})}$ de projecteurs orthogonaux de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ telle que**

1. $\Pi_\emptyset = 0$ **et** $\Pi_\mathbb{R} = I$**;**

2. si $B = \bigcup_{n\in\mathbb{N}} B_n$ **est une famille dénombrable de sous-ensembles boréliens de $\mathbb{R}$ deux à deux disjoints (**$B_m\cap B_n=\emptyset$ **si** $m\neq n$**), alors**

$$\Pi_B = \underset{N\to+\infty}{\textbf{s-lim}} \sum_{n=0}^{N} \Pi_{B_n}.$$

Il y a une correspondance biunivoque entre l'ensemble des familles spectrales et l'ensemble des mesures spectrales. En effet,

- **si** $(\Pi_B)_{B\in\mathcal{B}(\mathbb{R})}$ **est une mesure spectrale, alors** $P_\lambda = \Pi_{]-\infty,\lambda]}$ **définit une famille spectrale ;**
- **si** $(P_\lambda)_{\lambda\in\mathbb{R}}$ **est une famille spectrale, il existe une unique mesure spectrale telle que** $\Pi_{]\lambda,\mu]} = P_\mu - P_\lambda$ **pour tout** $\lambda < \mu$**.**

Lemme. **Soit** $(\Pi_B)_{B\in\mathcal{B}(\mathbb{R})}$ **une mesure spectrale et** $(P_\lambda)_{\lambda\in\mathbb{R}}$ **la famille spectrale associée. Pour** $(u,v)\in\mathcal{H}\times\mathcal{H}$ **et** $B\in\mathcal{B}(\mathbb{R})$**, on pose**

$$\mu_{u,v}(B) = \langle v|\Pi_B u\rangle.$$

Alors $\mu_{u,v}$ **est une mesure complexe finie sur** $\mathbb{R}$**. Si** $u=v$**, cette mesure est positive et sa fonction de répartition est** $F_u(\lambda) = \|P_\lambda u\|^2$**. On a**

$$\mu_{u,v} = \frac{1}{4}\left(\mu_{u+v,u+v} - \mu_{u-v,u-v} + i\mu_{u-iv,u-iv} - i\mu_{u+iv,u+iv}\right).$$

Si $f:\mathbb{R}\to\mathbb{C}$ **est une fonction** $\mu_{u,v}$**-intégrable, resp.** $\mu_{u,u}$**-intégrable, on note**

$$\int_{\mathbb{R}} f\, d\mu_{u,v} = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda)\, d\langle u|P_\lambda v\rangle, \qquad \int_{\mathbb{R}} f\, d\mu_{u,u} = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda)\, d\|P_\lambda u\|^2.$$

Lemme. **Soit** $(P_\lambda)_{\lambda\in\mathbb{R}}$ **une famille spectrale,** $f \in C^0(\mathbb{R},\mathbb{C})$ **et** $u \in \mathcal{H}$**.**

1. **Soit** a **et** b **deux réels tels que** $a < b$**. Les sommes de Riemann**

$$\sum_{k=1}^{n-1} f(\lambda'_k)(P_{\lambda_{k+1}} - P_{\lambda_k})u$$

   avec $a = \lambda_1 < \lambda_2 < \cdots < \lambda_n = b$ **et** $\lambda'_k \in]\lambda_k, \lambda_{k+1}]$ **convergent fortement dans** $\mathcal{H}$ **lorsque** $\sup|\lambda_{k+1} - \lambda_k| \to 0$**. On note leur limite**

$$\int_a^b f(\lambda)\, dP_\lambda u \qquad \text{et on a} \qquad \left\| \int_a^b f(\lambda)\, dP_\lambda u \right\|^2 = \int_a^b |f(\lambda)|^2\, d\|P_\lambda u\|^2.$$

2. **Si l'intégrale**

$$\int_a^b f(\lambda)\, dP_\lambda u$$

   admet une limite forte dans $\mathcal{H}$ **lorsque** $a \to -\infty$ **et** $b \to +\infty$**, on note**

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(\lambda)\, dP_\lambda u$$

   cette limite.

Lemme. **Soit** $(P_\lambda)_{\lambda\in\mathbb{R}}$ **une famille spectrale,** $f \in C^0(\mathbb{R},\mathbb{C})$ **et** $u \in \mathcal{H}$**. Les conditions suivantes sont équivalentes :**

1. $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} f(\lambda)\, dP_\lambda u$ **existe ;**
2. $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} |f(\lambda)|^2\, d\|P_\lambda u\|^2$ **existe ;**
3. $\displaystyle v \mapsto F(v) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\lambda)\, d\langle v|P_\lambda u\rangle$ **est une forme anti-linéaire continue sur** $\mathcal{H}$**.**

Dans le cas où ces conditions sont vérifiées, on a

$$\left\|\int_{-\infty}^{+\infty} f(\lambda)\, dP_\lambda u\right\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} |f(\lambda)|^2\, d\|P_\lambda u\|^2.$$

Théorème. **Soit $(P_\lambda)_{\lambda\in\mathbb{R}}$ une famille spectrale. A $(P_\lambda)_{\lambda\in\mathbb{R}}$ on peut associer l'opérateur auto-adjoint A défini sur le domaine**

$$D(A) = \left\{ u \in \mathcal{H} \mid \int_{-\infty}^{+\infty} |\lambda|^2 \, d\|P_\lambda u\|^2 < +\infty \right\}. \tag{2}$$

par

$$\forall u \in D(A), \quad Au = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda \, dP_\lambda u. \tag{3}$$

Théorème (théorème spectral). **Soit A est un opérateur auto-adjoint sur $\mathcal{H}$. Alors, il existe une unique famille spectrale $(P_\lambda)_{\lambda\in\mathbb{R}}$ telle que (2)-(3) ait lieu. On notera $(P_\lambda^A)_{\lambda\in\mathbb{R}}$ cette famille spectrale, et $(\Pi_B^A)_{B\in\mathcal{B}(\mathbb{R})}$ la mesure spectrale associée. On a**

$$\frac{1}{2}\left(\Pi^A_{]a,b[} + \Pi^A_{[a,b]}\right) = \underset{\varepsilon\to 0^+}{\textbf{s-lim}} \frac{1}{2i\pi} \int_a^b \left(R_{\lambda-i\varepsilon}(A) - R_{\lambda+i\varepsilon}(A)\right) \, d\lambda \tag{4}$$

où $(R_z(A))_{z\in\rho(A)}$ est la résolvante de A.

Théorème (calcul fonctionnel dans $\mathcal{B}(\mathbb{R},\mathbb{C})$). **Si A est un opérateur auto-adjoint sur $\mathcal{H}$, il existe une unique application**

$$\Phi_A \,:\, \mathcal{B}(\mathbb{R},\mathbb{C}) \ni f \mapsto f(A) \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$$

vérifiant les propriétés suivantes:

1. Φ_A **est un homomorphisme de C*-algèbres commutatives :**

$$(\alpha f+\beta g)(A) = \alpha f(A)+\beta g(A), \quad (fg)(A) = f(A)g(A), \quad \overline{f}(A) = f(A)^*, \quad \mathbb{1}_{\mathbb{R}}(A) = I;$$

2. $\|f(A)\|_{\mathcal{L}(\mathcal{H})} \leq \|f\|_{L^\infty}$**;**

3. **si** $f_n(x) \to x$ **pour tout** $x \in \mathbb{R}$ **et si** $|f_n(x)| \leq |x|$ **pour tout** n **et tout** $x \in \mathbb{R}$**, alors** $\forall u \in D(A)$**,** $f_n(A)u \to Au$ **dans** $\mathcal{H}$**;**

4. **si** $f_n(x) \to f(x)$ **pour tout** $x \in \mathbb{R}$ **et si** $\sup \|f_n\|_{L^\infty} < \infty$**, alors** $\forall u \in \mathcal{H}$**,** $f_n(A)u \to f(A)u$ **dans** $\mathcal{H}$**.**

En outre, cette définition de $f(A)$ **coïncide avec la définition usuelle si** $f(\lambda) = (z-\lambda)^{-1}$ **avec** $z \in \mathbb{C}\backslash\mathbb{R}$ **(résolvante de** A **en** z**), ainsi que si** $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ **et** f **est DSE$_{0,\|A\|+\varepsilon}$. Enfin, si** $u \in D(A)$ **est tel que** $Au = \lambda u$**, alors** $f(A)u = f(\lambda)u$**.**

Théorème (calcul fonctionnel et mesures spectrales). **Soit A un opérateur auto-adjoint sur $\mathcal{H}$ et $(\Pi_B^A)_{B\in\mathcal{B}(\mathbb{R})}$ sa mesure spectrale. On a**

$$\forall B \in \mathcal{B}(\mathbb{R}), \quad \Pi_B^A := \mathbb{1}_B(A).$$

Théorème (calcul fonctionnel). **Soit $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ une fonction borélienne non-nécessairement bornée. L'opérateur $f(A)$ peut être défini par**

$$D(f(A)) := \left\{ u \in \mathcal{H} \mid \int_{-\infty}^{+\infty} |f(\lambda)|^2 \, d\|P_\lambda^A u\|^2 < \infty \right\}$$

et

$$\forall u \in D(f(A)), \quad f(A)u := \int_{-\infty}^{+\infty} f(\lambda)\, dP_\lambda^A u.$$

En particulier, $f(A)^* = \overline{f}(A)$ et donc si f est à valeurs réelles, alors $f(A)$ est auto-adjoint.

Théorème (lien entre spectre et mesure spectrale). Soit A un opérateur auto-adjoint sur $\mathcal{H}$ et $(\Pi_B^A)_{B\in\mathcal{B}(\mathcal{R})}$ la mesure spectrale qui lui est associée. On a les propriétés suivantes :

1. $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ **;**
2. **Si $A \geq c$ (i.e. si $\forall u \in D(A),\ \langle u|Au\rangle \geq c\|u\|^2$), alors $\sigma(A) \subset [c, +\infty[$;**
3. **Si A est borné, $\sigma(A) \subset [-\|A\|, \|A\|]$ et au moins l'une des deux extrémités de l'intervalle est dans $\sigma(A)$;**
4. $\lambda_0 \in \sigma_p(A)$ **si et seulement si $\Pi^A_{\{\lambda_0\}} \neq 0$. Le sous-espace propre associé à la valeur propre λ_0 est alors**
$$E_{\lambda_0} = \mathbf{Ran}(\Pi^A_{\{\lambda_0\}});$$
5. $\lambda_0 \in \sigma_c(A)$ **si et seulement si**
   (a) $\Pi^A_{\{\lambda_0\}} = 0$**,**
   (b) $\Pi^A_{[\lambda_0-\varepsilon,\lambda_0-\varepsilon]} \neq 0$ **pour tout $\varepsilon > 0$;**
6. $\sigma_r(A) = \emptyset$**.**

Théorème (forme quadratique associée à un opérateur auto-adjoint).
Soit A un opérateur auto-adjoint sur $\mathcal{H}$ de domaine $D(A)$.

1. Le domaine de forme de l'opérateur A est l'espace vectoriel

$$q(A) = \left\{ u \in \mathcal{H} \mid \int_{\mathbb{R}} |\lambda| \, d\|P_\lambda^A u\|^2 < \infty \right\} \qquad (\textbf{on a } D(A) \subset q(A) \subset \mathcal{H}).$$

2. La forme sesquilinéaire sur $q(A)$ définie par

$$\forall (u,v) \in q(A) \times q(A), \quad a(u,v) = \int_{\mathbb{R}} \lambda \, d\langle u | P_\lambda^A v \rangle$$

est appelée la forme quadratique associée à A. Le nombre complexe

$$\langle u | A | v \rangle = \int_{\mathbb{R}} \lambda \, d\langle u | P_\lambda^A v \rangle \qquad \textbf{est bien défini}$$

- **si $(u,v) \in D(A) \times \mathcal{H}$, auquel cas $\langle u|A|v\rangle = \langle Au|v\rangle$;**
- **si $(u,v) \in \mathcal{H} \times D(A)$, auquel cas $\langle u|A|v\rangle = \langle u|Av\rangle$;**
- **si $(u,v) \in q(A) \times q(A)$, auquel cas $\langle u|A|v\rangle = a(u,v)$.**

6 - Spectre essentiel et spectre discret

Définition. **Soit T un opérateur auto-adjoint sur $\mathcal{H}$. Le spectre de T, noté $\sigma(T)$, est la réunion de deux ensembles disjoints :**

- **le spectre discret de T**

  $\sigma_{\mathrm{d}}(T) = \{$ **ensemble des valeurs propres isolées de T de multiplicité finie** $\}$;

- **le spectre essentiel de T**

$$\sigma_{\mathrm{ess}}(T) = \sigma(T) \setminus \sigma_{\mathrm{d}}(T).$$

Le spectre essentiel de T est un sous-ensemble fermé de $\mathbb{R}$. Il contient

- **le spectre continu de T,**
- **les valeurs propres de T qui sont plongées dans le spectre continu,**
- **les valeurs propres isolées de T de multiplicité infinie.**

Définition. **Soit A et B deux opérateurs sur $\mathcal{H}$ tels que $D(A) \subset D(B)$. On dit que B est A-compact (ou relativement compact par rapport à A) si la restriction de B à $D(A)$ est un opérateur compact de $D(A)$, muni de la norme du graphe $\|u\|_{\Gamma(A)} = \big(\|u\|^2 + \|Au\|^2 \big)^{1/2}$, à valeurs dans $\mathcal{H}$.**

Remarque. **Pour montrer que B est A-compact, il suffit de montrer qu'il existe $\lambda \in \rho(A)$ (l'ensemble résolvant de A) tel que $BR_\lambda(A) \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$.**

On a alors $BR_A(\mu) \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$ pour tout $\mu \in \rho(A)$.

Théorème (Weyl). **Soit A un opérateur auto-adjoint sur $\mathcal{H}$ de domaine $D(A)$ et B un opérateur sur $\mathcal{H}$ symétrique et A-compact. Alors, l'opérateur $A + B$ de domaine $D(A + B) = D(A)$ est auto-adjoint sur $\mathcal{H}$ et**

$$\sigma_{\text{ess}}(A + B) = \sigma_{\text{ess}}(A).$$

Théorème (principe du minmax de Courant-Fischer). **Soit A un opérateur auto-adjoint sur $\mathcal{H}$, borné inférieurement, et $q(A)$ son domaine de forme. On définit pour $n \in \mathbb{N}^*$,**

$$\lambda_n(A) = \inf_{V \in \mathcal{V}_n} \sup_{\psi \in V,\, \|\psi\|=1} \langle \psi | A | \psi \rangle \tag{5}$$

où $\mathcal{V}_n$ désigne l'ensemble des sous-espaces vectoriels de $q(A)$ de dimension n. Alors, pour chaque $n \in \mathbb{N}^*$,

- **soit A possède au moins n valeurs propres (comptées avec leur multiplicité) inférieures à $\min(\sigma_{\mathrm{ess}}(A))$, auquel cas λ_n est la n-ième plus petite valeur propre de A,**
- **soit A possède au plus $n-1$ valeurs propres (comptées avec leur multiplicité) inférieures à $\min(\sigma_{\mathrm{ess}}(A))$, auquel cas $\lambda_n = \min(\sigma_{\mathrm{ess}}(A))$.**

Spectre des opérateurs de Schrödinger avec potentiels confinants

Théorème. **Soit $V \in C^0(\mathbb{R}^d)$ tel que $\lim_{|x|\to\infty} V(x) = +\infty$. L'opérateur**

$$H = -\frac{1}{2}\Delta + V \quad \textbf{de domaine} \quad D(H) = \left\{ u \in L^2(\mathbb{R}^d) \mid -\frac{1}{2}\Delta u + Vu \in L^2(\mathbb{R}^d) \right\}$$

est auto-adjoint sur $L^2(\mathbb{R}^d)$, borné inférieurement et à résolvante compacte. Son spectre est purement discret et est composé d'une suite croissante de réels positifs tendant vers $+\infty$.

Application : **l'oscillateur harmonique $V(x) = \frac{1}{2}|x|^2$.**

Spectre des opérateurs de Schrödinger avec potentiels "nuls à l'infini"

Théorème. **Soit $V \in L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^q(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ avec $d \leq 3$ et $2 \leq p \leq q < +\infty$. L'opérateur $H = -\frac{1}{2}\Delta + V$ de domaine $D(H) = H^2(\mathbb{R}^d)$ est auto-adjoint sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ et borné inférieurement, et $\sigma_{\rm ess}(H) = [0, +\infty)$.**

Application : **l'atome hydrogénoïde $d = 3$ et $V(x) = -Z|x|^{-1}$, $Z \in \mathbb{N}^*$.**

7 - Théorie des perturbations analytiques de Kato

Dans toute cette section, on fait les hypothèses suivantes:

- $\mathcal{H}$ **est un espace de Hilbert réel (pour simplifier);**
- H_0 **est un opérateur auto-adjoint sur** $\mathcal{H}$ **de domaine** $D(H_0)$**;**
- W **est un opérateur symétrique sur** $\mathcal{H}$**,** H_0**-borné;**
- $E_0 \in \sigma_{\rm d}(H_0)$ **est une valeur propre isolée de** H_0 **de multiplicité finie.**

Pour $\beta \in \mathbb{R}$**, on définit l'opérateur** $H(\beta) = H_0 + \beta W$ **sur** $\mathcal{H}$ **de domaine** $D(H_0)$**.**

Théorème (perturbation d'une valeur propre isolée simple).
Si E_0 **est une valeur propre simple, il existe** $\eta > 0$ **et** $\varepsilon > 0$ **tel que**

1. **pour tout** $\beta \in]-\eta, \eta[$**, l'opérateur** $H(\beta)$ **est auto-adjoint sur** $\mathcal{H}$ **et l'ensemble** $\sigma(H(\beta)) \cap]E_0 - \varepsilon, E_0 + \varepsilon[$ **est réduit à un singleton** $E(\beta)$**;**
2. $E(\beta)$ **est une valeur propre simple isolée de** $H(\beta)$ **et la fonction** $\beta \mapsto E(\beta)$ **est analytique réelle sur** $]-\eta, \eta[$**;**
3. **il existe une fonction analytique réelle** $]-\eta, \eta[\ni \beta \mapsto \psi(\beta) \in D(H_0)$ **telle que**

$$\forall \beta \in]-\eta, \eta[, \quad H(\beta)\psi(\beta) = E(\beta)\psi(\beta), \quad \|\psi(\beta)\| = 1.$$

Théorème (séries de Rayleigh-Schrödinger). **Si E_0 est une valeur propre simple, et avec les notations du théorème précédent, on a**

$$E(\beta) = \sum_{n=0}^{+\infty} \beta^n E_n, \qquad \psi(\beta) = \sum_{n=0}^{+\infty} \beta^n \psi_n.$$

Ces séries, dites de Rayleigh-Schrödinger, convergent normalement dans $\mathbb{R}$ et $D(H_0)$ respectivement pour $\beta \in]-\eta_0, \eta_0[$ avec $0 < \eta_0 \leq \eta$.

La fonction $\psi_0 \in D(H_0)$ est un vecteur propre normalisé de H_0 associé à la valeur propre E_0.

Une fois ψ_0 choisi, les coefficients $E_n \in \mathbb{R}$ et $\psi_n \in D(H_0)$ sont obtenus en résolvant le système "triangulaire" bien posé:

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, \qquad \left\{ \begin{array}{l} (H_0 - E_0)\psi_n = f_n + E_n \psi_0, \\ \langle \psi_0 | \psi_n \rangle = \alpha_n, \end{array} \right.$$

où

$$f_n = -W\psi_{n-1} + \sum_{k=1}^{n-1} E_k \psi_{n-k} \qquad \textbf{et} \qquad \alpha_n = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} \langle \psi_k | \psi_{n-k} \rangle.$$

Remarques:

1. on a toujours
$$E_1 = \langle \psi_0 | W | \psi_0 \rangle;$$

2. si H_0 est diagonalisable dans une base orthonormale
$$H_0 = \sum_{k \in \mathbb{N}} \varepsilon_k |\phi_k\rangle\langle\phi_k|,$$
avec $(\varepsilon_0, \phi_0) = (E_0, \psi_0)$ par convention, on a (*sum over state formulae*)
$$\psi_1 = -\sum_{k \in \mathbb{N}^*} \frac{\langle \phi_k | W | \phi_0 \rangle}{\varepsilon_k - \varepsilon_0} \phi_k, \qquad E_2 = -\sum_{k \in \mathbb{N}^*} \frac{|\langle \phi_k | W | \phi_0 \rangle|^2}{\varepsilon_k - \varepsilon_0}, \qquad \cdots$$

3. dans les simulations numériques, il est souvent préférable de résoudre le système "triangulaire" de Rayleigh-Schrödinger plutôt que d'utiliser la formule ci-dessus qui nécessite la connaissance de tous les états propres de H_0.

Théorème (perturbation d'une valeur propre discrète quelconque).

Il existe $\eta > 0$ et $\varepsilon > 0$ tel que

1. **pour tout $\beta \in]-\eta, \eta[$, l'opérateur $H(\beta)$ est auto-adjoint sur $\mathcal{H}$ et l'ensemble $\sigma(H(\beta)) \cap]E_0 - \varepsilon, E_0 + \varepsilon[$ contient exactement m valeurs propres en tenant compte des multiplicités;**

   on choisit $\varepsilon > 0$ tel que $\sigma(H(\beta)) \cap \{E_0 - \varepsilon, E_0 + \varepsilon\} = \emptyset$; on note $I = [E_0 - \varepsilon, E_0 + \varepsilon]$ et $\mathscr{C}$ le cercle du plan complexe de centre E_0 et de rayon ε;

2. **la fonction $] - \eta, \eta[\ni \beta \mapsto \mathbb{1}_I(H(\beta)) \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ est analytique réelle et on a**

$$\mathbb{1}_I(H(\beta)) = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathscr{C}} (z - H(\beta))^{-1} \, dz = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathscr{C}} (z - (H_0 + \beta W))^{-1} \, dz.$$

Pour $\beta \in] - \eta, \eta[$, l'opérateur $\mathbb{1}_I(H(\beta))$ est le projecteur orthogonal sur l'espace vectoriel de dimension m engendré par les vecteurs propres de $H(\beta)$ associés aux m valeurs propres de $H(\beta)$ comprises dans l'intervalle I.

Théorème (développement en séries de Dyson).

On reprend les notations du théorème précédent et on pose $\mathscr{P}_0 = \mathbb{1}_I(H_0)$ **et** $\mathscr{P}(\beta) = \mathbb{1}_I(H(\beta))$**. On a pour tout** $\beta \in]-\eta, \eta[$**, et tout** $N \in \mathbb{N}$**,**

$$\mathscr{P}(\beta) = \sum_{n=0}^{N} \beta^n \mathscr{P}_n + \beta^{N+1} \mathscr{R}_{N+1}(\beta) = \sum_{n=0}^{+\infty} \beta^n \mathscr{P}_n,$$

avec

$$\mathscr{P}_n = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathscr{C}} (z - H_0)^{-1} \left[W (z - H_0)^{-1} \right]^n dz,$$

$$\mathscr{R}_{N+1}(\beta) = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathscr{C}} (z - (H_0 + \beta W))^{-1} \left[W (z - H_0)^{-1} \right]^{N+1} dz,$$

la série ci-dessus étant normalement convergente dans $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ **(mais aussi pour des topologies beaucoup plus fortes - dans** $\mathfrak{S}_1(\mathcal{H})$ **par exemple).**

E.B. Davis, *Spectral theory of differential operators*, Cambridge University Press, 1996.

E.B. Davis, *Linear operators and their spectra*, Cambridge University Press, 2007.

B. Helffer, *Spectral theory and applications*, Cambridge University Press, 2013.

M. Reed and B. Simon, *Methods of modern mathematical physics*, Vol. I-IV, Academic Press, 1975-1980.

G. Teschl, *Mathematical methods in quantum mechanics, with applications to Schrödinger operators*, American Mathematical Society, 2009.