Annales de la Fondation Louis de Broglie,
Vol. 11, n° 4, 1986

La méthode de moyennisation et l'oscillateur anharmonique quantique

par A. Ben Lemlih et J.A. Ellison*

Department of Mathematics
University of New Mexico,
Albuquerque, New Mexico 87131 USA

Séminaire du 18 Mars 1986

****

Résumé : Il s'agit de la généralisation de la méthode de moyennisation de Krylov-Bogoliubov aux équations aux dérivées partielles. Dans cet article nous traitons le problème de l'oscillateur anharmonique quantique. Une approximation, sans terme séculaire, à la fonction d'onde est obtenue et un théorème d'approximation qui estime la différence entre la solution exacte et la solution approchée sur un grand intervalle de temps est établi.

1. Introduction

La méthode de moyennisation de Krylov-Bogoliubov [4] est un procédé de perturbation qui, lorsqu'il est appliqué à des systèmes d'équations différentielles ordinaires sous forme standard, a un double avantage ; d'une part elle conduit d'une manière systématique à un procédé générant des

*Supported by the U.S. National Science Foundation under Contract N° DMR-8214301.

approximations à l'ordre désiré, d'autre part elle amène à un théorème d'approximation qui estime la différence entre les solutions exacte et approchée du problème considéré sur l'intervalle de temps d'existence de la solution exacte.

Dans cet article nous généralisons cette méthode au problème de l'oscillateur anharmonique quantique dont la fonction d'onde ψ satisfait l'équation de Schrödinger :

$$(1) \qquad i\,\frac{\partial\psi}{\partial t} = H(p,q)\psi, \quad \psi(0) = \psi_0$$

où l'opérateur de Hamilton H est donné par

$$H(p,q) = \frac{1}{2}(p^2 + q^2) + \frac{1}{4}\,\varepsilon q^4,$$

q étant l'opérateur de multiplication par x, p l'opérateur de dérivation, $p = -i\,\frac{d}{dx}$ et ε est un paramètre réel positif assez petit par rapport à l'unité.

Il est facile de voir que si on applique la méthode de perturbation régulière au problème (1) qui consiste à chercher une solution approchée de la forme :

$$\psi(t) = w_0(t) + \varepsilon w_1(t) + \varepsilon^2 w_2(t) + \dots$$

alors des termes séculaires apparaissent dès le premier ordre d'approximation, c'est-à-dire dans le terme $w_1(t)$, ceci reflète un comportement qualitatif de la solution approchée qui est incohérent avec celui de la solution exacte puisque cette dernière est bornée en temps, de ce fait la validité de l'approximation ainsi obtenue est limitée à un intervalle de temps réduit à un petit voisinage de l'origine.

Dans la suite nous allons montrer que la méthode de moyennisation, auparavant utilisée pour des systèmes d'équations différentielles ordinaires, se généralise à ce problème et conduit d'une manière naturelle à une solution approchée sans terme séculaire et nous allons aussi préciser le sens dans lequel cette approximation est valable. Pour la facilité d'exposition nous présentons ici l'approximation du

second ordre, les généralisations aux ordres supérieurs s'obtiennent de manière triviale. A cette fin nous proposons deux étapes, d'abord nous écrivons l'équation (1) sous une forme équivalente souhaitable pour la méthode de moyennisation et nous déterminons d'une manière formelle une solution approchée, ensuite nous analysons la solution approchée ainsi obtenue et énoncerons un théorème d'approximation qui estime la différence entre les solutions exacte et approchée du problème.

Il existe une littérature abondante traitant la méthode de moyennisation et ses applications dans le cadre des systèmes d'équations différentielles ordinaires [1,4,5,6, 7,12,13] alors que pour les équations aux dérivées partielles, très peu d'articles sont connus où la méthode est appliquée de manière formelle [8,10].

2. Construction de la solution approchée

Dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ des fonctions numériques à valeur complexe et de carré intégrable au sens de Lebesgue il est bien connu que les opérateurs de Hamilton

$$(2) \qquad H = \frac{1}{2}(p^2 + q^2) + \frac{1}{4}\,\varepsilon q^4 \qquad (\varepsilon > 0)$$

et

$$(3) \qquad H_0 = \frac{1}{2}(p^2 + q^2)$$

sont autoadjoints et donc sont les générateurs infinitésimaux des groupes unitaires à un paramètre e^{-iHt} et e^{-iH_0t} (voir [11] par exemple). La fonction d'onde ψ de l'oscillateur anharmonique satisfait à l'équation de Schrödinger (1) et sa solution, nécessairement unique, est donnée par

$$(4) \qquad \psi(t) = e^{-iHt}\psi_0$$

pourvu que l'état initial ψ_0 soit dans le domaine où l'opérateur H est autoadjoint.

Afin de convertir l'équation (1) à une forme souhaitable pour la méthode de moyennisation nous introduisons

la transformation qui consiste en une variation de constante et qui est définie par

$$(5) \qquad \psi(t) = e^{-iH_0 t}\phi(t).$$

La fonction ϕ se réduit évidemment à la fonction ψ_0 en l'absence de perturbation, alors qu'en présence de la perturbation, elle obéit au problème :

$$(6) \qquad i\frac{\partial\phi}{\partial t} = \varepsilon A(t)\phi, \quad \phi(0) = \psi_0$$

où l'opérateur $A(t)$ est donné par

$$(7) \qquad A(t) = \frac{1}{4}e^{iH_0 t}q^4 e^{-iH_0 t}$$

et s'écrit en fonction des opérateurs

$$(8) \qquad a = \frac{\sqrt{2}}{2}(p + iq) \quad \text{et} \quad a^+ = \frac{\sqrt{2}}{2}(p - iq)$$

de la manière suivante :

$$(9) \qquad A(t) = \frac{1}{4}e^{iH_0 t}q^4 e^{-iH_0 t}$$

$$= \frac{1}{4}(e^{iH_0 t}qe^{-iH_0 t})^4$$

$$= \frac{1}{16}\{e^{-4it}a^4 + 4e^{-2it}aH_0 a + 4e^{2it}a^+H_0 a^+ + e^{4it}a^{+4}\} + \frac{3}{8}H_0^2 + \frac{3}{32}$$

où dans la dernière égalité nous avons utilisé le fait que

$$e^{iH_0 t}qe^{-iH_0 t} = \frac{1}{2}e^{-it}(q + ip) + \frac{1}{2}e^{it}(q - ip)$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{2}e^{-it}a + \frac{\sqrt{2}}{2}e^{it}a^+.$$

Lorsque ε est petit, la fonction ϕ définie par (6) varie lentement par rapport au temps et on peut s'attendre à ce qu'une bonne approximation à cette fonction en résultera si on remplace l'opérateur $A(t)$ par sa moyenne

$$(10) \qquad \bar{A} = \frac{3}{8}H_0^2 + \frac{3}{32},$$

il s'avère que ceci est le cas pour le premier ordre d'approximation [2]. Pour déterminer une approximation du second ordre nous procédons de la manière suivante. Nous cherchons un problème autonome à valeur initiale de la forme

$$(11) \qquad i\frac{\partial v}{\partial t} = \varepsilon B_1 v + \varepsilon^2 B_2 v, \quad v(0) = v_0$$

et une transformation

$$(12) \qquad \phi^*(t) = v(t) + \varepsilon P_1(t)v(t) + \varepsilon^2 P_2(t)v(t)$$

où P_1 et P_2 sont deux familles d'opérateurs à un paramètre sur $\mathcal{H}$, périodique en temps et de valeur moyenne zéro tel que la fonction ϕ^* définie par (12) satisfait le problème à valeur initiale :

$$(13) \qquad i\frac{\partial\phi^*}{\partial t} = \varepsilon A(t)\phi^* - \varepsilon^3 R(t,\varepsilon)v, \quad \phi^*(0) = \psi_0 - \varepsilon^3\eta(\varepsilon)$$

avec un opérateur $R(t,\varepsilon)$ et une fonction $\eta(\varepsilon)$ d'ordre 1 en ε.

Si les opérateurs B_1, B_2, P_1, P_2, R et les fonctions v_0 et η peuvent être ainsi déterminés alors la fonction e définie par

$$e = \phi - \phi^*$$

satisfera le problème à valeur initiale

$$i\frac{\partial e}{\partial t} = \varepsilon A(t)e + \varepsilon^3 R(t,\varepsilon)v, \quad e(0) = \varepsilon^3\eta(\varepsilon)$$

et de ce problème nous espérons déduire une borne pour la fonction $\phi - \phi^*$ de la forme $C\varepsilon^3 t$ où C est une constante indépendante de t et ε. Si maintenant on définit la fonction ψ^* par

$$\psi^*(t) = e^{iH_0 t}\phi^*(t)$$

alors $||\psi(t) - \psi^*||_{\mathcal{H}} = ||\phi(t) - \phi^*(t)||_{\mathcal{H}}$ et donc ψ^* sera un candidat pour approximer la fonction ψ du problème considéré.

Nous allons maintenant déterminer de manière formelle les inconnues précédemment citées et pour cela nous substituons l'expression de ϕ^* donnée par (12) dans l'égalité (13) et nous utilisons l'équation (11) ce qui nous donne :

$$(14)\quad R(t,\varepsilon)v = \frac{1}{\varepsilon^2}\{A(t) - B_1 - iP_1'(t)\}v$$
$$+ \frac{1}{\varepsilon}\{A(t)P_1(t) - P_1(t)B_1 - B_2 - iP_2'(t)\}v$$
$$+\{A(t)P_2(t) - P_2(t)B_1 - P_1(t)B_2\}v$$
$$-\varepsilon P_2(t)B_2 v,$$

$$(15)\quad \eta(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon^3}\{\psi_0 - v_0 - \varepsilon P_1(0)v_0 - \varepsilon^2 P_2(0)v_0\}.$$

Pour satisfaire l'égalité (14) avec $R(t,\varepsilon)$ d'ordre 1 en ε nous imposons les deux égalités suivantes :

$$(16)\quad iP_1'(t) = A(t) - B_1,$$

$$(17)\quad iP_2'(t) = A(t)P_1(t) - P_1(t)B_1 - B_2.$$

L'égalité (16) permet alors de déterminer à la fois B_1 et $P_1(t)$ comme suit ; puisque $P_1(t)$ est périodique en t alors le second membre de l'égalité (16) doit avoir une valeur moyenne nulle et par conséquent

$$(18)\quad B_1 = \overline{A} = \frac{3}{8}H_0^2 + \frac{3}{32}$$

et

$$(19)\quad P_1(t) = \frac{1}{64}\{e^{-4it}a^4 + 8e^{-2it}aH_0a - 8e^{2it}a^+H_0a^+ - e^{4it}a^{+4}\}$$

où, en intégrant l'équation (16), la constante d'intégration a été déterminée de façon que $P_1(t)$ a une valeur moyenne égale à zéro. De manière analogue l'égalité (17) permet de déterminer les opérateurs B_2 et $P_2(t)$ et un calcul fastidieux montre que :

$$(20)\quad B_2 = -\frac{17}{2^6}H_0^3 - \frac{67}{2^8}H_0 + \frac{67}{2^9}$$

$$(21)\quad P_2(t) = \frac{-i}{20}\{\frac{e^{-8it}}{-8i}a^8 + \frac{e^{-6it}}{-6i}(8a^5H_0a + 4aH_0a^5) + 32\frac{e^{-4it}}{-4i}aH_0a^2H_0a$$
$$+\frac{e^{-2it}}{-2i}(-8a^4a^+H_0a^+ + 4a^+H_0a^+a^4) + \frac{e^{2it}}{2i}(-4aH_0aa^{+4} + 8a^{+4}aH_0a)$$
$$-32\frac{e^{4it}}{4i}a^+H_0a^{+2}H_0a^+ - \frac{e^{6it}}{6i}(4a^+H_0a^{+5} + 8a^{+5}H_0a^+) + \frac{e^{8it}}{8i}a^{+8}\}$$
$$-\frac{3i}{2^9}H_0^2(\frac{e^{-4it}}{-4i}a^4 + 8\frac{e^{-2it}}{-2i}aH_0a - 8\frac{e^{2it}}{2i}a^+H_0a^+ - \frac{e^{4it}}{4i}a^{+4})$$
$$+\frac{3i}{2^9}(\frac{e^{-4it}}{-4i}a^4 + 8\frac{e^{-2it}}{2i}aH_0a - 8\frac{e^{2it}}{2i}a^+H_0a^+ - \frac{e^{4it}}{4i}a^{+4})H_0^2.$$

L'expression de l'opérateur $R(t,\varepsilon)$ se réduit donc à :

$$(22)\quad R(t,\varepsilon) = A(t)P_2(t) - P_2(t)B_1 - P_1(t)B_2 - \varepsilon P_2(t)B_2$$

où les opérateurs $A(t)$, B_1, $P_1(t)$, B_2, $P_2(t)$ sont donnés par (9), (18)-(21), respectivement. Il nous reste enfin à déterminer les fonctions v_0 et $\eta(\varepsilon)$ et pour cela nous cherchons v_0 de la forme :

$$v_0(x) = a_0(x) + \varepsilon a_1(x) + \varepsilon^2 a_2(x),$$

l'expression de $\eta(\varepsilon)$ donnée par (15) devient alors :

$$\eta(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon^3}\{(\psi_0 - a_0) - \varepsilon(a_1 + P_1(0)a_0) - \varepsilon^2(a_2 + P_1(0)a_1 + P_2(0)a_0)$$
$$-\varepsilon^3(P_1(0)a_2 + P_2(0)a_1) - \varepsilon^4 P_2(0)a_2\},$$

et la condition $\eta(\varepsilon)$ d'ordre 1 en ε permet de définir a_0, a_1 et a_2 :

$$a_0 = \psi_0,\quad a_1 = -P_1(0)\psi_0,\quad a_2 = (-P_2(0) + P_1^2(0))\psi_0$$

ce qui nous donne :

$$(23)\quad v_0 = \{1 - \varepsilon P_1(0) - \varepsilon^2(P_2(0)) - P_1^2(0))\}\psi_0,$$

et

$$(24)\quad \eta(\varepsilon) = \{(P_1(0)P_2(0) - P_1^3(0) + P_2(0)P_1(0)) + \varepsilon(P_2^2(0) - P_2(0)P_1^2(0))\}\psi_0 .$$

La dérivation formelle de la solution approchée est maintenant complète, nous résumons ici les différentes étapes de cette construction. Par la suite les opérateurs $A(t)$, B_1, $P_1(t)$, B_2, $P_2(t)$, $R(t,\varepsilon)$ et les fonctions v_0 et $\eta(\varepsilon)$ sont définies par (9), (18)-(24) respectivement.

La solution approchée ψ^* est alors construite comme suit : d'abord nous déterminons la solution du problème autonome :

$$(25)\qquad i\frac{\partial v}{\partial t} = (\varepsilon B_1 + \varepsilon^2 B_2)v, \qquad v(0) = v_0$$

nous définissons ensuite les deux fonctions ϕ^* et ψ^* par

$$(26)\qquad \phi^*(t) = (1 + \varepsilon P_1(t) + \varepsilon^2 P_2(t))v$$

$$(27)\qquad \psi^*(t) = e^{-iH_0 t}\phi^*(t)$$

et là encore, il est facile de voir que la fonction ψ^* satisfait, formellement, à :

$$(28)\qquad i\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = H\psi^* - \varepsilon^3 e^{-iH_0 t}R(t,\varepsilon)v, \quad \psi^*(0) = \psi_0 - \varepsilon^3\eta(\varepsilon).$$

A ce stade plusieurs remarques s'imposent :

1. Puisque les opérateurs B_1 et B_2 sont fonctions de l'opérateur H_0 seulement, alors la solution du problème (25) s'écrit facilement en termes de fonctions d'Hermite qui sont les fonctions propres de l'opérateur H_0 associé à l'oscillateur harmonique quantique et par suite la fonction ψ^*, elle-même, s'écrit facilement en terme de ces fonctions propres.

2. L'approximation du premier ordre ψ_1^* s'obtient de la précédente en négligeant les termes avec coefficient ε^2 c'est-à-dire

$$\psi_1^*(t) = e^{-iH_0 t}(1 + \varepsilon P_1(t))v(t)$$

avec $v(t)$ solution du problème :

$$i\frac{\partial v}{\partial t} = \varepsilon B_1 v, \quad v(0) = (1 - \varepsilon P_1(0))\psi_0 .$$

3. Les valeurs propres des opérateurs εB_1 et $\varepsilon^2 B_2$ donnent les corrections d'ordre ε et d'ordre ε^2 aux valeurs propres de l'oscillateur harmonique quantique [9].

3. Justification de l'approximation

Afin de justifier l'approximation à $\psi(t)$ donnée par (27) nous introduisons les notations suivantes : L'espace $\mathcal{H}$ sera muni du produit scalaire habituel

$$(f,g) = \int_R \overline{f}(x)g(x)dx \quad \text{pour } f \text{ et } g \text{ dans } \mathcal{H}$$

et de la norme associée

$$||f|| = (f,f)^{\frac{1}{2}}.$$

Une fonction $f(t)$ qui appartient à $\mathcal{H}$ pour tout t sera dite t-dérivable si et seulement si

$$\frac{\Delta f}{h} \overset{\text{def}}{=} \frac{f(t+h) - f(t)}{h}$$

converge, au sens de la norme de $\mathcal{H}$, lorsque h tend vers zéro et sa limite sera dénotée par $\frac{\partial f}{\partial t}$. Si T est un opérateur défini sur les fonctions d'Hermite $\{\chi_n\}_{n\geq 0}$ et $f_n = (\chi_n, f)$ alors nous définissons T sur $\mathcal{H}$ par :

$$\begin{cases} D(T) = \{f \in \mathcal{H} \ ; \ \lim\limits_{N\to\infty} \sum\limits_{n=0}^{N} f_n T\chi_n \text{ existe dans } \mathcal{H}\} \\ Tf = \sum\limits_{n=0}^{\infty} f_n T\chi_n \qquad \text{pour } f \in D(T). \end{cases}$$

Ceci définit en particulier tous les opérateurs mentionnés auparavant, à savoir, H, H_0, a, a^+, $A(t)$, B_1, B_2, $P_1(t)$, $P_2(t)$, $R(t,\varepsilon)$, e^{-iH_0t}, e^{-iHt} et $e^{-i(\varepsilon B_1+\varepsilon^2B_2)t}$. Le domaine où l'opérateur H est autoadjoint contient $D(H)$ alors que les domaines où les opérateurs H_0 et $B_1 + \varepsilon B_2$ sont autoadjoints sont égaux à $D(H_0)$ et $D(B_1 + \varepsilon B_2)$ respectivement.

Finalement nous introduisons les ensembles D_ℓ définis par

$$D_\ell = \{f \in \mathcal{H} \,;\, \sum_{n=0}^{\infty} |n^\ell f_n|^2 < \infty\}$$

où ℓ est un entier naturel positif ou nul.

Remarques

(a) Les propriétés suivantes sont faciles à établir en utilisant les égalités

$$a\chi_n = \sqrt{n}\chi_{n-1} \quad \text{et} \quad a^+\chi_n = \sqrt{n+1}\chi_{n+1} \;:$$

i. Les opérateurs $A(t)$, $P_1(t)$ et B_1 appliquent D_ℓ dans $D_{\ell-2}$, $(\ell \geq 2)$.

ii. $P_2(t)$ applique D_ℓ dans $D_{\ell-4}$, $(\ell \geq 4)$.

iii. B_2 applique D_ℓ dans $D_{\ell-3}$, $(\ell \geq 3)$.

iv. $R(t,\varepsilon)$ applique D_ℓ dans $D_{\ell-7}$, $(\ell \geq 7)$.

v. $e^{-i\varepsilon H_0t}$ et $e^{-i\varepsilon(B_1+\varepsilon B_2)t}$ appliquent D_ℓ dans D_ℓ, $\ell \geq 0$.

(b) Comme $H_0\chi_n = (n + \frac{1}{2})\chi_n$ alors $D(H_0) = D_1$ et $D(B_1+\varepsilon B_2) = D_3$.

Nous sommes maintenant en position d'énoncer notre résultat principal. Dans la suite les fonctions $\psi(t)$ et $\psi^*(t)$ seront définies par (4) et (27) respectivement, i.e.

$$\psi(t) = e^{-iHt}\psi_0$$

$$\psi^*(t) = e^{-iH_0t}\phi^*(t)$$

avec $\phi^*(t)$ donnée par (26).

Théorème : Si $\psi_0 \in D_\ell$, $\ell \geq 11$, alors pour tout $\varepsilon_0 > 0$ il existe $C = C(\psi_0,\varepsilon_0)$ dépendant de ψ_0 et ε_0 seulement telle que pour tout ε dans l'intervalle $[0,\varepsilon_0]$ on ait

$$||\psi(t) - \psi^*(t)|| \leq C\varepsilon^3(1 + t) \;\forall\, t \geq 0.$$

Nous démontrons ce théorème en trois étapes :

1. Nous montrons que si $\psi_0 \in D_\ell$ alors le problème autonome (25) a une solution v dans $D_{\ell-4}$ $(\ell \geq 4)$.
2. La fonction ψ^* appartient à $D_{\ell-8}$, est t-dérivable et satisfait au problème à valeur initiale (28).
3. $e(t) \overset{\text{def}}{=} \psi(t) - \psi^*(t)$ satisfait à l'inégalité

$$||e(t)|| \leq e(0) + \varepsilon^3 \int_0^t ||e^{-iH_0s}R(s,\varepsilon)v||ds$$

de laquelle nous déduirons le résultat du théorème.

Notons de suite que si $\psi_0 \in D_\ell$, avec $\ell \geq 11$, alors l'intégrant dans la dernière inégalité a un sens puisque $e^{-iH_0s}R(s,\varepsilon)v$ appartient à $D_{\ell-11}$ qui est contenu dans $\mathcal{H}$.

1ère étape. L'opérateur $\varepsilon B_1 + \varepsilon^2B_2$ avec le domaine D_3 est autoadjoint, en fait

$$(\varepsilon B_1 + \varepsilon^2B_2)\chi_n = (\varepsilon\alpha_n + \varepsilon^2\beta_n)\chi_n$$

avec

$$\alpha_n = \frac{3}{8}(n + \frac{1}{2})^2 + \frac{3}{32}, \quad \beta_n = \frac{-17}{2^6}(n + \frac{1}{2})^3 - \frac{67}{2^8}(n + \frac{1}{2}) + \frac{67}{2^9}$$

et donc, par le théorème de Stone [11], le problème (24) a une solution unique v donnée par

$$v = e^{-i(\varepsilon B_1+\varepsilon^2B_2)t}v_0 = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i(\varepsilon\alpha_n+\varepsilon^2\beta_n)t}(\chi_n,v_0)\chi_n$$

pourvu que v_0 appartienne à D_3. Par ailleurs, si $\psi_0 \in D_\ell$ alors d'après la remarque (a) la fonction v_0 donnée par (23) appartient à $D_{\ell-4}$ qui est contenu dans D_3 pour $\ell \geq 7$ et il est facile de voir que la solution v appartient à $D_{\ell-4}$.

<u>2ème étape</u>. D'après la remarque (a) et le résultat précédent, les fonctions $\phi^*(t)$ et $\psi^*(t)$ sont dans $D_{\ell-8}$. Pour montrer que ψ^* est t-dérivable nous utilisons le lemme suivant dont la démonstration se trouve dans [2] en cas d'approximation du premier ordre et dans [3] pour l'approximation du second ordre.

<u>Lemme</u>. Si $\psi_0 \in D_\ell$, $\ell \geq 11$, alors la fonction $\phi^*(t)$ est t-dérivable et satisfait :

$$i\frac{\partial\phi^*}{\partial t} = \varepsilon A(t)\phi^*(t) - \varepsilon^3 R(t,\varepsilon)e^{-i\varepsilon(B_1+\varepsilon B_2)t}v_0.$$

Il est alors facile de voir que $\psi^*(t) = e^{-iH_0t}\phi^*(t)$ est t-dérivable et que

$$i\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = H_0\psi^* + e^{-iH_0t}i\frac{\partial\phi^*}{\partial t}$$

en fait

$$h^{-1}||i\Delta\psi^* - h(H_0\psi^* + e^{iH_0t}i\frac{\partial\phi^*}{\partial t})$$

$$\leqslant h^{-1}||(e^{-iH_0h}-1+ihH_0)\phi^*(t)|| + h^{-1}||\Delta\phi^*-h\frac{\partial\phi^*}{\partial t}||$$

$$+ h^{-1}||(e^{-iH_0h}-1)(\Delta\phi^*-h\frac{\partial\phi^*}{\partial t})|| + ||(e^{-iH_0h}-1)\frac{\partial\phi^*}{\partial t}||.$$

Lorsque h tend vers zéro, le premier et le dernier termes tendent vers zéro puisque $\phi^* \in D_{\ell-8} \subset D(H_0)$ pour $\ell \geq 9$ et $\frac{\partial\phi^*}{\partial t} \in \mathcal{H}$, le deuxième et le troisième termes tendent vers zéro puisque ϕ^* est t-dérivable. Il résulte alors que :

$$\begin{aligned}
i\frac{\partial\psi^*}{\partial t} &= H_0\psi^* + e^{-iH_0t}i\frac{\partial\phi^*}{\partial t}\\
&= H_0\psi^* + e^{-iH_0t}(\varepsilon A(t)\phi^*-\varepsilon^3R(t,\varepsilon)e^{-i\varepsilon(B_1+\varepsilon B_2)t}v_0)\\
&= H_0\psi^* + \varepsilon e^{-iH_0t}A(t)\phi^*-\varepsilon^3e^{-iH_0t}R(T,\varepsilon)e^{-i\varepsilon(B_1+\varepsilon B_2)t}v_0\\
&= H_0\psi^* + \varepsilon e^{-iH_0t}e^{iH_0t}q^4e^{-iH_0t}\phi^*-\varepsilon^3e^{-iH_0t}R(t,\varepsilon)e^{-i\varepsilon(B_1+\varepsilon B_2)t}v_0\\
&= H\psi^* - \varepsilon^3e^{-iH_0t}R(t,\varepsilon)e^{-i\varepsilon(B_1+\varepsilon B_2)t}v_0
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
\psi^*(0) = \phi^*(0) &= (1 + \varepsilon P_1(0) + \varepsilon^2P_2(0))v_0\\
&= \psi_0 - \varepsilon^3\eta(\varepsilon)
\end{aligned}$$

avec $\eta(\varepsilon)$ donnée par (24).

<u>3ème étape</u>. La fonction $e(t) = \psi(t) - \psi^*(t)$ est donc t-dérivable et satisfait :

$$i\frac{\partial e}{\partial t} = He - g(t,\varepsilon),\quad e(0) = \varepsilon^3\eta(\varepsilon)$$

avec $g(t,\varepsilon) = \varepsilon^3e^{-iH_0t}R(t,\varepsilon)e^{-i\varepsilon(B_1+\varepsilon B_2)t}v_0$. Il s'ensuit alors que

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}(e,e) &= (i\frac{\partial e}{\partial t},ie) + (ie,i\frac{\partial e}{\partial t})\\
&= (He + g,ie) + (ie,He + g)\\
&= i[(He,e) - (e,He)] + i[(g,e) - (\overline{g,e})]\\
&= -2\ \mathrm{Im}(g,e)
\end{aligned}$$

d'où
$$\begin{aligned}
||e(t)||^2 &= ||e(0)||^2-2\int_0^t \mathrm{Im}(g(s),e(s))ds\\
&\leq \varepsilon^6||\eta(\varepsilon)||^2 + 2\int_0^t||g(s)||\,||e(s)||ds.
\end{aligned}$$

Si on dénote cette dernière expression par $r(t)$, alors $r(t)$ est positive pour $t \geq 0$ et

$$r'(t) = 2||g(t)||\,||e(t)|| \leq 2||g(t)||(r(t))^{\frac{1}{2}}$$

d'où

$$2(r(t))^{\frac{1}{2}} - 2(r(0))^{\frac{1}{2}} \leq 2\int_0^t ||g(s)||ds$$

et

$$||e(t)|| \leq (r(t))^{\frac{1}{2}} \leq \varepsilon^3||\eta(\varepsilon)|| + \int_0^t ||g(s)||ds$$

c'est-à-dire :

$$||\psi(t) - \psi^*(t)|| \leq \varepsilon^3||\eta(\varepsilon)|| + \varepsilon^3\int_0^t ||R(s,\varepsilon)e^{-i\varepsilon(B_1+\varepsilon B_2)s}v_0||ds.$$

Finalement nous déduisons l'inégalité du théorème de la manière suivante. La fonction $R(s,\varepsilon)e^{-i\varepsilon(B_1+\varepsilon B_2)s}v_0$ s'écrit en fonction de ψ_0 comme une combinaison linéaire finie avec des coefficients constants de termes de la forme

$$\varepsilon^\delta e^{i\ell s}\underbrace{a^\# a^\# \ldots a^\#}_{k \text{ fois}} e^{i\varepsilon(B_1+\varepsilon B_2)s}\underbrace{a^\# a^\# \ldots a^\#}_{k' \text{ fois}}\psi_0$$

avec $\delta = 0,1,2$ ou 3 ; ℓ entier ; $k \leq 14$, $k' \leq 8$; a étant a ou a^+ ; si bien que si on développe ψ_0 sur la base des fonctions d'Hermite, chaque terme de la combinaison précédente peut être majoré par une constante qui dépend de ε_0 et ψ_0 et qui est indépendante de $\varepsilon \in [0,\varepsilon_0]$ et de $s \in [0,\infty]$ et il en est de même pour les fonctions $||R(s,\varepsilon)e^{-i\varepsilon(B_1+\varepsilon B_2)s}v_0||$ et $||\eta(\varepsilon)||$ ce qui achève la démonstration du théorème.

4. Conclusion

Cet article montre que la méthode de moyennisation peut être généralisée aux équations aux dérivées partielles, en fait cette méthode a été appliquée aux problèmes suivants [3] : l'équation de Schrödinger où une partie du potentiel est à oscillation rapide, l'équation du mouvement d'une particule chargée à travers un cristal parfait (le problème de channeling) et à l'équation des ondes avec une perturbation non linéaire. D'autres applications de cette méthode sont en cours, en particulier, par analogie avec ce qui est déjà établi pour le cas des systèmes d'équations différentielles ordinaires [1,7], l'investigation des propriétés qualitatives de la solution exacte du problème considéré à partir des propriétés de sa solution approchée.

REFERENCES

[1] V.I. Arnold, Geometrical Methods in the Theory of Ordinary Differential Equations (Springer, New York, 1983).

[2] A. Ben Lemlih and J.A. Ellison, Phys. Rev. Letters, 55, 1950 (1985).

[3] A. Ben Lemlih, Ph.D. Thesis, University of New Mexico (1986).

[4] N.N. Bogoliubov and Y.A. Mitropolsky, Asymptotic Methods in the Theory of Non-linear Oscillations (Gordon and Breach, New York, 1961).

[5] H.S. Dumas, J.A. Ellison, and A.W. Saens, To be published.

[6] H.S. Dumas and J.A. Ellison, "Particle channeling in crystals and the method of averaging", in Local and Global Methods of Non linear Dynamics, Lecture Notes in Physics, Vol. 252 (Springer-Verlag, New York, 1986).

[7] J.K. Hale, Ordinary Differential Equations (Wiley-Interscience, New York, 1969), 1st ed.

[8] M. Kummer, Nuovo Cimento B1, 123 (1971).

[9] L.D. Landau and E.M. Lifschitz, Quantum Mechanics (Pergamon, New York, 1971).

[10] G. Lochak, Le Journal de Physique, Tome 26, 235 (1965).

[11] M. Reed and B. Simon, Methods of Modern Mathematical Physics II : Fourier Analysis, Self-adjointness (Academic Press, New York, 1972).

[12] P. Swinnerton-Dyer, Proc. London Math. Soc. (3) 34, 385 (1977).

[13] W.M. Volosov, Russian Math. Surveys, Vol. 17, pp. 1-126 (1962).