

# Introduction au chaos classique et chaos quantique\*

Frédéric Faure<sup>†</sup>

25 avril 2014

## Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Mécanique classique et mécanique quantique</b>	<b>3</b>
2.1	Mécanique classique . . . . .	3
2.2	Mécanique quantique . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Chaos en mécanique classique</b>	<b>21</b>
3.1	Billard dispersif de Sinaï et instabilité d'Anosov . . . . .	21
3.2	Un flot géodésique Anosov est mélangeant (et ergodique) . . . . .	28
3.3	Modèle simple du « cat map » qui est mélangeant (et ergodique) . . . . .	30
<b>4</b>	<b>Chaos quantique</b>	<b>32</b>
4.1	Equidistribution des ondes stationnaires. Ergodicité quantique . . . . .	33
4.2	Distribution des valeurs propres . . . . .	36
4.3	Conclusion . . . . .	40

## 1 Introduction

Dans une première partie, on propose une brève introduction aux idées et au formalisme de la "mécanique classique" et de la "mécanique quantique". La théorie de la mécanique quantique a été découverte par Heisenberg, Schrödinger et d'autres au début du XXème siècle. Elle décrit la matière par des

---

\*Notes d'exposé pour les « journées mathématiques (journées X-UPS) à l'intention des professeurs de math de classes préparatoires », lundi 28 et mardi 29 avril 2014.

<sup>†</sup>Institut Fourier, UMR 5582, 100 rue des Maths, BP74 38402 St Martin d'Hères. frederic.faure@ujf-grenoble.fr <http://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~faure>

"ondes de matière" qui évoluent selon l'équation de Schrödinger. Ces ondes ont une signification probabiliste en physique. Avant, les constituants de la matière étaient décrits par les équations de la "mécanique classique" (Newton 1686, Hamilton 1833) qui sont des lois déterministes pour les trajectoires des particules. On expliquera le passage entre les descriptions classique et quantique en terme de paquet d'onde, assimilable à une particule et avec le "principe de correspondance" qui se formalise avec le théorème d'Egorov. On présentera des exemples simples de dynamique qui serviront dans les exposés suivants, que sont la particule libre sur le cercle, sur le tore  $\mathbb{T}^2$ , dans un billard et sur une surface à courbure négative. Dans tous ces cas, l'opérateur de Schrödinger est le Laplacien.

La deuxième partie présente la problématique du chaos déterministe et l'approche mathématique pour l'aborder. Depuis les travaux de Henri Poincaré (1892) et ensuite Birkhoff, Anosov (1967), Ruelle etc.. il est apparu que les trajectoires issues de lois déterministes mais possédant une "forte sensibilité aux conditions initiales" semblent imprévisibles et qu'il y a des propriétés aléatoires émergentes. On parle de "chaos déterministe en mécanique classique". On présentera un modèle assez concret de dynamique chaotique que sont les "billards dispersifs". On établira les propriétés mathématiques du chaos (mélange et ergodicité) sur un modèle similaire mais plus simple appelé "l'application du chat d'Arnold".

Finalement la troisième partie porte sur la problématique du chaos quantique qui est d'étudier la dynamique des ondes quantiques dans un système dont la dynamique classique associée est chaotique comme décrite précédemment. Plus précisément on souhaite comprendre l'évolution des ondes mais aussi la structure et la répartition spatiale des ondes stationnaires. On posera ces questions en montrant quelques exemples numériques intrigants qui serviront à introduire les exposés suivants [Fer14, Ana14]. Par exemple le "théorème d'ergodicité quantique" (1974) établit que lorsque la dynamique classique est ergodique alors presque toutes les ondes quantiques stationnaires sont équi-réparties sur l'espace. De façon conjecturale mais très utile en physique, la « conjecture des matrices aléatoires » stipule que les valeurs propres de l'opérateur de Schrödinger (i.e. les niveaux d'énergie) sont disposés à petite échelle comme aléatoirement et satisfont aux mêmes statistiques que les valeurs propres d'une matrice symétrique aléatoire.

— Articles de revue :

- Sur les systèmes dynamiques : [BS02, KH95, Bal00]
- Sur l'analyse semi-classique : [Tay96b, Zwo12a, Mar02, GS94]. L'exposé de Clotilde Fermanian [Fer14] présente et discute en détails la quantification de Weyl et le théorème d'Egorov.
- Sur le chaos quantique : [Gut91][Non08]. L'exposé de Nalini Anantharaman [Ana14] présente et discute en détails le théorème d'ergodicité quantique.

## 2 Mécanique classique et mécanique quantique

### 2.1 Mécanique classique

On appelle **mécanique classique**, les lois fondamentales de la physique en générale antérieures à la mécanique quantique mais plus précisément les lois « non quantiques ». On discutera de cette distinction plus précisément en Section 2.2. En mécanique classique il y a :

- Les loi de Newton et de Hamilton : elles définissent les équations du mouvement pour les éléments de matière ou particules élémentaires soumises à différentes forces.
- Les lois de Maxwell : elles décrivent l'évolution des champs électromagnétiques et les forces qu'ils exercent sur la matière chargée.

Ensuite, avec la physique statistique (qui contient la thermodynamique), à partir de ces lois fondamentales, on peut décrire les « milieux continus » comme les gaz, les fluides, les matériaux, les plasmas etc..

La théorie de la relativité d'Einstein (relativité restreinte en 1906 puis relativité générale 1916) est considérée aussi comme une théorie de la mécanique classique (car non quantique). Elle propose un nouveau cadre théorique plus géométrique dans l'espace-temps pour formuler les équations de mouvement de la matière et des champs électromagnétiques.

#### Équations de mouvement :

Notons  $x(t) \in \mathbb{R}^d$  la **position d'une particule** à l'instant  $t \in \mathbb{R}$ . (il est habituel de considérer les dimensions d'espaces  $d = 1, 2, 3$ ). La fonction  $t \in \mathbb{R} \rightarrow x(t) \in \mathbb{R}^d$  s'appelle la **trajectoire de la particule**.

**Définition 2.1.** « **Loi de Newton 1687** ». La trajectoire d'une particule de masse  $m > 0$  et soumise à une **force**  $F(x, t) \in \mathbb{R}^d$  est déterminée par l'équation différentielle ordinaire :

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F(x, t) \quad (2.1)$$

avec la donnée des conditions initiales  $x(0), \frac{dx}{dt}(0)$ .

*Remarque 2.2.* d'après le théorème de Cauchy Lipschitz [Tay96a], il existe une solution unique à (2.1) si  $F$  est une fonction Lipschitz. Il est préférable de transformer l'équation du deuxième ordre en équation du premier ordre. Cela donne les équations de Hamilton ci-dessous.

**Définition 2.3.** On supposera dans tout cet exposé que  $F(x, t)$  est une **force potentielle**

c'est à dire qu'elle peut s'écrire sous la forme particulière<sup>1</sup> :

$$F = -\frac{\partial V}{\partial x} := -\left(\frac{\partial V}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial V}{\partial x_d}\right) \quad (2.2)$$

avec une fonction  $V(x, t) \in \mathbb{R}$  appelée **énergie potentielle**. Posons l'**impulsion** :

$$\xi := m \frac{dx}{dt} \in \mathbb{R}^d \quad (2.3)$$

et introduisons la fonction réelle suivante, appelée **Hamiltonien** (ou énergie totale)

$$H(x, \xi, t) := \frac{1}{2m} |\xi|^2 + V(x, t) \in \mathbb{R} \quad (2.4)$$

(Le premier terme  $\frac{1}{2m} |\xi|^2 = \frac{1}{2} m \left| \frac{dx}{dt} \right|^2$  s'appelle l'**énergie cinétique**).

**Proposition 2.4.** « *Équations de Hamilton 1833* » Les équations de Newton (2.1) peuvent s'écrire sous la forme :

$$\frac{dx(t)}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \xi}, \quad \frac{d\xi(t)}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} \quad (2.5)$$

déterminant un champ de vecteur  $\mathcal{V} := \left( \frac{\partial H}{\partial \xi}, -\frac{\partial H}{\partial x} \right)$  sur l'**espace des phases**  $(x, \xi) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$  (figure 2.1).

*Démonstration.* On calcule

$$\frac{\partial H}{\partial \xi} \stackrel{(2.4)}{=} \frac{1}{m} \xi \stackrel{(2.3)}{=} \frac{dx}{dt}$$

et

$$-\frac{\partial H}{\partial x} \stackrel{(2.4)}{=} -\frac{\partial V}{\partial x} \stackrel{(2.2)}{=} F \stackrel{(2.1)}{=} m \frac{d^2x}{dt^2} \stackrel{(2.3)}{=} \frac{d\xi}{dt}$$

□

## Exemples

Il faut savoir que pour les problèmes à un degré de liberté,  $d = 1$  (donc l'espace des phases est  $(x, \xi) \in \mathbb{R}^2$  de dimension 2), et  $H(x, \xi)$  indépendant de  $t$ , alors les équations du mouvement sont solubles. En dimension plus grande elles ne le sont pas en général, sauf exceptions comme le problème à deux corps qui est soluble car il se ramène en fait à un problème à un degré de liberté. Plus généralement ces problèmes solubles sont appelés **systèmes intégrables**[Arn76]. L'étude du chaos à la section suivante sera au contraire consacrée à l'étude des problèmes parmi les « plus simples » qui ne sont pas solubles.

1. Localement il est nécessaire et suffisant que  $\text{rot}(F) = 0$

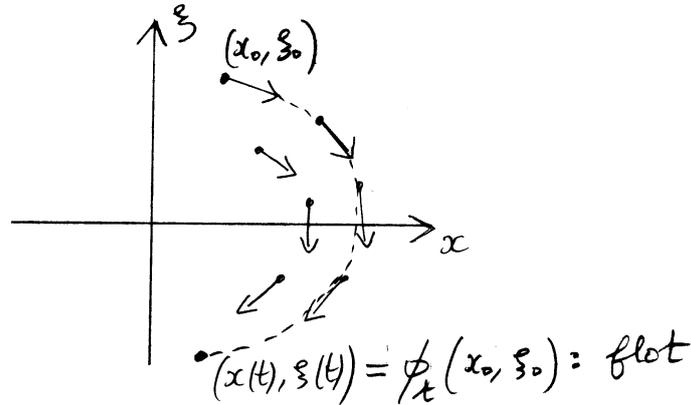


FIGURE 2.1 – Champ de vecteurs de Hamilton et flot Hamiltonien dans l’espace des phases.

**Exemple 2.5.** « **Le problème à deux corps** » C’est un système intégrable d’importance historique car c’est par lui que Newton a écrit (2.1) en 1687. A l’échelle du système solaire, on peut considérer la Terre comme un point de masse  $m = 6.10^{24}\text{kg}$  à la position  $x \in \mathbb{R}^3$  soumise à la force d’attraction gravitationnelle de la part du soleil (situé en  $x = 0$ ) :

$$F(x) = -C \frac{u}{|x|^2}$$

avec  $u = \frac{x}{|x|}$  vecteur unitaire et  $C = \mathcal{G} \cdot m \cdot m_S$  avec la masse du soleil  $m_S = 2.10^{30}\text{kg}$  et la constante de gravitation universelle  $\mathcal{G} = 6,67.10^{-11}\text{N.m}^2.\text{kg}^{-2}$ . Cette force dérive de l’énergie potentielle

$$V(x) = -C \frac{1}{|x|}. \tag{2.6}$$

L’équation du mouvement obtenue est  $\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{1}{m}F(x) = -\mathcal{G} \cdot m_S \frac{u}{|x|^2}$ . Remarquer que curieusement la masse de la Terre n’y intervient pas. Cela signifie que par exemple une poussière (ayant une autre masse) qui serait à la place de la Terre (même position et même vitesse) aurait la même trajectoire autour du Soleil. Cette remarque appelée « **principe d’équivalence** » a conduit Einstein à la théorie de la relativité où la gravitation n’est plus une force mais découle de la géométrie de l’espace temps.

De façon analogue mais à une toute autre échelle, dans un atome d’hydrogène, un électron de masse  $m = 9,31.10^{-31}\text{kg}$  est soumis à la « force de Coulomb » de la part du proton

$$F(x) = -C' \frac{u}{|x|^2}, \quad V(x) = -C' \frac{1}{|x|}$$

avec  $C' = k_C q \cdot q$  où  $q = 1.6 \cdot 10^{-19}\text{C}$  est la charge élémentaire de l’électron et du proton et  $k_C = 9.10^9 \text{Nm}^2\text{C}^{-2}$  est la constante de Coulomb.

Dans ces deux problèmes, grâce à la forme particulière de  $V(x)$ , on peut résoudre exactement les équations du mouvement et obtenir que les trajectoires de la planète (respect. de l’électron) sont des ellipses (ou paraboles ou hyperboles selon la condition initiale) [Arn76].

**Exemple 2.6.** « Puits de potentiel, oscillateur Harmonique ». A une dimension  $d = 1$  on s'intéresse à une particule près d'un minimum local de l'énergie potentielle  $V(x)$  que l'on suppose en  $x = 0$  avec  $V(0) = 0$ . Par développement de Taylor, on écrit :

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + O(x^3)$$

avec  $k = \frac{d^2V}{dx^2}(0) > 0$ . En ne gardant que ce premier terme (comme première approximation) le Hamiltonien s'écrit :

$$H(x, \xi) = \frac{1}{2m}\xi^2 + \frac{1}{2}kx^2 \quad (2.7)$$

et s'appelle le modèle de l'**oscillateur harmonique**. Les trajectoires sont des ellipses dans l'espace des phases<sup>2</sup>, voir figure 2.2.

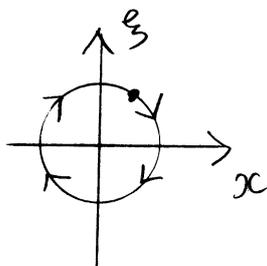


FIGURE 2.2 – Une trajectoire de l'oscillateur harmonique dans l'espace des phases. La position  $x(t)$  et la vitesse  $v(t) = \frac{1}{m}\xi(t)$  oscillent en quadrature.

**Exemple 2.7.** « Particule libre sur le cercle  $S^1$  ou le tore  $\mathbb{T}^d$  »

La position d'une particule sur le cercle est  $x \in S^1 := \mathbb{R}/\mathbb{Z}$  (i.e. défini modulo les entiers). L'espace des phases  $(x, \xi) \in S^1 \times \mathbb{R}$  est un cylindre. On dit qu'une particule est « libre » si  $V = 0$ , car il n'y a pas de force. Ainsi (en prenant  $m = 1$ ) on a le Hamiltonien  $H(x, \xi) = \frac{1}{2}|\xi|^2$ . Les équations de Hamilton (2.5) donnent

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \xi} = \xi, \quad \frac{d\xi}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} = 0. \quad (2.8)$$

La solution est

$$\xi(t) = \xi_0 = \text{cste}, \quad x(t) = \xi_0 \cdot t + x_0$$

ainsi la particule se déplace sur le cercle  $S^1$  à vitesse constante  $\xi_0$  qui dépend de la condition initiale.

---

2. Avec le changement de variables  $X := \sqrt{\frac{k}{2}}x, Y := \frac{\xi}{\sqrt{2m}}$  et posant  $\omega := \sqrt{\frac{k}{m}}, Z = X + iY$  on obtient l'équation de mouvement  $\frac{dZ}{dt} = -i\omega Z$  qui donne le mouvement de rotation  $Z(t) = Z(0)e^{-i\omega t}$ .

Le tore  $\mathbb{T}^d = S^1 \times \dots \times S^1 = \mathbb{R}^d / \mathbb{Z}^d$  est un produit de  $d$  cercles, avec des coordonnées  $(x_1, \dots, x_d) \in \mathbb{R}^d / \mathbb{Z}^d$ . On obtient de même le mouvement à vitesse constante  $x(t) = \xi_0.t + x_0$  avec  $\xi_0 \in \mathbb{R}^d$ . Voir figure 2.3. En dimension  $d = 1$ , il est clair que si  $\xi_0 \neq 0$ , la trajectoire recouvre tout le cercle  $S^1$  de façon uniforme. En dimension  $d \geq 2$  on peut se demander qu'elle partie de l'espace  $\mathbb{T}^d$  occupe une trajectoire? voici un résultat. Avant cela, on dit que  $\xi_0 \in \mathbb{R}^d$  est un **vecteur irrationnel** si  $\xi_0.k = 0, k \in \mathbb{Z}^d \Rightarrow k = 0$ . En dimension  $d = 2$ , cela signifie que  $\frac{(\xi_0)_1}{(\xi_0)_0} \notin \mathbb{Q}$  (pente irrationnelle).

**Proposition 2.8.** Si  $\xi_0 \in \mathbb{R}^d$  est un vecteur irrationnel alors la trajectoire  $x(t) = \xi_0.t + x_0$  est dense sur le tore  $\mathbb{T}^d = \mathbb{R}^d / \mathbb{Z}^d$  et même « **uniquement ergodique** » c'est à dire que pour toute fonction  $a \in C^0(\mathbb{T}^d)$  et tout point initial  $x_0 \in \mathbb{T}^d$ ,

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T a(\xi_0.t + x_0) dt = \int_{\mathbb{T}^d} a(x) dx \quad (2.9)$$

i.e. la moyenne temporelle de  $a$  sur une trajectoire très longue devient égale à sa moyenne spatiale.

*Démonstration.* Pour  $k \in \mathbb{Z}^d$  on considère la fonction  $\varphi_k(x) := \exp(i2\pi k.x)$  appelé **mode de Fourier**. D'après la théorie de Fourier on peut décomposer  $a = \sum_k a_k \varphi_k$  avec les coefficients de Fourier  $a_k = \int_{\mathbb{T}^d} \overline{\varphi_k(x)} a(x) dx$ . Si  $k \neq 0$  alors  $k.\xi_0 \neq 0$  et

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} \int_0^T \varphi_k(\xi_0.t + x_0) dt &= \frac{1}{T} \int_0^T \exp(i2\pi k.(\xi_0.t + x_0)) dt \\ &= e^{i2\pi k.x_0} \frac{1}{T} \frac{1}{i2\pi k.\xi_0} [\exp(i2\pi k.\xi_0 t)]_0^T \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 0 \end{aligned}$$

Par ailleurs pour le mode  $k = 0$ , on a  $\frac{1}{T} \int_0^T \varphi_0(\xi_0.t + x_0) dt = 1$ . Ainsi

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T a(\xi_0.t + x_0) dt = \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_k a_k \frac{1}{T} \int_0^T \varphi_k(\xi_0.t + x_0) dt = a_0 = \int_{\mathbb{T}^d} a(x) dx$$

□

Voici une application de l'unique ergodicité.

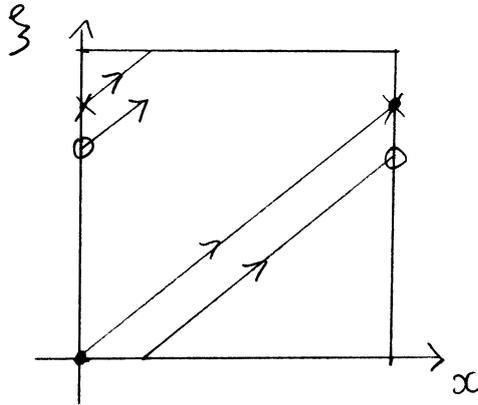


FIGURE 2.3 – Trajectoire sur le tore  $\mathbb{T}^2$ . Si la pente de  $\xi$  est irrationnelle alors la trajectoire est dense et même ergodique, sinon la trajectoire est périodique. Cependant un nuage de points garde sa forme en se translatant : la dynamique n'est pas mélangeante.

**Corollaire 2.9.** « Loi de Benford ». On note  $k_n \in \{1, 2, \dots, 9\}$  le premier chiffre de  $u_n = 2^n$  en base 10. On a  $u_n : 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64, 128, 256, \dots$  donc

$$k_n = 1, 2, 4, 8, 1, 3, 6, 1, 2, 5, \dots$$

Alors dans cette suite  $(k_n)_n$ , un chiffre donné  $k \in \{1, \dots, 9\}$  apparaît avec la « probabilité »  $p_k = \frac{\log(1+\frac{1}{k})}{\log(10)}$ , soit  $p_1 = 30\%, p_2 = 17\%, \dots, p_9 = 4.5\%$ , avec la définition

$$p_k := \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \text{Card} \{n \leq N, k_n = k\}.$$

*Démonstration.* Dans un premier temps, comme dans la proposition 2.8, on montre que si  $\alpha \notin \mathbb{Q}$  et  $x_0 \in \mathbb{R}$  alors la suite  $x_n = n\alpha + x_0 \bmod 1 \in [0, 1[, n \in \mathbb{N}$  est uniquement ergodique c'est à dire que pour toute fonction  $a \in C^0([0, 1])$ ,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N a(x_n) = \int a(x) dx \quad (2.10)$$

En considérant un intervalle  $I \subset [0, 1]$  de longueur  $|I|$ , et la « fonction caractéristique »  $a(x) = 1$  si  $x \in I$ ,  $a(x) = 0$  sinon (en fait on considère une suite de fonctions continues qui approchent  $a$ ), on a que  $\sum_{n=1}^N a(x_n) = \text{Card} \{n \leq N, x_n \in I\}$  et  $\int a(x) dx = |I|$  et donc (2.10) s'écrit simplement  $\text{proba}(I) := \frac{1}{N} \text{Card} \{n \leq N, x_n \in I\} = |I|$ .

Dans un deuxième temps, on considère la suite  $u_n = 2^n = 2 \times u_{n-1}$  avec  $u_0 = 1$ . Par définition de  $k_n$ , on a  $k_n 10^r \leq u_n < (k_n + 1) 10^r$  avec  $r \in \mathbb{N}$ . Soit  $x_n := \frac{\log u_n}{\log 10} \bmod 1$ . Alors

$x_{n+1} = x_n + \alpha \text{ mod } 1$  avec <sup>3</sup>  $\alpha = \frac{\log 2}{\log 10} \notin \mathbb{Q}$  et  $\frac{\log(k_n)}{\log 10} \leq x_n < \frac{\log(k_n+1)}{\log 10}$  soit  $x_n \in I_{k_n} := [\frac{\log(k_n)}{\log 10}, \frac{\log(k_n+1)}{\log 10}[$ . Comme la suite  $x_n$  est ergodique on déduit que

$$p_k = \text{proba}(I_k) = |I_k| = \left| \frac{\log(k+1)}{\log 10} - \frac{\log(k)}{\log 10} \right| = \frac{\log\left(1 + \frac{1}{k}\right)}{\log(10)}$$

□

**Exemple 2.10. « Particule libre sur une surface, géodésiques »** Si  $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}^3$  est une surface lisse, une particule de position  $x(t) \in \mathcal{S}$  est dite libre de se déplacer sur la surface si la force qu'elle subit est normale à sa surface (cette force est telle qu'elle impose à la particule de rester sur la surface). Cela s'écrit donc :

$$P_x \frac{dv}{dt} = 0 \tag{2.11}$$

avec la vitesse  $v = \frac{dx}{dt} \in \mathbb{R}^3$  et  $P_x : \mathbb{R}^3 \rightarrow T_x \mathcal{S}$  le projecteur orthogonal sur le plan tangent à la surface au point  $x$ . Voir figure 2.4. En terme géométriques on note  $\frac{Dv}{dt} = 0$  et  $D := Pd$  s'appelle la **dérivée covariante** ou **connexion de Levi-Civita**. L'absence de force tangentielle fait que la particule va le plus « droit possible » en restant sur la surface. Par définition, on dit que sa trajectoire est une **géodésique**<sup>4</sup>. Par exemple sur la sphère  $S^2 \subset \mathbb{R}^3$  les géodésiques sont les grands cercles. Sur une surface plate (ou dans l'espace Euclidien  $\mathbb{R}^d$ ), les géodésiques sont des droites. On peut montrer [Tay96a, Tay96b] que

- [Tay96a, p.52] L'équation (2.11) a une unique solution  $x(t) \in \mathcal{S}$  qui de plus est solution des équations de Hamilton (2.5) avec le Hamiltonien  $H(x, \xi) = \frac{1}{2} \|\xi\|_{T^* \mathcal{S}}^2$  d'une particule libre qui fait apparaître la norme du vecteur orangeant  $\xi \in T_x^* \mathcal{S}$ . Comme cette formulation est intrinsèque et géométrique (i.e. invariante par changement de coordonnées) elle s'adapte au cas des variétés Riemanniennes, i.e. variété où chaque espace (co-)tangent est muni d'un produit scalaire. L'espace des phases est ici le fibré cotangent  $T^* \mathcal{S}$  qui est une variété de dimension  $2 \dim \mathcal{S} = 4$ .
- [Tay96a, p.47] Si  $A = x(0)$  et  $B = x(t)$  sont deux points de la même géodésique alors parmi tous les chemins paramétrés  $\gamma : t \rightarrow x(t)$  qui joignent  $A$  et  $B$  au temps  $t$ , la géodésique est un extremum local pour la « fonctionnelle énergie »  $\mathcal{E}(\gamma) := \int_0^t \frac{1}{2} \left\| \frac{dx}{dt} \right\|^2 dt$  et pour la « fonctionnelle longueur »  $l(\gamma) := \int_0^t \left\| \frac{dx}{dt} \right\| dt$  (noter que  $l(\gamma)$  est indépendant du paramétrage).

## Flot Hamiltonien et crochets de Poisson

Nous précisons quelques aspects de la dynamique Hamiltonienne qui seront utiles plus tard. Pour simplifier l'exposé, on supposera que pour toutes conditions initiales données

3. En effet si  $\frac{\log 2}{\log 10} = \frac{p}{q} \in \mathbb{Q}$  alors  $2^q = 10^p = 2^p 5^p$  ce qui implique  $p = q = 0$ , donc impossible.

4. Essayer de se convaincre et de démontrer que si l'on colle sans pli un ruban de scotch (étroit) sur une surface alors il suit une géodésique.

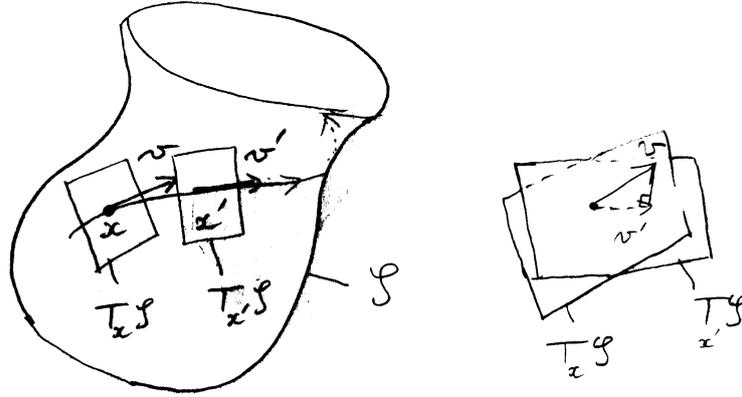


FIGURE 2.4 – Géodésique sur une surface  $\mathcal{S}$  : le vecteur vitesse  $v(t) = \frac{dx}{dt}$  est solution de  $P_x \frac{dv}{dt} = 0$  où  $P_x$  est le projecteur orthogonal sur le plan tangent.

$(x(0), \xi(0)) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$  la solution  $(x(t), \xi(t)) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$  de (2.5) existe et est unique pour tout  $t \in \mathbb{R}$  (Le théorème de Cauchy Lipschitz garantit cela localement en temps si  $V$  est Lipschitz).

**Définition 2.11.** Avec les notations précédentes le **flot Hamiltonien** est la famille d'applications pour  $t \in \mathbb{R}$  :

$$\phi_t : \begin{cases} \mathbb{R}^{2d} & \rightarrow \mathbb{R}^{2d} \\ (x(0), \xi(0)) & \rightarrow (x(t), \xi(t)) \end{cases} \quad (2.12)$$

(c'est un groupe à un paramètre). Voir figure 2.1.

**Théorème 2.12** (de Liouville). . *Le flot Hamiltonien  $\phi_t$  préserve le volume  $dx d\xi$  dans l'espace des phases  $\mathbb{R}^{2d}$ .*

*Démonstration.* Autrement dit, il faut montrer que le champ de vecteur  $\mathcal{V} = \left( \frac{\partial H}{\partial \xi}, -\frac{\partial H}{\partial x} \right)$  définit en (2.5) est de divergence nulle. En effet

$$\operatorname{div}(\mathcal{V}) = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial H}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left( -\frac{\partial H}{\partial x} \right) \stackrel{(2.5)}{=} 0.$$

□

**Proposition 2.13.** « *Conservation de l'énergie* ». Si la fonction  $H$  est indépendante de  $t$  (c.à.d.  $H$  est seulement fonction de  $(x, \xi)$ ) alors la valeur  $E = H(x(t), \xi(t))$  appelée *énergie* est constante le long d'une trajectoire.

*Démonstration.* On écrit :

$$\frac{dH(x(t), \xi(t))}{dt} = \left(\frac{\partial H}{\partial x}\right) \frac{dx}{dt} + \left(\frac{\partial H}{\partial \xi}\right) \frac{d\xi}{dt} \stackrel{(2.5)}{=} \left(-\frac{d\xi}{dt}\right) \frac{dx}{dt} + \left(\frac{dx}{dt}\right) \frac{d\xi}{dt} = 0$$

□

Au lieu de considérer l'évolution d'un point  $(x(t), \xi(t))$  sur l'espace des phases, nous verrons qu'il est naturel et instructif de considérer plus généralement l'évolution d'un nuage de points ou d'une distribution lisse de points, que l'on modélise par une distribution de probabilité  $f(x, \xi) dx d\xi$  sur l'espace des phases où  $f$  est une fonction lisse appelée densité de probabilité. L'hypothèse que  $f$  est lisse revient à s'intéresser à presque tous les points, i.e. sauf à un sous ensemble de mesure nulle.

**Définition 2.14.** L'opérateur de Liouville exprime l'évolution d'une distribution de probabilité sur l'espace des phases au temps  $t \in \mathbb{R}$  :

$$\mathcal{L}_t : \begin{cases} C^\infty(\mathbb{R}^{2d}) & \rightarrow C^\infty(\mathbb{R}^{2d}) \\ f & \rightarrow \mathcal{L}_t f := f \circ \phi_{-t} \end{cases} \quad (2.13)$$

Remarquons que en utilisant le théorème 2.12 de Liouville, la probabilité totale est conservée :

$$\int (\mathcal{L}_t f) dx d\xi = \int (f \circ \phi_{-t}) dx d\xi = \int f dx d\xi$$

**Proposition 2.15.** Pour toute fonction  $f \in C^\infty(\mathbb{R}^{2d})$  son évolution infinitésimale est donnée par

$$\frac{d(\mathcal{L}_t f)}{dt} = \{H, f\} \quad (2.14)$$

où

$$\{H, f\} := \frac{\partial H}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial \xi} - \frac{\partial H}{\partial \xi} \frac{\partial f}{\partial x} \quad (2.15)$$

s'appelle le *crochet de Poisson* des fonctions  $H, f$ .

*Démonstration.* On calcule

$$\begin{aligned}
 \frac{d(\mathcal{L}_t f)}{dt} &\stackrel{(2.13)}{=} \frac{d(f \circ \phi_{-t})}{dt} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{d(\phi_{-t})_x}{dt} + \frac{\partial f}{\partial \xi} \frac{d(\phi_{-t})_\xi}{dt} \\
 &\stackrel{(2.12)}{=} \frac{\partial f}{\partial x} \left( -\frac{dx}{dt} \right) + \frac{\partial f}{\partial \xi} \left( -\frac{d\xi}{dt} \right) \\
 &\stackrel{(2.5)}{=} \frac{\partial f}{\partial x} \left( -\frac{\partial H}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial f}{\partial \xi} \left( -\left( -\frac{\partial H}{\partial x} \right) \right) = \{H, f\}
 \end{aligned}$$

□

## 2.2 Mécanique quantique

### Équation de Schrödinger

Il est apparu dès le XIXème siècle que de nombreux phénomènes de la physique ne trouvaient pas d'explications avec la mécanique classique. De nouvelles idées apparaissent progressivement (« loi du corps noir » par Planck 1900, « effet photo électrique » par Einstein 1905) et en 1925 Schrödinger propose une « théorie ondulatoire » pour des « ondes de matière », que l'on appelle la **mécanique quantique**. Dans cette théorie, une particule élémentaire est modélisée par une **fonction d'onde**  $\psi_t(x) \in C^\infty(\mathbb{R}^3)$  qui est une fonction à valeur complexes sur l'espace  $x \in \mathbb{R}^3$  qui évolue en temps  $t \in \mathbb{R}$  selon l'**équation de Schrödinger**.

**Définition 2.16.** L'équation de Schrödinger est l'analogie de l'équation de Newton (ou de Hamilton) en mécanique classique et s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial \psi_t}{\partial t} = \text{Op}_\hbar(H) \psi_t \quad (2.16)$$

avec  $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$  J.s. appelée **constante de Planck**<sup>5</sup> et  $\text{Op}_\hbar(H)$  est un opérateur linéaire<sup>6</sup> appelé **opérateur Hamiltonien** défini par

$$\text{Op}_\hbar(H) := \frac{1}{2m} |\text{Op}_\hbar(\xi)|^2 + V(x), \quad (2.17)$$

avec

$$\text{Op}_\hbar(\xi) := -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_d} \right),$$

qui s'appelle l'**opérateur impulsion** et  $V(x)$  qui est l'opérateur de multiplication  $\psi(x) \rightarrow V(x)\psi(x)$ .

Dans (2.17), on a utilisé la notation de « produit scalaire d'opérateurs vectoriels » :  $|\text{Op}_\hbar(\xi)|^2 := \sum_{j=1}^d (\text{Op}_\hbar(\xi))_j^2 = (-i\hbar)^2 \left( \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \right) = -\hbar^2 \Delta$ . Ainsi  $\text{Op}_\hbar(H)\psi$  est la fonction :

$$(\text{Op}_\hbar(H)\psi)(x) = \frac{1}{2m} (-\hbar^2 \Delta \psi)(x) + V(x)\psi(x), \quad \Delta \psi := \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i^2}$$

Noter que  $\text{Op}_\hbar(H)$  se déduit du Hamiltonien classique  $H$ , eq.(2.4) en substituant la variable impulsion  $\xi$  par l'opérateur impulsion  $\text{Op}_\hbar(\xi)$ . Cela s'appelle le **principe de correspondance**.

*Remarque 2.17.* L'espace de Hilbert  $L^2(\mathbb{R}^d)$  est muni du produit scalaire  $L^2$  défini pour  $\psi, \varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$  par :

$$\langle \psi | \varphi \rangle_{L^2} := \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\psi(x)} \varphi(x) dx$$

donnant la norme (carré)

$$\|\psi\|_{L^2}^2 := \langle \psi | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} |\psi(x)|^2 dx$$

Pour la suite, il sera important de remarquer que (pour certaines fonctions  $V$ ) sur cet espace fonctionnel  $L^2(\mathbb{R}^3)$ , l'opérateur  $\text{Op}_\hbar(H)$  est essentiellement auto-adjoint [RS78, HS96] et que l'équation de Schrödinger (2.16) admet une solution que l'on peut écrire :

$$\psi_t = U(t)\psi_0, \quad U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\text{Op}_\hbar(H)\right). \quad (2.18)$$

où plus précisément  $U(t)$ ,  $t \in \mathbb{R}$ , est un groupe d'opérateurs unitaires sur  $L^2(\mathbb{R}^3)$  qui est la solution unique de :

$$U(0) = \text{Id}, \quad \frac{dU}{dt} = \left(-\frac{i}{\hbar}\text{Op}_\hbar(H)\right)U$$

(en effet en dérivant (2.18), on retrouve (2.16)).

Présenté ainsi, le principe de correspondance paraît être un « jeu d'écriture » et on ne comprends pas quel rapport il peut y avoir entre la mécanique classique et la mécanique quantique à part ce « jeu d'écriture ». Pour justifier plus cela, nous montrerons plus loin avec la quantification de Weyl et le Théorème d'Egorov que les ondes quantiques régies par l'équation de Schrödinger se déplacent approximativement comme des particules régies par les équations de Hamilton classiques. Cette approximation est d'autant plus valable que l'on observe les ondes à grande échelle (par rapport aux échelles atomiques où  $\hbar \simeq 1$ ). En physique, la petite valeur de  $\hbar$  à l'échelle humaine explique qu'il ait fallu attendre le XXème siècle pour découvrir les effets subtils de la mécanique quantique qui se manifestent à l'échelle des atomes. En mathématique cette correspondance classique-quantique s'appelle l'« **analyse semi-classique** » ou « **analyse micro-locale** » [Zwo12b, Tay96b, chap.7].

## Signification physique et probabiliste de la fonction d'onde $\psi(x)$

[BC89] En physique, la fonction d'onde  $\psi(x)$  a une signification probabiliste : si une même expérience est répétée un grand nombre de fois et produit une particule toujours dans le même état décrit par la fonction  $\psi(x)$  alors cela signifie que la probabilité de détecter expérimentalement la particule dans le domaine  $U \subset \mathbb{R}^3$  de l'espace est :

$$P(U) = \frac{1}{\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}} \int_U |\psi(x)|^2 dx, \quad (2.19)$$

avec la constante de normalisation  $\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} := \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 dx\right)^{1/2}$ . Autrement dit la densité de probabilité est  $\frac{1}{\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}} |\psi(x)|^2 dx$ . Noter que, comme attendu, la probabilité sur tout l'espace est  $P(\mathbb{R}^3) = 1$ . Notons aussi que le résultat  $P(U)$  est inchangé si on modifie  $\psi \rightarrow \lambda\psi$  avec  $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ . De même pour l'équation d'évolution (2.16) qui est linéaire. Donc il est plus pratique de supposer que les fonctions d'ondes sont normalisées c'est à dire  $\|\psi\|_{L^2}^2 = \langle \psi | \psi \rangle = 1$ , ce que l'on fera dans la suite.

Ce résultat (2.19) étonnant (appelé **principe de la mesure**) montre que pour une unique expérience, la théorie quantique ne prédit rien. Elle ne peut prédire que des moyennes sur des grands nombres. En physique, on parle de « hasard quantique intrinsèque ». Par exemple la position moyenne de la particule  $\langle x \rangle \in \mathbb{R}^3$  est donnée par

$$\langle x \rangle := \int x |\psi(x)|^2 dx = \langle \psi | x \psi \rangle \quad (2.20)$$

Ce principe de la mesure rajoute que après une mesure où la particule a été détectée dans un domaine  $U \subset \mathbb{R}^3$  alors la nouvelle fonction d'onde est supportée sur  $U$ . Cela s'appelle le « **collapse de la fonction d'onde** » ou « **réduction du paquet d'onde** ».

La relation (2.20) est en fait plus générale. Par exemple pour une mesure de l'énergie, la valeur moyenne prédite est donnée par

$$\langle H \rangle = \langle \psi | \text{Op}_h(H) \psi \rangle$$

et il est postulé en physique que cela est valable pour toutes les « **observables** » de la forme  $\text{Op}_h(a)$  (voir (2.29)).

## L'expérience des doubles fentes de Young

Il s'agit d'une expérience les plus intrigante de mécanique quantique mettant en valeur la **dualité onde-corpuscule**, très simple en principe mais suscitant des questions d'interprétation qui n'ont pas vraiment de réponse.

## Équation de Schrödinger stationnaire

Comme l'opérateur Hamiltonien  $\text{Op}_h(H)$  est linéaire, il est naturel, dans le cas où il est indépendant du temps  $t$ , de considérer ses vecteurs propres. Pour cela on met en oeuvre la

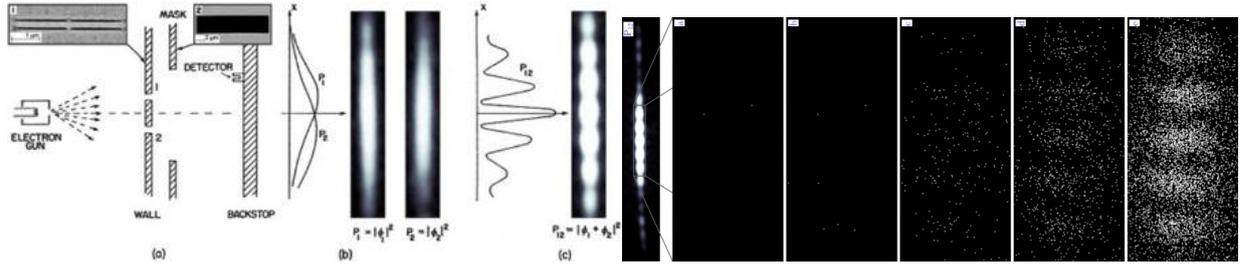


FIGURE 2.5 – Expérience faite en 2012 [BPLB13], interférences et détection de l’onde quantique d’un électron après le passage dans une double fente. Après un petit nombre de détections les résultats semblent aléatoires, mais après un grand nombre d’expériences identiques on observe la densité de probabilité  $|\psi(x)|^2$  prédit par la théorie quantique. Voir video des impacts sur la page web du journal.

« théorie spectrale des opérateurs », il faut préciser un espace fonctionnel [Dav07, DD96, RS72, HS96, SI00]. Dans le cas présent il est naturel de considérer l’espace de Hilbert  $L^2(\mathbb{R}^3)$  dans lequel  $\text{Op}_\hbar(H)$  est auto-adjoint (moyennant des hypothèses sur le potentiel  $V$ ). Supposons que  $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}^3)$  soit vecteur propre de  $\text{Op}_\hbar(H)$  avec la valeur propre  $E$  :

$$\text{Op}_\hbar(H) \psi_0 = E \psi_0, \quad E \in \mathbb{R} \quad (2.21)$$

On appelle  $E$  l’**énergie** de l’état  $\psi_0$ . Il est facile de résoudre l’équation d’évolution (2.16) partant de l’état  $\psi_0(x)$  et cela donne

$$\psi_t(x) = e^{-iEt/\hbar} \psi_0(x) \quad (2.22)$$

Ainsi la densité de probabilité associée  $|\psi_t(x)|^2 = |\psi_0(x)|^2$  ne dépend pas du temps, on dit que  $\psi_t(x)$  est une **onde stationnaire**.

Dans le cas d’un électron gravitant autour d’un proton (atome d’Hydrogène), on peut calculer les valeurs propres de  $\text{Op}_\hbar(H)$  qui sont négatives et prennent des valeurs discrètes [BC89] :

$$E_n = -\mathcal{R} \frac{1}{n^2}, \quad n \in \mathbb{N}^*,$$

avec la constante de Rydberg  $\mathcal{R} = \frac{1}{2} \alpha^2 m c^2$  et la constante de structure fine  $\alpha = \frac{k_e e^2}{\hbar c}$ . Historiquement ce spectre discret a permis d’expliquer les raies de fluorescence des atomes, observées dès 1752 par T. Melvill. Voir figure 2.6.

**Modèle très simple :** c’est celui à une dimension  $d = 1$  d’une particule libre dans l’intervalle  $x \in [0, L]$ . On a  $H(x, \xi) = \frac{1}{2m} \xi^2$ ,  $\text{Op}(H) = -\frac{1}{2m} \hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$  et (2.21) s’écrit  $\psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0$  avec les conditions  $\psi(0) = \psi(L) = 0$ . Les ondes stationnaires sont donc  $\psi_n(x) = \sin(n\pi \frac{x}{L})$ ,  $n \geq 1$  et les niveaux d’énergie sont  $E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2$ .

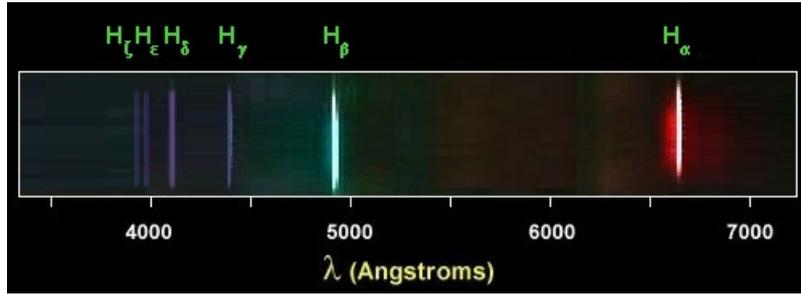


FIGURE 2.6 – On éclaire un gaz d’hydrogène avec un laser pour lui fournir de l’énergie. Les électrons des atomes réémettent l’énergie  $h\nu$  sous forme lumineuse (appelée fluorescence) après une transition entre des niveaux  $E_n \rightarrow E_m$ , avec  $E_m < E_n$ . Par exemple les raies de Balmer (1885) ont des longueurs d’ondes  $\lambda_n$  dans le visible données par  $h\nu_n = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_n} = E_n - E_2$ ,  $n \geq 3$ .

### Explication du principe de correspondance sur un modèle simple

Avant d’introduire la quantification de Weyl, considérons la fonction de Hamilton classique linéaire suivante

$$H(x, \xi) = v \cdot \xi + w \cdot (-x) \quad (2.23)$$

avec  $\mathcal{V} = (v, w) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d = \mathbb{R}^{2d}$  fixé. Les équations de Hamilton (2.5) donnent alors

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \xi} = v, \quad \frac{d\xi}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} = w$$

qui signifient que le point  $(x(t), \xi(t))$  se déplace à vitesse constante  $\mathcal{V} = (v, w)$  sur l’espace des phases. Au niveau de la mécanique quantique, avec le principe de correspondance on obtient l’opérateur :

$$\text{Op}_\hbar(H) = v \cdot \text{Op}_\hbar(\xi) + w \cdot (-x) \quad (2.24)$$

et l’équation de Schrödinger (2.16) peut se résoudre pour donner explicitement <sup>7</sup> :

$$\psi_t(x) = (e^{-it\text{Op}_\hbar(H)/\hbar}\psi_0)(x) = e^{iw(xt - \frac{1}{2}vt^2)/\hbar}\psi_0(x - vt) \quad (2.25)$$

ainsi la fonction  $|\psi_t|(x) = |\psi_0(x - vt)|$  se déplace à la vitesse  $v$  selon  $x$ , comme en mécanique classique. Ensuite, pour comprendre l’effet de  $w$ , considérons la  $\hbar$ -transformée de Fourier <sup>8</sup> de  $\psi_t$  :

$$(\mathcal{F}_\hbar\psi_t)(\xi) := \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-i\xi x/\hbar}\psi_t(x) dx.$$

7. En effet  $i\hbar \frac{d\psi_t}{dt} = -w(x - vt)\psi_t(x) + i\hbar(\partial_x\psi_0)(-v) = \text{Op}_\hbar(H)\psi_t$

8. Inversement  $\psi_t(x) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{i\xi x/\hbar}(\mathcal{F}_\hbar\psi_t)(\xi) d\xi$ .

Eq. (2.25) donne :

$$(\mathcal{F}_h \psi_t)(\xi) = e^{-iv(\xi t - \frac{1}{2}wt^2)/\hbar} (\mathcal{F}_h \psi_0)(\xi - wt) \quad (2.26)$$

qui montre que la fonction  $|\mathcal{F}_h \psi_t|(\xi) = |\mathcal{F}_h \psi_0|(\xi - wt)$  se déplace à la vitesse  $w$  selon  $\xi$ .

Ce petit modèle justifie à posteriori le principe de correspondance car avec le Hamiltonien (2.23), l'onde se déplace comme une particule avec la vitesse  $\mathcal{V} = (v, w)$  sur l'espace des phases (en fait vitesse  $v$  en  $x$  et vitesse  $w$  en  $\xi$  après transformée de Fourier). De plus il montre la signification de l'impulsion  $\xi$  : elle intervient dans l'expression  $e^{-i\xi x/\hbar} = e^{-i\omega_x x}$  et on peut donc dire que  $\omega_x = \frac{1}{\hbar}\xi$  est une fréquence spatiale<sup>9</sup>.

### Paquet d'onde Gaussien et principe d'incertitude

Les équations (2.25) et (2.26) montrent dans un modèle simple que les ondes se déplacent comme une particule. Cependant une particule classique est localisée en espace  $x$  et en vitesse (i.e. sa vitesse a une valeur précise) alors que l'onde  $\psi_t(x)$  décrite ci-dessus est arbitraire et peut être « très délocalisée ». Un paquet d'onde Gaussien est une forme d'onde la plus localisée possible en  $x$  et en  $\xi$ . Soit  $(x_0, \xi_0) \in \mathbb{R}^{2d}$  point de l'espace des phases et  $\sigma > 0$ . On associe le **paquet d'onde Gaussien**

$$\psi_{x_0, \xi_0}(x) := a e^{i\xi_0 \cdot x/\hbar} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}|x-x_0|^2} \quad (2.27)$$

avec  $a := \frac{1}{(2\pi)^{d/2}(\pi\sqrt{\sigma})^{d/4}}$  de sorte que  $\|\psi_{x_0, \xi_0}\|_{L^2} = 1$ . On a  $|\psi_{x_0, \xi_0}|^2(x) := a^2 e^{-\frac{1}{\sigma^2}|x-x_0|^2}$  qui est une Gaussienne de largeur  $\Delta x = \sigma$  et centrée en  $x_0$ . Sa transformée de Fourier est<sup>10</sup>

$$(\mathcal{F}_h \varphi_{x_0, \xi_0})(\xi) = a \hbar^{-d/2} e^{-ix_0 \cdot \xi/\hbar} e^{-\frac{|\xi-\xi_0|^2}{(\sqrt{2}/\sigma)^2}}$$

donnant  $|\mathcal{F}_h \varphi_{x_0, \xi_0}|^2(\xi) = a \hbar^{-d} e^{-\frac{|\xi-\xi_0|^2}{(\hbar/\sigma)^2}}$  qui est une Gaussienne de largeur  $\Delta \xi = \hbar/\sigma$  et centrée en  $\xi_0$ . On observe que le produit des largeurs est<sup>11</sup>

$$\Delta x \Delta \xi = \hbar \quad (2.28)$$

indépendant de  $\sigma$ .

Interprétation physique : ainsi diminuer  $\Delta x$  augmente  $\Delta \xi$  et réciproquement. Rappelons que dans le cas d'une particule libre (2.8) on a  $\xi = mv = m \frac{dx}{dt}$  qui est la vitesse. Eq.(2.28) donne  $\Delta x \Delta v = \hbar/m$  qui s'appelle le **principe d'incertitude**. Par exemple pour un électron,  $m = 9.10^{-31} \text{kg}$  donc  $\hbar/m = 10^2 \text{cm}^2/\text{s}$  est assez important et les effets ondulatoires sont perceptibles à l'échelle humaine sauf que la « décohérence » perturbe cela (pour la lune  $m = 7.10^{22} \text{kg}$  donnant  $\hbar/m = 10^{-56} \text{m}^2/\text{s}$  qui est imperceptible).

Interprétation mathématique : le principe d'incertitude montre que dans l'espace des phases,  $\Delta x \Delta \xi = \hbar$  est comme une surface élémentaire appelée « **quantum d'action** ». On

9. en langage de la géométrie différentielle, l'impulsion  $\xi$  est un vecteur cotangent

10. Pour le calcul on utilise l'intégrale Gaussienne  $\int_{\mathbb{R}^d} e^{-|y|^2} dy = \pi^d$ .

11. Il est plus naturel d'écrire  $\Delta x \Delta (\xi/\hbar) = 1$  puisque  $\omega = \xi/\hbar$  est la fréquence spatiale.

peut considérer les variables  $(x, \xi)$  de l'espace des phases comme « indépendantes » sur des échelles de surface  $S \gg \hbar$ . Cela est formulé rigoureusement dans les théorèmes de l'analyse semi-classique comme les théorèmes de composition et commutateur d'observables (2.30) et (2.36).

## Quantification de Weyl

(Voir exposé de C. Fermanian [Fer14]). Pour une fonction quelconque sur l'espace des phases  $a(x, \xi) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d})$  que l'on appelle **symbole**<sup>12</sup>, on associe un opérateur  $\text{Op}_\hbar(a) : \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$  appelé **opérateur pseudo-différentiel**<sup>13</sup> obtenu par la **règle de quantification de Weyl** suivante[Zwo12b, lemme 4.10] :

$$\text{Op}_\hbar(a) := \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^{2d}} \int (\mathcal{F}a)(\omega_x, \omega_\xi) e^{i(\omega_x x + \omega_\xi \text{Op}_\hbar(\xi))} d\omega_x d\omega_\xi \quad (2.29)$$

avec  $\mathcal{F}a$  la transformée de Fourier de  $a$  :

$$a(x, \xi) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^{2d}} \int (\mathcal{F}a)(\omega_x, \omega_\xi) e^{i(\omega_x x + \omega_\xi \xi)} d\omega_x d\omega_\xi$$

et où (2.29) fait apparaître des opérateurs que l'on a vu dans (2.25) :

$$\left( e^{i(\omega_x x + \omega_\xi \text{Op}_\hbar(\xi))} \psi \right) (x) = e^{i\omega_x x + \frac{1}{2}\hbar\omega_\xi \omega_x} \psi(x + \hbar\omega_\xi)$$

et cela donne l'expression équivalente pour la quantification de Weyl

$$(\text{Op}_\hbar(a) \psi)(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int a\left(\frac{x+y}{2}, \xi\right) e^{i\xi \cdot (x-y)/\hbar} \psi(y) dy d\xi$$

*Remarque 2.18.* Vérifions que la règle de quantification (2.29) donne bien (2.17) : en effet pour une fonction  $V(x)$  (fonction de  $x$  seulement) on vérifie que  $\text{Op}_\hbar(V(x)) = V(x)$ , opérateur multiplication par  $V$  (on a  $(\mathcal{F}V)(\omega_x, \omega_\xi) = (\mathcal{F}V(\omega_x)) \cdot \delta(\omega_\xi)$ . Cela donne  $\text{Op}_\hbar(V(x)) = V(x)$ .) De même  $\text{Op}_\hbar(V(\xi)) = V(\text{Op}_\hbar(\xi))$  donc  $\text{Op}_\hbar(\xi^2) = (\text{Op}_\hbar(\xi))^2 = -\hbar^2 \Delta$ . On déduit (2.16).

Voici trois propriétés générales de la procédure de quantification qui seront utiles dans la suite.

12.  $\mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d}) \subset C^\infty(\mathbb{R}^{2d})$  désigne l'**espace de Schwartz** formé par les fonctions lisses qui décroissent très vite (et de même pour leurs dérivées). Il n'a pas une grande importance pour la compréhension de cet exposé.

13. En physique les opérateurs  $\text{Op}_\hbar(a)$  sont appelés « observables ». Comme exemple simple il y a la position  $\text{Op}_\hbar(x)$ , l'impulsion  $\text{Op}_\hbar(\xi)$ , l'énergie  $\text{Op}_\hbar(H(x, \xi))$ , etc

**Proposition 2.19.** [Zwo12b]

— « **Composition d'opérateurs et produit de symboles** » : Pour tout  $a, b \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d})$  on a pour  $\hbar \ll 1$

$$\text{Op}_\hbar(a) \circ \text{Op}_\hbar(b) = \text{Op}_\hbar(a \cdot b) + O(\hbar) \quad (2.30)$$

(où le reste est en norme opérateur).

— « **Commutateurs d'opérateurs et crochets de Poisson de symboles** (2.15) » :

$$\left[ \left( -\frac{i}{\hbar} \right) \text{Op}_\hbar(a), \left( -\frac{i}{\hbar} \right) \text{Op}_\hbar(b) \right] = \left( -\frac{i}{\hbar} \right) \text{Op}_\hbar(\{a, b\}) (1 + O(\hbar)) \quad (2.31)$$

— **Trace d'opérateurs** :

$$\text{Tr}(\text{Op}_\hbar(a)) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x, \xi) dx d\xi \quad (2.32)$$

Comme exemple très simple mais important de (2.31), on calcule que  $x \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi - \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) (x\psi) = i\hbar\psi$  et par ailleurs  $\{x, \xi\} = 1$ . Cela s'écrit :  $\left[ \left( -\frac{i}{\hbar} \right) \text{Op}_\hbar(x), \left( -\frac{i}{\hbar} \right) \text{Op}_\hbar(\xi) \right] = \left( -\frac{i}{\hbar} \right) \text{Op}_\hbar(\{x, \xi\})$ .

## Théorème d'Egorov

(Voir exposé de C. Fermanian [Fer14]). Nous allons voir maintenant avec le **théorème d'Egorov**, l'intérêt de la quantification de Weyl qui est que dans la **limite semi-classique**  $\hbar \rightarrow 0$ , pour un Hamiltonien  $H(x, \xi)$  assez général et pour un intervalle de temps  $t$  borné, les ondes quantiques régies par l'équation de Schrödinger se déplacent approximativement comme des particules régies par les équations de Hamilton classiques. Cette approximation est d'autant plus valable que  $\hbar \ll 1$  c'est à dire que la fréquence spatiale  $\omega_x = \xi/\hbar \gg 1$ . En physique, la petite valeur de  $\hbar$  à l'échelle humaine explique qu'il ait fallu attendre le XXème siècle pour découvrir les effets subtils de la mécanique quantique car se manifestant à l'échelle des atomes.

Afin de motiver le résultat d'Egorov qui va suivre, considérons en mécanique classique une fonction  $a(x, \xi)$  sur l'espace des phases considérée comme « observable ». On note  $\mathcal{M}_a : f(x, \xi) \rightarrow a(x, \xi) f(x, \xi)$  l'opérateur de multiplication associé. Utilisant l'opérateur d'évolution de Liouville (2.13) défini par  $\mathcal{L}_t f = f \circ \phi_{-t}$  on a la relation simple suivante :

$$\mathcal{L}_t \circ \mathcal{M}_a \circ \mathcal{L}_{-t} = \mathcal{M}_{\mathcal{L}_t a} \quad (2.33)$$

*Démonstration.* Pour  $f \in C^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ ,

$$(\mathcal{L}_t \circ \mathcal{M}_a \circ \mathcal{L}_{-t} f)(x) = \mathcal{L}_t(a(x) f(\phi_t(x))) = a(\phi_{-t}(x)) f(x) = (\mathcal{M}_{a \circ \phi_{-t}} f)(x)$$

□

On comprend (2.33) comme une « équation d'évolution classique des observables ». Rappelons que l'équation d'évolution infinitésimale correspondante (2.14) est  $\frac{d(\mathcal{L}_t a)}{dt} = \{H, a\}$ .

Le théorème d'Egorov suivant montre que en mécanique quantique (analyse semi-classique) on a une relation analogue mais approximative (avec une erreur  $O(\hbar)$  avec  $\hbar \ll 1$ ). L'opérateur d'évolution classique  $\mathcal{L}_t$  est remplacé par l'opérateur unitaire  $U(t)$ , eq.(2.18) et l'opérateur  $\mathcal{M}_a$  est remplacé par  $\text{Op}_\hbar(a)$ . Plus important à remarquer, l'espace fonctionnel classique  $L^2(\mathbb{R}_{x,\xi}^{2n})$  classique est remplacé par l'espace quantique  $L^2(\mathbb{R}_x^n)$ .

**Théorème 2.20** (d'Egorov.). [Zwo12b, thm 11.1] Pour tout  $a \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d})$ , tout  $t \in \mathbb{R}$ , on a la relation

$$U(t) \circ \text{Op}_\hbar(a) \circ U(-t) = \text{Op}_\hbar(a_t) \quad (2.34)$$

avec  $a_t \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d})$  sous la forme

$$a_t = \mathcal{L}_t a + O_t(\hbar) \quad (2.35)$$

Au niveau infinitésimal cette relation s'écrit :

$$i\hbar \frac{d\text{Op}_\hbar(a_t)}{dt} = [\text{Op}_\hbar(H), \text{Op}_\hbar(a_t)] = i\hbar \text{Op}_\hbar(\{H, a_t\}) + O(\hbar^2) \quad (2.36)$$

*Remarque 2.21.* On comprend (2.34) comme une « équation d'évolution quantique des observables ». La notation  $O_t(\hbar)$  dans (2.35) signifie que les constantes peuvent dépendre de  $t$ . Ici ce reste est donc négligeable à  $t$  fixé et  $\hbar \rightarrow 0$ . On peut améliorer cela et avoir un reste négligeable pour  $|t| \leq \varepsilon \log(1/\hbar)$  et  $\hbar \rightarrow 0$  à condition que  $\varepsilon$  soit assez petit. On appelle cette limite  $t_{\max} = \varepsilon \log(1/\hbar)$  le **temps d'Erhenfest**. On verra qu'il joue un rôle important en chaos quantique.

*idée de preuve du Th d'Egorov.* La relation (2.36) se déduit de (2.31). Ensuite (2.34) se déduit par intégration. En effet se rappelant  $U(t) = \exp(-it\text{Op}_\hbar(H)/\hbar)$  en (2.18) et  $d(\mathcal{L}_t a)/dt = \{H, a\}$  en (2.14) on obtient en dérivant (2.34) et faisant  $t = 0$  que :

$$\begin{aligned} \left(-\frac{i}{\hbar} \text{Op}_\hbar(H)\right) \text{Op}_\hbar(a) + \text{Op}_\hbar(a) \left(\frac{i}{\hbar} \text{Op}_\hbar(H)\right) &= \text{Op}_\hbar(\{H, a\}) + O(\hbar) \\ \Leftrightarrow [\text{Op}_\hbar(H), \text{Op}_\hbar(a)] &= i\hbar \text{Op}_\hbar(\{H, a\}) + O(\hbar^2) \end{aligned}$$

□

### 3 Chaos en mécanique classique

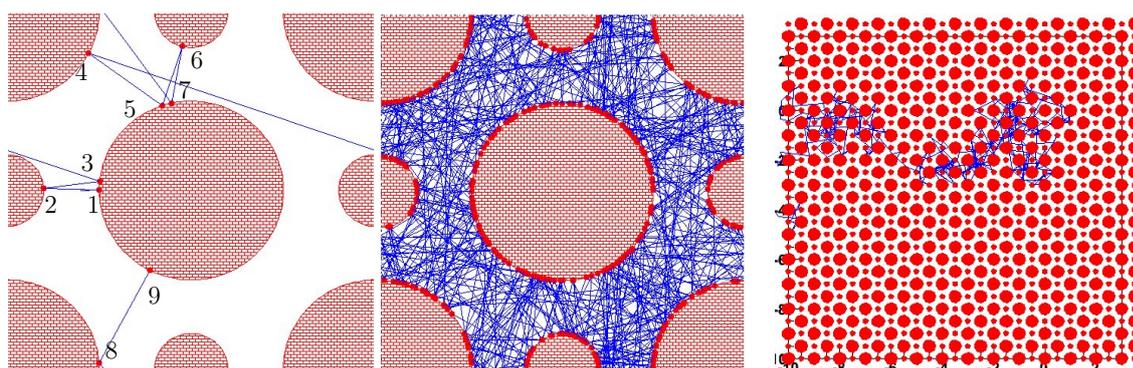
Dans cette section on revient à la mécanique classique de Hamilton pour s'intéresser à un type de dynamique que l'on appelle « fortement chaotique » car ayant une forte « sensibilité aux conditions initiales ». Le terme technique sera « Anosov » ou « uniformément hyperbolique ».

La découverte de telles dynamiques chaotiques a commencé au XIXème siècle avec Hadamard et Poincaré, puis leur étude a progressé au XXème siècle avec Birkhoff, Anosov, Smale, Bowen, Ruelle etc.. et fait toujours l'objet de recherches en physique et en mathématiques.

Commençons par un exemple simple à expliquer (mais difficile à étudier) que sont les billards dispersifs. Nous verrons ensuite qu'en régularisant les rebonds sur les bords on obtient un modèle mieux compris qui est le flot géodésique sur une variété à courbure négative. Pour montrer les techniques qui permettent de démontrer les propriétés de chaos, nous étudierons finalement l'« application du chat d'Arnold » ou « cat map » qui est un modèle jouet où les propriétés de chaos sont plus simples à démontrer. L'étude des dynamiques chaotiques est plus générale que celle des dynamiques Hamiltonienne (c'est à dire de la forme (2.5)). On parle de dynamique chaotique pour des flots générés par des champs de vecteurs quelconques, pour des automates cellulaires etc...

#### 3.1 Billard dispersif de Sinaï et instabilité d'Anosov

Le billard de Sinaï est un carré avec conditions périodiques au bord (c'est donc un tore  $\mathbb{T}^2$ ) et contenant des disques. Une bille évolue en ligne droite à vitesse constante et rebondit parfaitement sur le bord des disques. Elle a donc un comportement déterministe. Mais on observe que le comportement est imprévisible, «chaotique». Pourquoi?



1 trajectoire, temps court

1 trajectoire temps long

Le mouvement sur le plan semble être une marche aléatoire.

L'explication heuristique est que les bords du billard sont convexes ce qui implique une « dispersion des trajectoires » après chaque rebond (on caractérisera cela par la sensibilité aux conditions initiales d'Anosov). Voir figure 3.1(a).

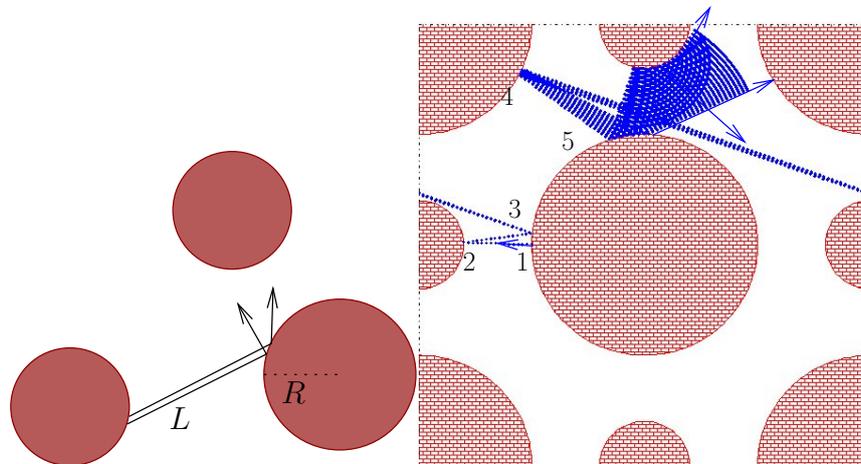


FIGURE 3.1 – (a) Billard dispersif. (b) nuage de billes indépendantes avec une incertitude initiale en position de  $\Delta y = 10^{-4}$ .

Après quelques rebonds seulement, les deux trajectoires initialement très proches peuvent avoir des évolutions très différentes (décorrélées). Sur la figure 3.1(b), on observe une bille (ou nuage de billes indépendantes) avec une incertitude initiale en position de  $\Delta y = 10^{-4}$ . Cette incertitude croît exponentiellement et le comportement peut différer notablement après un temps très court (ici 5 rebonds).

La dynamique déterministe engendre donc du hasard. Cela est à l’origine du « chaos déterministe » et de la complexité dans les systèmes dynamiques, et plus généralement de la complexité en physique et dans la nature. Références : Ruelle “Hasard et chaos” 1990. Les vidéos de E. Ghys et al. : [JEA].

**Question :** Est-il possible de faire des prédictions sur l’évolution malgré ce hasard ? de comprendre les lois de ce hasard ?

### Approche probabiliste

Pour répondre à la question ci-dessus, il est nécessaire d’adopter une approche probabiliste. Voici l’idée. Sur la figure 3.2 observons  $N = 10^4$  billes indépendantes avec des conditions initiales très proches  $\Delta y = 10^{-4}$ . La distribution des billes peut s’interpréter comme une distribution de probabilité d’une bille initiale. Cette distribution converge vers l’équilibre et diffuse sur le réseau (le billard périodisé sur le plan). Pour cette distribution, on observe un comportement **prédictible** mais **irréversible**. Il y a donc une “**évolution effective** « prédictible »<sup>14</sup> pour la distribution de probabilité. On introduit la notion d’**entropie** pour caractériser cette perte d’information sur la position de la particule au cours du temps.

14. Le travail va donc porter à trouver les lois d’évolution pour cette distribution de probabilité. C’est un sujet actuel de recherche.

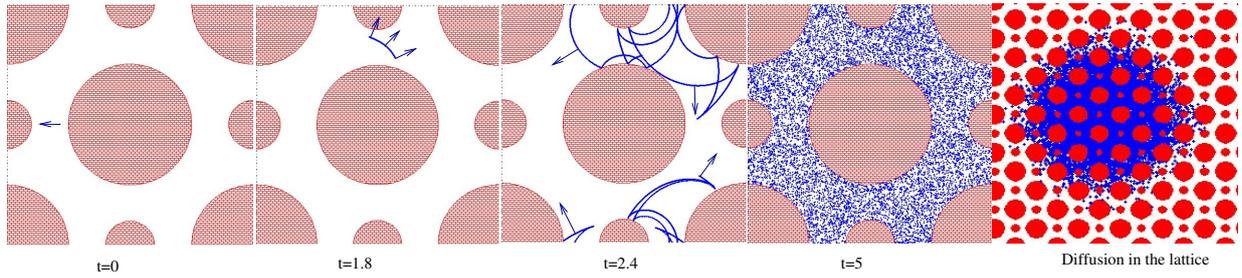
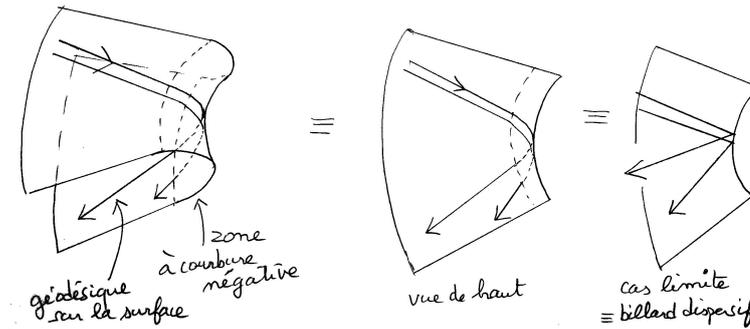


FIGURE 3.2 – Evolution d’un ensemble très localisé de conditions initiales ( $\Delta y = 10^{-4}$ ). La distribution s’équidistribue sur le billard. Dans le réseau, elle diffuse (rayon  $r(t) \simeq C \cdot \sqrt{t}$ ).

- Remarque 3.1.*
1. Plus généralement, un **billard dispersif** est un ensemble d’obstacles lisses et convexes sur  $\mathbb{T}^d$  placés de sorte que les trajectoires ont uniformément un horizon fini.
  2. La dynamique en ligne droite dans un billard dispersif peut être considéré comme des trajectoires géodésiques sur une surface à courbure négative :



3. En 1898, Hadamard a initié la théorie du chaos avec l’étude des géodésiques sur les surfaces à courbure négative constante (surfaces hyperboliques).

### Espace des phases et couche d’énergie.

**Cas du flot géodésique sur une surface lisse :** Nous avons vu dans l’exemple 2.10 que le flot géodésique sur une surface  $\mathcal{S}$  est un flot Hamiltonien. L’espace des phases est  $(x, \xi) \in T^*\mathcal{S}$ , c’est à dire qu’à chaque point  $x \in \mathcal{S}$  il faut aussi considérer la variable impulsion  $\xi \in T_x^*\mathcal{S} \equiv \mathbb{R}^2$ . On a  $\dim T^*\mathcal{S} = 4$ . L’énergie  $H(x, \xi) = \frac{1}{2} \|\xi\|_x^2$  est conservée. Par conséquent la particule évolue dans une sous variété (selon son énergie de départ  $E > 0$ )

$$\Sigma_E := \left\{ (x, \xi) \in T^*\mathcal{S}, \quad E = \frac{1}{2} \|\xi\|_x^2 \right\}$$

appelée **couche d’énergie**.  $\Sigma_E$  est une variété compacte si  $\mathcal{S}$  est compacte et  $\dim \Sigma_E = 3$ .

**Cas d’un billard dispersif :** Le domaine est aussi noté  $\mathcal{S}$ . L’énergie  $E = H(x, \xi) = \frac{1}{2} |\xi|^2$  est indépendant de  $x$ . On déduit que  $v = \frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \xi} = \xi$  et  $E = \frac{1}{2} |v|^2$ , en particulier la

norme de la vitesse est conservée. Un point de la couche d'énergie  $\Sigma_E$  est donc caractérisé par  $x \in \mathcal{S}$  et la direction de la vitesse  $v$ . La difficulté cependant dans un billard dispersif est que la variété  $\Sigma_E$  et le flot  $\phi_t$  sur  $\Sigma_E$  ne sont pas  $C^\infty$  partout. Sur une sous variété de  $\Sigma_E$  correspondant aux « rebonds rasants » ils sont seulement continus.

Pour comprendre la structure locale de la variété  $\Sigma_E$  et du flot  $\phi_t$  considérons localement sur  $\mathcal{S}$  des coordonnées cartésiennes  $(x_1, x_2)$  et  $(x_1, x_2, \theta)$  sur  $\Sigma_E$  (voir figure 3.3) près d'un point du bord  $x_1 = 0, x_2 = 0$ . Le bord est défini par une fonction convexe  $x_2(x_1)$  avec  $x_2(0) = 0, x_2'(0) = 0, x_2''(0) = -\frac{1}{R}$  avec  $R$  rayon de courbure. La direction tangente au bord au point  $(x_1, x_2(x_1))$  est notée  $\theta^*(x_1), \theta^*(x_1) + \pi$  avec  $\theta^*(0) = 0, \frac{d\theta^*}{dx_1}(0) = -\frac{1}{R}$ . Localement la variété  $\Sigma_E$  (i.e. une carte locale) est décrite par les coordonnées  $x_1 \in ]-\delta, \delta[, x_2 \in [x_2(x_1), \delta], \theta \in \mathbb{R}$  avec  $\delta > 0$  et les identifications  $(x_1, x_2(x_1), \theta) \sim (x_1, x_2(x_1), \theta + 2\pi) \sim (x_1, x_2(x_1), 2\theta^*(x_1) - \theta)$  pour tous  $x_1, \theta$  (i.e groupe  $\mathbb{Z}_2 := \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ ). Cela montre que  $\Sigma_E$  est un « orbifold » qui est une variété  $C^\infty$  sauf sur la sous variété de dimension 1  $(x_1, x_2(x_1), \theta^*(x_1))$ . Dans les coordonnées précédentes le flot  $\phi_t$  sur  $\Sigma_E$  est décrit par  $\theta = \text{cste}$ , et  $(\dot{x}_1, \dot{x}_2) = (\cos \theta, \sin \theta)$ .

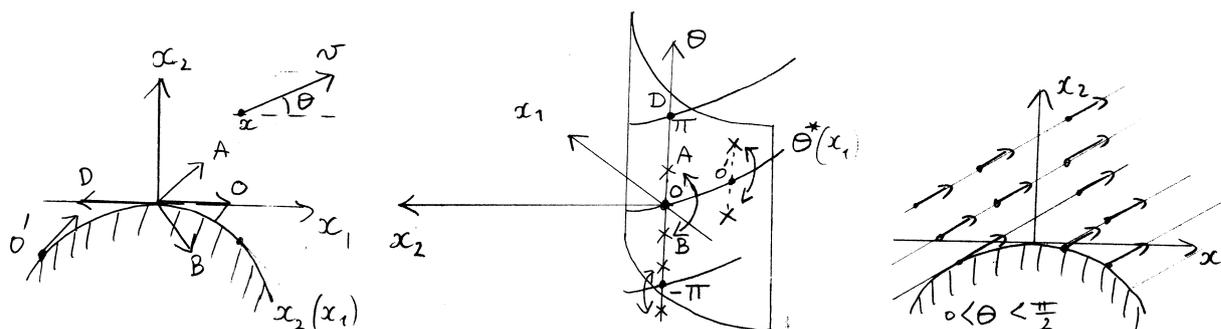


FIGURE 3.3 – Structure locale du flot et de la couche d'énergie  $\Sigma_E$  pour un billard dispersif. (a) dans le plan  $(x_1, x_2)$ . (b) espace  $(x_1, x_2, \theta)$ . (c) flot sur une tranche  $\theta = \text{cste}$ . Pour illustration, les points  $A, B, O, D, O' \in \Sigma_E$  sont représentés en (a) et (b).

### Instabilité hyperbolique d'Anosov

La définition suivante due à Anosov caractérise précisément la propriété de « sensibilité aux conditions initiales ». Cette définition est très utile car on peut en tirer des conséquences qui démontre la « manifestation de chaos » appelé « mélange » (voir Section 3.2) et d'autre part cette définition se vérifie dans certains modèles comme les billards dispersifs ou le flot géodésique sur une variété compacte à courbure strictement négative.

Pour appliquer la définition suivante au cas du flot géodésique discuté plus haut, penser que  $M = \Sigma_E$  est la couche d'énergie de dimension 3.

**Définition 3.2.** Un flot  $\phi_t, t \in \mathbb{R}$  généré par un champ de vecteurs  $v$  sur une variété différentiable compacte  $M$  est un **flot d'Anosov** si en tout point  $x \in M$ , l'espace tangent se décompose en

$$T_x M = E_0(x) \oplus E_u(x) \oplus E_s(x) \quad (3.1)$$

qui est une décomposition invariante par le flot, avec  $E_0(x) := \mathbb{R}v(x)$  (i.e. espace engendré par  $v(x)$ ), et il existe une métrique  $\|\cdot\|$  sur  $TM$ , un coefficient d'« instabilité »  $\lambda > 1$ ,  $C > 0$ , t.q.

$$\forall w \in E_u(x), \forall t \geq 0, \quad \|(D\phi_t)w\| \geq C\lambda^t \|w\| \quad (3.2)$$

$$\forall w \in E_s(x), \forall t \geq 0, \quad \|(D\phi_t)w\| \leq C\lambda^{-t} \|w\|$$

Autrement dit,  $E_0$  est la direction du flot appelée « **direction neutre** »,  $E_u$  est la direction vers des trajectoires voisines qui divergent dans le futur, appelée « **direction instable** » et  $E_s$  est la direction vers des trajectoires voisines qui convergent dans le futur (donc divergent dans le passé), « **direction stable** ». Voir figure 3.4. Eq. (3.2) signifie en gros que un petit écart à une trajectoire de référence sera amplifié exponentiellement avec le temps  $t$  comme

$$\Delta x(t) \simeq \lambda^t \Delta x(0) = e^{t/\tau} \Delta x(0) \quad (3.3)$$

avec le temps caractéristique  $\tau = 1/\log \lambda > 0$ .

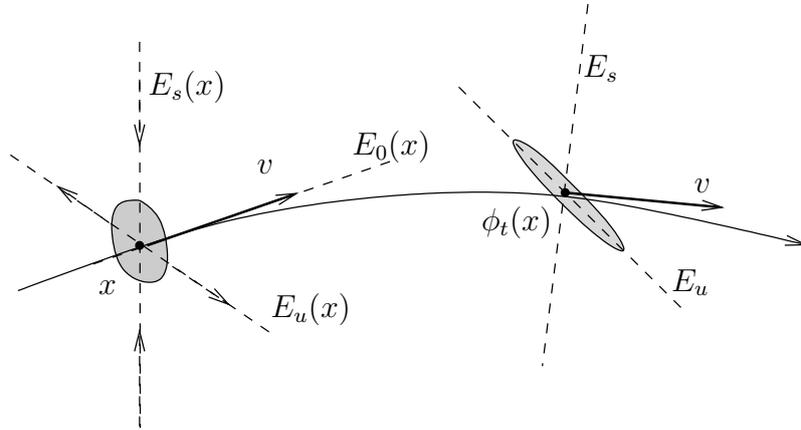


FIGURE 3.4 – Flot d'Anosov près d'une trajectoire quelconque. Une distribution de points (nuage gris) est étirée dans la direction transverse  $E_u$ , contractée dans la direction  $E_s$  et pas déformée dans la direction neutre du flot  $E_0$ .

**Théorème 3.3.** (Anosov 1967) *Le flot géodésique sur une variété à courbure sectionnelle  $< 0$  est Anosov. (Précisément il s'agit du flot sur la couche d'énergie  $\Sigma_E, E > 0$ ).*

Pour un billard dispersif nous avons vu que la couche d'énergie  $\Sigma_E$  est un orbifold avec le groupe  $\mathbb{Z}_2$ . D'après la remarque 3.1 on s'attend à ce que la résultat précédent soit aussi vrai pour un billard dispersif. La définition (3.1) a encore un sens sur  $T_x M / \mathbb{Z}_2$ . En fait dans le cas des orbifolds, on parle plutôt de flot « **pseudo Anosov** ».

**Théorème 3.4.** *La dynamique dans un billard dispersif à horizon fini est pseudo-Anosov.*

*Démonstration.* de Théorème 3.4. Remarquons que la dynamique dans un billard plan est une succession de propagations en ligne droite et de réflexions sur des obstacles. Concernant la propagation, voir figure 3.5(a), on considère une trajectoire de référence (c'est l'axe  $z$ ) et on note  $x$  l'axe orthogonal, qui sert de « section de Poincaré » : une trajectoire voisine coupe cet axe à la position  $x$  et avec un angle  $i$ . Après une longueur parcourue  $L$  donnée, et au premier ordre en  $x, i \ll 1$ , les nouvelles valeurs  $(x', i')$  sont

$$\begin{pmatrix} x' \\ i' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & L \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ i \end{pmatrix} + O((x, i)^2)$$

On considère maintenant la réflexion avec un angle d'incidence  $\alpha$  sur une paroi ayant un rayon de courbure  $R$  au point de réflexion, voir figure 3.5(b). Avec les mêmes définitions de  $(x, i)$  que précédemment, au point de réflexion, au premier ordre, on trouve que  $\begin{pmatrix} x' \\ i' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ A & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ i \end{pmatrix}$  avec  $A := \frac{2}{R \cos \alpha}$ . Par composition des deux résultats, pour une propagation de longueur  $L$  suivie d'une réflexion (comme sur la figure 3.1), on déduit que la matrice de passage est le produit

$$M_{R,\alpha,L} := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ A & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & L \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & L \\ A & LA + 1 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

Lors de l'évolution on a un produit de telles matrices mais avec des paramètres  $R, \alpha, L$  qui changent : on a des intervalles de variations possibles  $L_{\min} \leq L \leq L_{\max}$ ,  $R_{\min} \leq R \leq R_{\max}$ ,  $\alpha \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$  donc  $A_{\min} = \frac{2}{R_{\max}} \leq A \leq \infty$ . On a  $\det M_{R,\alpha,L} = 1$ ,  $\text{Tr} M_{R,\alpha,L} = 2 + LA \geq 2 + L_{\min} A_{\min} > 2$ . Par conséquent<sup>15</sup>,  $M_{R,\alpha,L}$  a deux valeurs propres réelles  $l, l^{-1}$  avec  $l > 1$  appelé **coefficient d'instabilité de Lyapounov**. On dit que  $M_{R,\alpha,L}$  est une **matrice hyperbolique**.

Pour un vecteur  $\begin{pmatrix} x \\ i \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$ , notons sa pente  $p = \frac{i}{x} \in \overline{\mathbb{R}} \equiv \mathbb{P}(\mathbb{R}^2)$  qui représente sa direction et notons  $p' = [M_{R,\alpha,L}](p) = \frac{A+(LA+1)p}{1+Lp}$  l'action de  $M_{R,\alpha,L}$  sur les directions. L'observation importante est que l'intervalle  $p \in [0, +\infty]$  est envoyé sur  $p' \in [A_{\min}, +\infty]$  et

---

15. Si  $M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$  est une matrice avec  $T = \text{Tr}(M) > 2$  et  $\text{Det}(M) = 1$  alors ses valeurs propres sont  $\lambda_{\pm} = \frac{1}{2}(T \pm \sqrt{T^2 - 4})$  vérifiant  $0 < \lambda_- = \lambda_+^{-1} < 1 < \lambda_+$ .

$\frac{d[M_{R,\alpha,L}](p)}{dp} = \frac{1}{(1+Lp)^2} < 1$ , autrement dit cet intervalle est strictement contracté, voir figure 3.5(c).

Considérons maintenant une suite de points  $x_k = (x_k, y_k, \theta_k) \in M, k \in \mathbb{Z}$ , sur une même trajectoire, telle que  $x_{k+1} = \phi_{t_k}(x_k)$  soit une propagation suivit d'une réflexion comme précédemment. Alors la direction instable  $E_u(x_0) \subset T_{x_0}M$  au point  $x_0$  est donnée par l'opération suivante. Tout d'abord  $E_u(x_0)$  est orthogonale à la direction de propagation  $E_0(x_0)$ , et en confondant  $E_u(x_0)$  avec la pente  $p$  dans le plan  $(x, i)$  précédent, en utilisant la trajectoire dans le passé, on a

$$E_u(x_0) = \lim_{N \rightarrow +\infty} (M_{R,\alpha,L}(x_{-1}) \cdot (M_{R,\alpha,L}(x_{-2}) \dots (M_{R,\alpha,L}(x_{-N}) p_0 \quad (3.5)$$

où  $p_0 \in (0, +\infty)$  est une direction initiale quelconque. Du fait de la contraction stricte, la convergence est exponentielle. De même, en utilisant les points  $x_k$  futurs on obtient

$$E_s(x_0) = \lim_{N \rightarrow +\infty} (M_{R,\alpha,L}^{-1}(x_1) \cdot (M_{R,\alpha,L}^{-1}(x_2) \dots (M_{R,\alpha,L}^{-1}(x_N) p_0 \quad (3.6)$$

partant d'une direction initiale  $p_0 \in (-\infty, 0)$  quelconque. De plus on a l'estimation  $\lambda^L \geq \frac{1}{2}l_{\min} \geq 1 + \frac{1}{2}L_{\min}A_{\min}$  soit  $\lambda \geq (1 + \frac{1}{2}L_{\min}A_{\min})^{1/L_{\max}} > 1$ .  $\square$

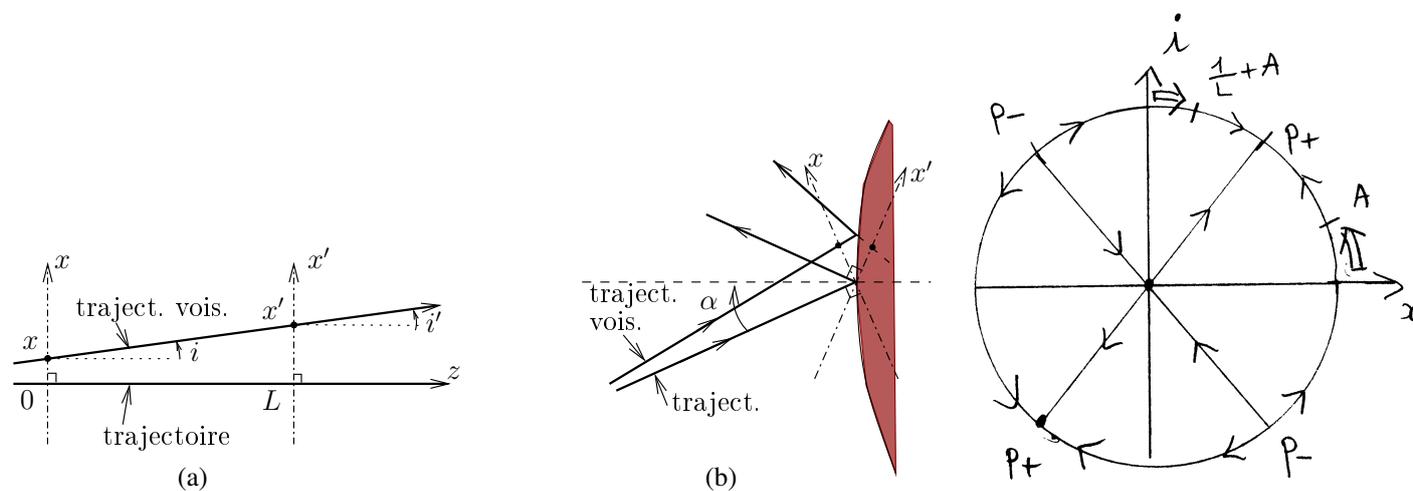


FIGURE 3.5 – (a) Section de Poincaré pour une propagation et (b) pour un rebond sur une paroi de rayon  $R$ . Une trajectoire voisine est repérée par la position  $x$  transverse et l'angle  $i$ . (c) dynamique de  $p' = [M_{R,\alpha,L}](p)$  sur les directions  $p = i/x \in \mathbb{P}(\mathbb{R}^2)$ .

Remarque : des expressions (3.5) et (3.6) on peut déduire que  $x_0 \rightarrow E_{u,s}(x_0)$  sont des fonctions continues mais « fractales » (pas  $C^2$  en aucun point), tout comme la fonction de Weierstrass[Fal97, Fal03].

## Principe d'incertitude et instabilités

Reprenons la discussion qualitative (et physique) liée au principe d'incertitude (2.28). Considérons un « objet quantique » dans un billard dispersif (e.g. une boule de loto qui rebondit dans la machine). Si  $m \simeq 10\text{g}$ , alors  $\Delta x \Delta v = \hbar/m \simeq 10^{-36}\text{m}^2/\text{s}$  est très petit. Un compromis pour minimiser chaque terme du produit est  $\Delta x \simeq 10^{-18}\text{m}$  et  $\Delta v \simeq 10^{-18}\text{m}/\text{s}$ . Pour simplifier supposons une amplification exponentielle des incertitudes avec le temps, comme (3.3), par le facteur  $\Delta x(t) \simeq 10^{t/\tau} \Delta x(0)$  avec un temps caractéristique  $\tau \sim 1\text{s}$ . Alors la taille de l'incertitude quantique devient  $\Delta x(t) \simeq 1\text{m}$  après  $t \simeq 1\text{s}$  seulement! Cela montre que pour les phénomènes chaotiques, le « hasard quantique » a une influence à notre échelle<sup>16</sup>.

## 3.2 Un flot géodésique Anosov est mélangeant (et ergodique)

On a vu l'instabilité des trajectoires qui s'exprime par des matrices hyperboliques comme (3.4). Il faut aussi noter que la couche d'énergie  $\Sigma_E$  est compacte. La dynamique a donc pour effet d'« étirer » et « replier » les données initiales. Cette succession de processus est le plus efficace pour mélanger les données initiales comme le ferait un boulanger pour mélanger le beurre dans une pâte feuilletée. Avec ce mélange, tout ensemble de données initiales (suffisamment lisse) va s'équidistribuer et converger (au sens des distributions) vers une mesure d'équilibre. C'est cette propriété appelée « mélange » qui exprime le mieux les propriétés chaotiques de la dynamique comme le montre le théorème suivant et la figure 3.6.

**Théorème 3.5.** « Anosov » *Un flot géodésique Anosov est **mélangeant** :  $\forall u, v \in C^\infty(M)$ , pour  $t \rightarrow \infty$  on a*

$$\left| \int_M v \cdot (u \circ \phi_{-t}) dx - \int v dx \cdot \int u dx \right| \rightarrow 0 \quad (3.7)$$

*Cela implique la propriété d'**ergodicité** :  $\forall u, v \in C^\infty(M)$ ,*

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \left( \int_M v \cdot (u \circ \phi_{-t}) dx \right) dt = \int_M v dx \cdot \int_M u dx \quad (3.8)$$

La preuve du mélange est ancienne (Anosov 1967 [Ano67]). Sinai l'a montré pour les billards dispersifs. La preuve du mélange à taux exponentielle est récente [Dol98, Liv04, Tsu10]. En prenant la moyenne temporelle de la propriété de mélange (3.7) on déduit l'ergodicité (3.8) (avec le théorème de Cesàro).

<sup>16</sup>. Cependant l'onde quantique n'apparaît pas à notre échelle, car la décohérence (processus de mesure avec l'environnement) intervient bien avant.

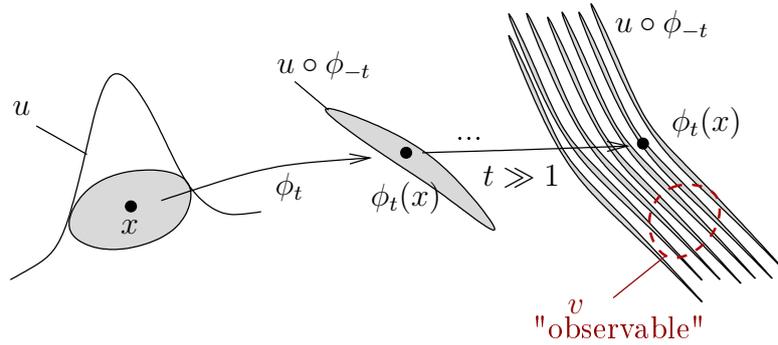


Figure 3.6: Mélange et fonction de corrélation  $C_{v,u}(t) = \int_M v \cdot (u \circ \phi_{-t}) dx$ .

Remarque 3.6. :

— Le terme

$$C_{v,u}(t) := \int_M v \cdot (u \circ \phi_{-t}) dx = \langle v | \mathcal{L}^t u \rangle_{L^2(M)}$$

dans (3.7) s'appelle **fonction de corrélation**. C'est simplement un « élément de matrice » de l'opérateur d'évolution  $\mathcal{L}^t$  qui correspond à la fonction  $u$  évoluée par le flot :  $\mathcal{L}^t u = u \circ \phi_{-t}$  et testée sur une autre fonction (observable)  $v$ . (Dans certains ouvrages, on appelle fonction de corrélation toute l'expression  $\int_M v \cdot (u \circ \phi_{-t}) dx - \int v dx \cdot \int u dx$ .)

— La propriété de « mélange » (3.7) signifie « perte d'information » car  $t \rightarrow \infty$ ,  $u \circ \phi_{-t}$  normalisé par  $(\int u dx)^{-1}$  converge (au sens des distributions) vers la mesure  $dx$ . L'ergodicité signifie que « la moyenne temporelle » de  $u$  i.e  $\frac{1}{T} \int_0^T u \circ \phi_{-t} dt$  normalisée par  $(\int u dx)^{-1}$  converge (au sens des distributions) vers la mesure  $dx$ . On dit que  $dx$  est la **mesure d'équilibre**.

— Comparer la définition de « ergodique » (3.8) à « uniquement ergodique » (2.9) : dans (2.9) on peut fixer n'importe quelle condition initiale  $x_0$  (cela revient à prendre une distribution de Dirac  $v = \delta_{x_0}$  dans (3.8)). L'unique ergodicité implique l'ergodicité.

$$\text{mélange} \Rightarrow \text{ergodique} \Leftarrow \text{uniquement ergodique}$$

— On a vu que la propriété de mélange n'est pas vraie pour les translations irrationnelles sur le tore.

— L'unique ergodicité n'est pas vraie pour les flots géodésiques Anosov, car il y a des orbites périodiques.

### 3.3 Modèle simple du « cat map » qui est mélangeant (et ergodique)

Le modèle simplifié suivant consiste à étudier la dynamique définie par une unique matrice hyperbolique et agissant sur le tore (qui est compact) afin d'avoir les processus « étirement » et « repliement » évoqués plus haut. Considérons la matrice

$$M = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

qui est « hyperbolique » car ses valeurs propres sont de module différent de 1 :

$$\lambda = \lambda_u = \frac{3 + \sqrt{5}}{2} \simeq 2.6 > 1, \quad \lambda_s = \lambda^{-1} < 1.$$

Les directions propres associées sont  $E_u, E_s$  introduites en (3.1).

La matrice  $M$  définit une dynamique sur  $\mathbb{R}^2$  par  $x \rightarrow Mx$ . Elle définit<sup>17</sup> aussi une dynamique sur le tore  $\mathbb{T}^2 = (\mathbb{R}/\mathbb{Z})^2$  :

$$f : \begin{cases} \mathbb{T}^2 := \mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2 & \rightarrow \mathbb{T}^2 \\ x & \rightarrow Mx \pmod{\mathbb{Z}^2} \end{cases} \quad (3.10)$$

Voir figure 3.7.

Le théorème suivant montre que la dynamique du « cat map » (3.10) est très chaotique :

**Théorème 3.7.** *Le « cat map »  $f : \mathbb{T}^2 \rightarrow \mathbb{T}^2$  est **mélangeant à taux super-exponentielle** :  $\forall \alpha > 0, \forall u, v \in C^\infty(M), \exists C > 0$ , pour  $n \rightarrow +\infty$ ,*

$$\left| \int_{\mathbb{T}^2} v \cdot (u \circ f^{-n}) dx - \int v dx \int u dx \right| \leq C e^{-\alpha n} \quad (3.11)$$

*Démonstration.* Soit  $\alpha > 0$  et  $k, l \in \mathbb{Z}^2$ . Soit  $\varphi_k(x) := \exp(i2\pi k \cdot x)$  un **mode de Fourier**. Alors

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{T}^2} \overline{\varphi_l} \cdot (\varphi_k \circ f^{-n}) dx &= \int \exp(i2\pi (k \cdot M^{-n}x - l \cdot x)) dx \\ &= \int \exp(i2\pi ({}^t M^{-n}k - l) \cdot x) dx = \delta_{M^{-n}k=l} \end{aligned} \quad (3.12)$$

17. Du fait que la matrice  $M$  est à coefficient entiers, l'application  $f$  est bien défini : car si  $n \in \mathbb{Z}^2$ ,  $x \in \mathbb{R}^2$  alors

$$M(x+n) = Mx + \underbrace{Mn}_{\in \mathbb{Z}^2} = Mx \pmod{\mathbb{Z}^2}$$

De plus le fait que  $\det(M) \neq 0$ , cela implique que  $f$  est inversible sur  $\mathbb{T}^2$  et  $f^{-1}(x) = M^{-1}x$  avec  $M^{-1} \in SL_2(\mathbb{Z})$ .

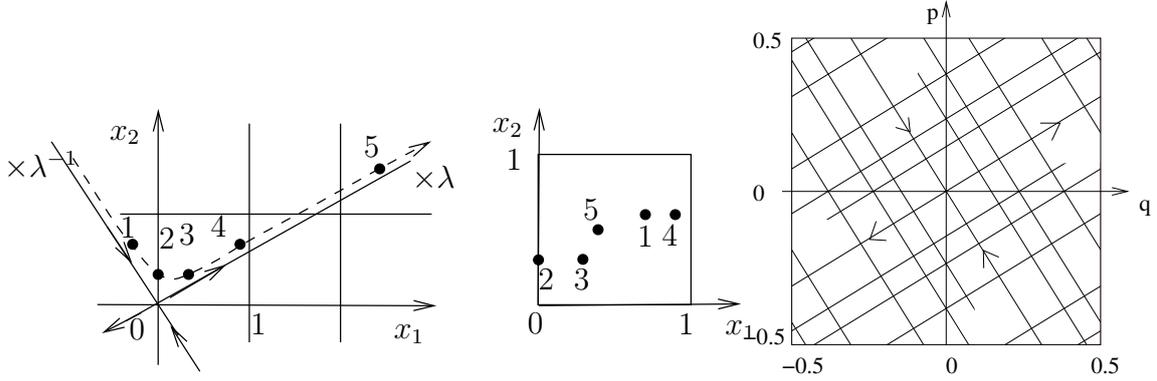


FIGURE 3.7 – (a) Trajectoire du point initial  $(-0.3, 0.6)$  sous l'application  $f$  du « cat map », sur  $\mathbb{R}^2$  (la trajectoire est sur une hyperbole) et sur  $\mathbb{T}^2$ . Après la restriction modulo 1, presque toute trajectoire semble imprévisible, « chaotique ». (b) : directions stables  $E_s$  et instables  $E_u$ .

Si  $k \neq 0$  alors  $|{}^t M^{-n}k| \rightarrow \infty$  lorsque  $n \rightarrow +\infty$  car  $M$  est hyperbolique. Donc (3.12) devient nul pour  $n$  assez grand. Finalement une fonction lisse  $u \in C^\infty(\mathbb{T}^2)$  a des coefficients de Fourier  $(u_k)_k$  qui décroissent très vite : si  $u = \sum_k u_k \varphi_k$  alors  $\forall N, \exists C_N \forall k, |u_k| \leq \frac{C_N}{(|k|+1)^N}$ . De même pour  $v \in C^\infty(\mathbb{T}^2)$ . En utilisant (3.12) on a

$$\int_M v \cdot (u \circ f^{-n}) dx = \sum_k \bar{v}_l u_k \delta_{{}^t M^{-n}k=l}$$

Or  $|{}^t M^{-n}k| \geq C\lambda^n$  croit exponentiellement donc avec  $l = {}^t M^{-n}k$  et  $k$  fixé on a  $|v_l| \leq \frac{C_N}{(|l|+1)^N} \leq \frac{C'_N}{\lambda^{nN}} = C'_N e^{-n(N \log \lambda)}$  pour tout  $N$ . On déduit (3.11). Le terme constant  $\int v dx \int u dx = v_0 u_0$  provient des composantes  $k = l = 0$  qui ne fuient pas à l'infini.  $\square$

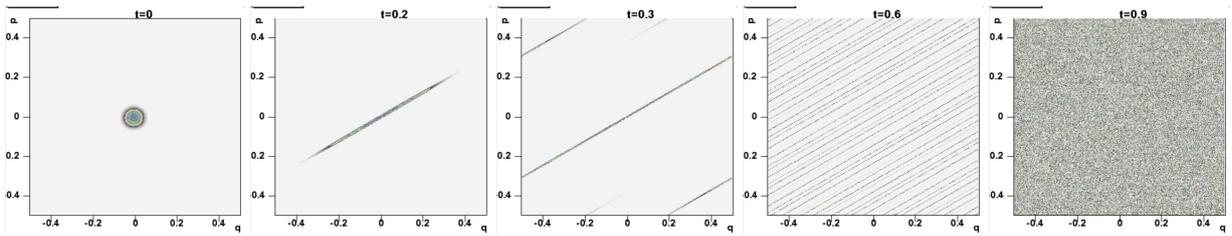


FIGURE 3.8 – « Mélange, chaos » dans le modèle du cat map classique : une distribution de points initialement concentrée près du point fixe instable  $(0, 0)$  évolue et converge vers la « distribution d'équilibre ».

*Démonstration.* Remarque : la preuve ci-dessus (son idée) s'adapte bien au cas des flots Anosov mais en utilisant une décomposition de Fourier locale sur la variété. Pour cela on utilise l'analyse semi-classique [FRS08, FS11].  $\square$

## 4 Chaos quantique

De façon un peu imprécise, un **modèle de chaos quantique** est une dynamique quantique définie par l'équation de Schrödinger (2.16) avec un Hamiltonien  $H$  tel que le flot classique  $\phi_t$  défini par les équation de mouvement de Hamilton (2.5) est « chaotique » sur la couche d'énergie  $\Sigma_E$ , au sens défini en Section 3 (c'est à dire flot ergodique ou même mélangeant).

Nous avons vu que le paradigme (i.e. modèle privilégié) de chaos classique Hamiltonien est le flot dans un billard dispersif ou le flot géodésique sur une variété à courbure négative. Dans ces cas, nous avons vu que le Hamiltonien classique est seulement l'énergie cinétique  $H(x, \xi) = \frac{1}{2} \|\xi\|_x^2$ . On a  $\text{Op}_\hbar(H) = -\frac{1}{2}\hbar^2\Delta$  donc l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\hbar^2 \frac{1}{2} \Delta \psi$$

- Dans le cas du flot géodésique sur une variété Riemannienne  $\mathcal{M}$ , le Laplacien est celui de Hodge :  $\Delta := -d^*d$  (ou  $d$  est la dérivée extérieure). L'espace de Hilbert est  $L^2(\mathcal{M}; \mathbb{C})$ .
- Dans le cas d'un billard la condition de réflexion sur le bord des obstacles se traduit par exemple par la condition que  $\psi(x) = 0$  pour tout point  $x$  sur le bord, appelée **condition de Dirichlet**.

Un autre modèle aussi très étudié en chaos quantique est le modèle du « **quantum cat map** » c'est à dire la version quantique de (3.10). Voir [BDB96][FND03].

Dans cette section, on mentionne seulement des résultats et conjectures concernant le chaos quantique sur ces différents modèles, avec illustration mais sans preuves détaillées.

### Deux questions mathématiques de base en chaos quantique

1. Question d'évolution : étant donné un état initial  $\psi_0$ , décrire son évolution au temps  $t$ ,  $\psi_t$ , solution de l'équation de Schrödinger. En particulier si  $\psi_0$  est un paquet d'onde « localisé » en  $(x_0, \xi_0)$  est-ce que  $\psi_t$  se délocalise et s'équidistribue comme le ferait une distribution classique de probabilité d'après la propriété de mélange (3.7) ?
2. Question sur les états stationnaires : on considère l'équation aux valeurs propres (2.21) :

$$\text{Op}_\hbar(H) \psi_j = E_j \psi_j \tag{4.1}$$

Décrire la répartition des valeurs propres<sup>18</sup>  $E_j \in \mathbb{R}$ . Est ce que les fonctions propres  $|\psi_j|^2$  sont équidistribuées ? on s'y attend en effet car on a vu après (2.22) que ce sont des distributions stationnaires et en mécanique classique, une distribution  $L^2$  stationnaire est forcément la mesure d'équilibre d'après la propriété d'ergodicité.

Ces deux questions sont en fait étroitement liées car on peut exprimer l'évolution d'un état  $\psi_t$  en le développant sur la base des états propres de  $\text{Op}_\hbar(H)$ .

---

18. Dans les cas considérés ici on montre que  $\text{Op}_\hbar(H)$  a un spectre discret de valeurs propres  $E_j \geq 0$ .

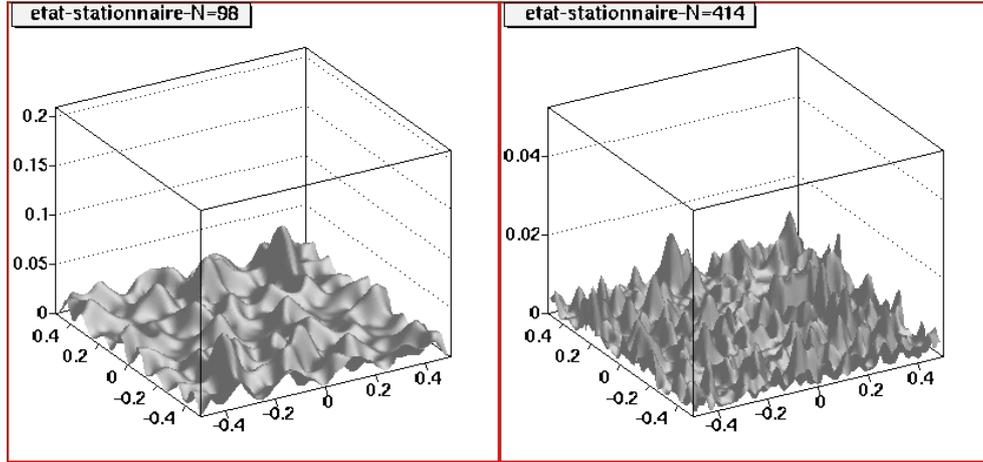


FIGURE 4.1 – Distribution de Husimi (4.3) d'états stationnaires du « quantum cat map ». On observe qu'ils semblent s'équidistribuer pour  $\hbar = 1/(2\pi N) \rightarrow 0$ . C'est cela qui est exprimé dans le « théorème d'ergodicité quantique ».

*Remarque 4.1.* Concernant les modèles de « **dynamique intégrable** » [Arn76] c'est à dire non chaotique et même très réguliers, il existe des techniques qui répondent assez bien à ces questions. Par exemple dans le cas du problème de Kepler (i.e. atome d'hydrogène) (2.6) ou de l'oscillateur harmonique (2.7), des techniques algébriques basées sur la théorie des groupes permet de trouver exactement les valeurs propres  $E_j$  et les états propres  $\psi_j$  (Cela est dû aux symétries particulières du problème).

Considérons maintenant ces questions en chaos quantique, les réponses connues et les conjectures en cours.

#### 4.1 Equidistribution des ondes stationnaires. Ergodicité quantique

L'ergodicité quantique concerne la question d'équidistribution des fonctions propres  $\psi_j$  mentionnée en (4).

Pour caractériser cela, on a vu que si  $a(x, \xi)$  est une fonction sur l'espace de phase (un symbole), on lui associe un opérateur  $\text{Op}_\hbar(a)$  appelé observable et qui justement « détecte » certaines propriétés des états quantiques  $\psi_j$  à travers les valeurs moyennes :

$$\langle \psi_j | \text{Op}_\hbar(a) \psi_j \rangle \in \mathbb{R}.$$

L'idée est que si  $\psi_j$  est équidistribué sur la couche d'énergie  $\Sigma_E$  alors la valeur de  $\langle \psi_j | \text{Op}_\hbar(a) \psi_j \rangle$  devrait être proche de la moyenne spatiale de  $a$  sur  $\Sigma_E$  qui est

$$\frac{1}{\text{Vol}(\Sigma_E)} \int_{\Sigma_E} a(x, \xi) d\mu_E$$

(ici  $d\mu_E$  est la mesure de Liouville sur  $\Sigma_E$ , définie par  $d\mu_E dE = dx d\xi$  et  $\text{Vol}(\Sigma_E) := \int_{\Sigma_E} d\mu_E$ ). Bien sûr d'après la correspondance semi-classique on s'attend à un tel résultat

seulement dans la limite  $\hbar \rightarrow 0$ . Un tel résultat n'est cependant pas connu (sauf dans des modèles très particuliers). Ce qui s'en approche est le théorème suivant qui porte sur une moyenne d'états stationnaires sur un petit intervalle d'énergie  $[E; E + \hbar^\alpha]$ .

**Théorème 4.2.** [Sch74, dV85, Zel87] « **Ergodicité quantique** » *Considérons une énergie  $E$  et supposons que le flot Hamiltonien de  $H$  est ergodique sur la couche d'énergie  $\Sigma_E$ . Pour toute observable  $a(x, \xi)$ , pour tout  $0 < \alpha < 1$ , on a*

$$\frac{1}{\mathcal{N}_\hbar} \sum_{j, E_j \in [E; E + \hbar^\alpha]} \left| \langle \psi_j | \text{Op}_\hbar(a) \psi_j \rangle - \frac{1}{\text{Vol}(\Sigma_E)} \int_{\Sigma_E} a(x, \xi) d\mu_E \right|^2 \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} 0 \quad (4.2)$$

avec la constante de normalisation  $\mathcal{N}_\hbar := \#\{j, E_j \in [E; E + \hbar^\alpha]\}$ .

*Remarque 4.3.*

- On peut interpréter le terme de gauche de (4.2) comme une « variance quantique ». C'est une moyenne de  $\mathcal{N}_\hbar$  termes positifs qui tend vers zéro pour  $\hbar \rightarrow 0$ , par conséquent la plupart des termes de la somme tendent vers 0 et on dit souvent que la « plupart des états stationnaires sont équidistribués dans la limite semi-classique ». Ce théorème n'exclue pas qu'il y ait des exceptions c'est à dire une suite d'états  $\psi_{j(\hbar)}$  telle que  $\exists \epsilon > 0, \exists$  observable  $a(x, \xi)$  t.q.  $|\langle \psi_j | \text{Op}_\hbar(a) \psi_j \rangle - \int a(x, \xi) d\mu_E| > \epsilon > 0$  pour tout  $\hbar$ . E. Heller appelle ces états des « **scars** » (cicatrices)
- En physique, il a été observé numériquement (et expérimentalement) de tels états stationnaires « scars » par E. Heller dans les années 90 dans certains « billards chaotiques » [GVZJ91]. Ces scars sont partiellement concentrés sur des trajectoires périodiques. Voir figure 4.2.
- En 1994 S. Rudnick et P. Sarnak ont conjecturé que pour une dynamique mélangeante, on a  $|\langle \psi_j | \text{Op}_\hbar(a) \psi_j \rangle - \frac{1}{\text{Vol}(\Sigma_E)} \int a(x, \xi) d\mu_E| \rightarrow 0$  pour  $\hbar \rightarrow 0$  pour toute suite d'états  $\psi_j$  telle que  $E_j \rightarrow E$ . On appelle cette propriété l'« **unique ergodicité quantique** » Q.U.E.. Elle a été démontrée récemment par E. Lindenstrauss dans des cas particuliers du flot géodésique sur des surfaces arithmétiques à courbure négative et pour le spectre conjoint de  $\text{Op}_\hbar(H)$  avec un opérateur arithmétique de Hecke (Voir [Ana14] exposé de N. Anantharaman pour plus de détails).
- Dans le cas de dynamique Anosov, l'existence de scars a été démontrée seulement dans le modèle particulier du « quantum cat map » [FND03]. C'est un contre exemple à la conjecture Q.U.E. Il a été cependant montré que les états stationnaires ne peuvent pas se concentrer totalement sur un nombre fini d'orbites périodiques [FN04]. Voir [Ana08, AN07] pour des résultats de portée générale en terme d'entropie. L'auteur de ce texte est plutôt sceptique concernant la conjecture Q.U.E., au vu de ce contre exemple (bien que particulier). Se pourrait-il que de tels contre exemples soit de mesure nulle parmi les modèles de systèmes dynamique mais cependant dense ?.

*Idée de preuve du théorème d'ergodicité quantique 4.2.* . (Voir exposé de N. Anantharaman [Ana14]). La fonction  $\tilde{a} = a - \int_{\Sigma_E} a(x, \xi) d\mu_E$  vérifie  $\int_{\Sigma_E} \tilde{a}(x, \xi) d\mu_E = 0$  et on la notera  $a$  pour simplifier. On veut montrer que la « variance quantique » tend vers 0 :

$$S_2(a) := \frac{1}{\mathcal{N}_h} \sum_{j, E_j \in [E; E+h^\alpha]} |\langle \psi_j | \text{Op}_h(a) \psi_j \rangle|^2 \xrightarrow{h \rightarrow 0} 0$$

On veut utiliser le fait que  $\psi_j$  est un état stationnaire. Considérons la « moyenne temporelle » de  $a$  :

$$\langle a \rangle_T := \frac{1}{T} \int_0^T a \circ \phi_{-t} dt$$

Alors pour tout  $T > 0$  fixé et  $\hbar \ll 1$ ,

$$\text{Op}_h(\langle a \rangle_T) = \frac{1}{T} \int_0^T \text{Op}_h(a \circ \phi_{-t}) dt \stackrel{\text{Egorov}, (2.34)}{=} \frac{1}{T} \int_0^T U(t) \text{Op}_h(a) U(-t) dt + O(\hbar)$$

Or  $\text{Op}_h(H) \psi_j = E_j \psi_j$  donc  $U(-t) \psi_j = e^{itE_j/\hbar} \psi_j$  et  $|\langle \psi_j | \text{Op}_h(a) \psi_j \rangle| = |\langle \psi_j | U(t) \text{Op}_h(a) U(-t) \psi_j \rangle|$ . Ainsi on peut écrire

$$|\langle \psi_j | \text{Op}_h(a) \psi_j \rangle| = |\langle \psi_j | \text{Op}_h(\langle a \rangle_T) \psi_j \rangle| + O(\hbar)$$

Ensuite

$$\begin{aligned} |\langle \psi_j | \text{Op}_h(\langle a \rangle_T) \psi_j \rangle|^2 &\stackrel{\text{Cauchy-Schwartz}}{\leq} \|\text{Op}_h(\langle a \rangle_T) \psi_j\|^2 = \langle \psi_j | (\text{Op}_h(\langle a \rangle_T))^2 \psi_j \rangle \\ &\stackrel{(2.30)}{=} \langle \psi_j | (\text{Op}_h(\langle a \rangle_T^2)) \psi_j \rangle + O(\hbar) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S_2(a) &= \frac{1}{\mathcal{N}_h} \sum_{j, E_j \in [E; E+h^\alpha]} \langle \psi_j | (\text{Op}_h(\langle a \rangle_T^2)) \psi_j \rangle + O(\hbar) \\ &= \frac{1}{\mathcal{N}_h} \text{Tr}(\chi(\text{Op}_h(H)) (\text{Op}_h(\langle a \rangle_T^2))) + O(\hbar) \\ &\stackrel{(4.4), (2.32)}{=} \frac{1}{\text{Vol}(\Sigma_E)} \int_{\Sigma_E} \langle a \rangle_T^2(x, \xi) d\mu_E + O(\hbar) \end{aligned}$$

avec une fonction  $\chi$  caractéristique de l'intervalle  $[E; E + h^\alpha]$  (en fait une suite de fonctions  $C^\infty$  qui l'approche). Finalement on montre que l'ergodicité implique que  $\int_{\Sigma_E} \langle a \rangle_T^2(x, \xi) d\mu_E \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 0$ . Cela permet de conclure, en prenant  $T$  assez grand puis  $\hbar \rightarrow 0$ .  $\square$

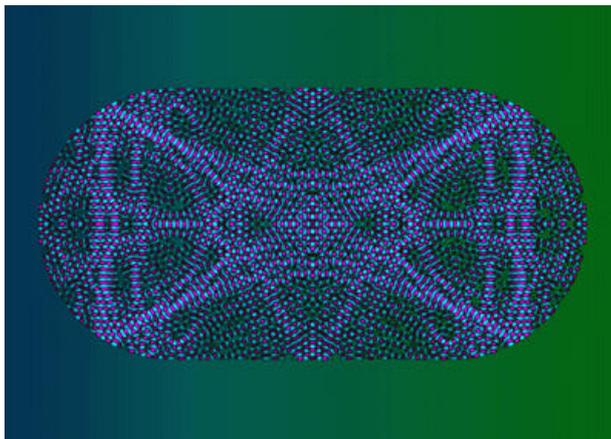


FIGURE 4.2 – « Scars » dans le billard du stade. Elles sont localisées sur des orbites périodiques.

### Distribution de Husimi sur l'espace des phases

Pour détecter la présence d'un état quantique au point  $(x_0, \xi_0) \in \mathbb{R}^{2d}$  de l'espace des phases, « le plus précis » est de considérer le paquet d'onde  $\psi_{x_0, \xi_0}$  défini en (2.27) et d'associer l'observable  $a_{x_0, \xi_0} := |\psi_{x_0, \xi_0}\rangle\langle\psi_{x_0, \xi_0}|$  qui est le projecteur orthogonal de rang 1 sur cet état. Alors

$$\text{Hus}_{\psi_j}(x_0, \xi_0) := \langle\psi_j|\text{Op}_{\hbar}(a_{x_0, \xi_0})\psi_j\rangle = |\langle\psi_{x_0, \xi_0}|\psi_j\rangle|^2 \quad (4.3)$$

est une distribution positive de probabilité<sup>19</sup> sur l'espace des phases associée à l'état  $\psi_j$  appelée **distribution de Husimi** de l'état  $\psi_j$ . Le problème mathématique est que l'opérateur ainsi défini n'est pas un opérateur pseudo-différentiel (son symbole est trop singulier), par conséquent les théorèmes d'Egorov etc ne sont pas valables. Néanmoins la distribution de Husimi est très utile et renseigne précisément sur l'état. (On retrouve la transformée de Husimi en théorie du signal sous le nom « **transformée par ondelettes** »).

## 4.2 Distribution des valeurs propres

On s'intéresse maintenant aux valeurs propres  $(E_j)_j$  de (4.1) des opérateurs  $\text{Op}_{\hbar}(H)$  dans la limite  $\hbar \rightarrow 0$ . Les résultats suivants décrivent ces spectres à des échelles  $\Delta E$  de plus en plus fines. Pour cela il faut comprendre la dynamique quantique sur des échelles de temps  $\Delta t$  de plus en plus longues, d'après  $\Delta E \Delta t \simeq \hbar$ . Voir figure 4.4.

19. Il existe une formule de reconstruction d'un vecteur  $\psi$  quelconque comme superposition de paquets d'ondes  $\psi_{x_0, \xi_0}$  :

$$\psi = \int_{\mathbb{R}^{2d}} \langle\psi_{x_0, \xi_0}|\psi\rangle \psi_{x_0, \xi_0} \frac{dx_0 d\xi_0}{(2\pi\hbar)^d}$$

Ainsi une valeur importante de  $\text{Hus}_{\psi}(x_0, \xi_0) = |\langle\psi_{x_0, \xi_0}|\psi\rangle|^2$  signifie que l'état  $\psi$  a une forte composante sur le paquet d'onde  $\psi_{x_0, \xi_0}$ .

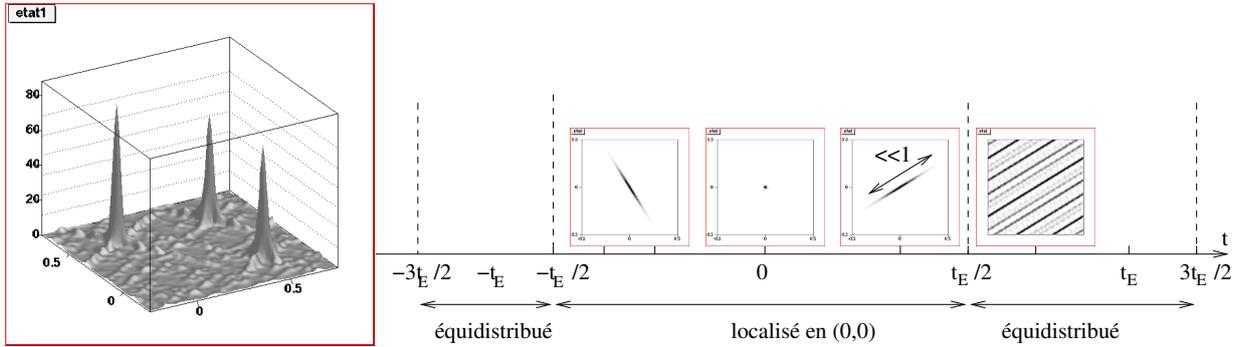


FIGURE 4.3 – Ce sont des phénomènes très particuliers, et « contre-intuitifs ». (a) « Scars » dans le modèle du « quantum cat map ». Elles sont localisées sur des orbites périodiques (ici période 3). (b) Un paquet d’onde évolue, s’étire selon la direction  $E_u$  et s’équidistribue (et de même dans le passé). Mais curieusement il y a une période exacte  $T = 2t_E$  après laquelle il redevient identique à lui même, avec  $t_E \simeq \log(1/\hbar) / \log \lambda$  appelé **temps d’Ehrenfest**.

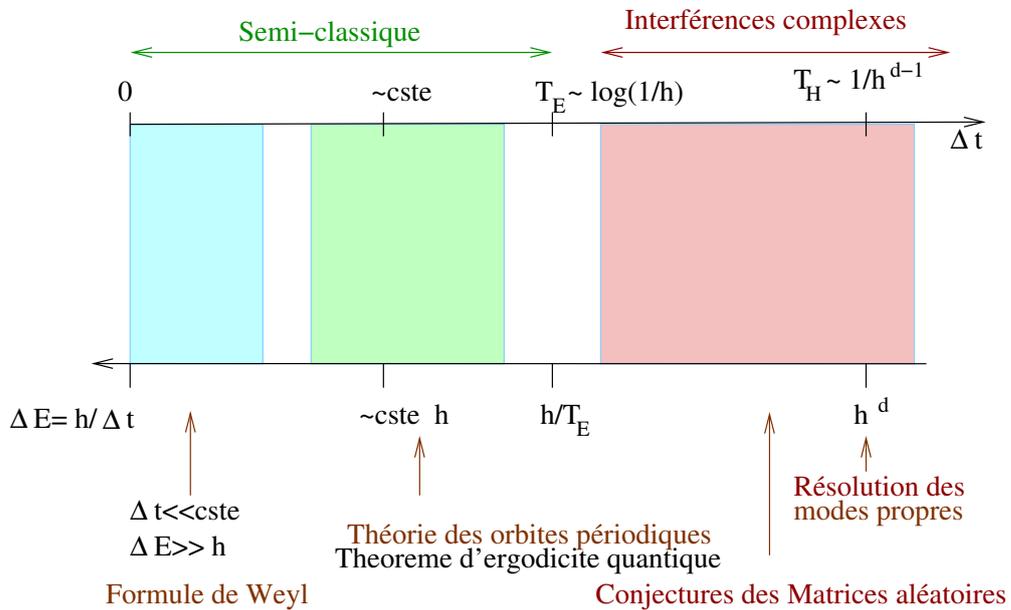


FIGURE 4.4 – Échelles de temps-énergie typiques en chaos quantique, d’après la relation  $\Delta E \Delta t \simeq \hbar$ . ( $t_E \simeq \log(1/\hbar) / \log \lambda$  est le temps d’Ehrenfest)

## Loi de Weyl

Elle décrit le spectre de  $\text{Op}_{\hbar}(H)$  à l'échelle  $\Delta E \gg \hbar$  et montre que le nombre de valeurs propres dans un intervalle d'énergie est le volume de l'espace de phase correspondant  $\times \frac{1}{(2\pi\hbar)^n}$ . Il n'y a pas d'hypothèse sur la dynamique classique (chaotique ou pas).

**Théorème 4.4.** [Zwo12b] « *Loi de Weyl* ». Pour tout  $\delta > 0$  et  $\hbar \rightarrow 0$ ,

$$\#\{j, E_j \in [E; E + \delta]\} = \frac{\delta}{(2\pi\hbar)^d} (\text{Vol}(\Sigma_E) + O(1)), \quad \text{Vol}(\Sigma_E) := \int_{\Sigma_E} d\mu_E \quad (4.4)$$

*Démonstration.* (idée de preuve). On considère une suite de fonctions  $\chi_\epsilon : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  qui tendent vers la fonction caractéristique de l'intervalle  $[E, E + \delta]$  pour  $\epsilon \rightarrow 0$ .

$$\text{Tr}(\chi_\epsilon(\text{Op}_{\hbar}(H))) \stackrel{(2.32)}{=} \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int \chi_\epsilon(H(x, \xi)) dx d\xi = \frac{\delta}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\Sigma_E} d\mu_E$$

et cela donne (4.4) dans la limite  $\epsilon \rightarrow 0$ . □

Remarque sur l'heuristique de la loi de Weyl. D'après le principe d'incertitude, un état quantique occupe le volume  $(\Delta x \Delta \xi)^n \simeq \hbar^n$  (un quantum). Ainsi (4.4) compte le nombre de quanta dans la zone d'espace des phases  $H^{-1}([E; E + \delta])$ .

En physique cette loi a de nombreuses applications. Elle permet de déterminer le rayon des étoiles à neutron ou naines blanches<sup>20</sup> en fonction de leur masse par exemple!

## Formule des traces de Gutzwiller

Elle décrit les fluctuations de densité dans le spectre de  $\text{Op}_{\hbar}(H)$  à l'échelle  $\Delta E \simeq C\hbar$  en terme des orbites périodiques du flot. Il n'y a pas d'hypothèse que la dynamique classique soit chaotique ou pas.[Gut91]

## Conjecture des matrices aléatoires

On suppose maintenant un système générique<sup>21</sup> dont la dynamique classique est chaotique (mélangeante). Cette conjecture décrit le spectre de  $\text{Op}_{\hbar}(H)$  à l'échelle  $\Delta E \ll \hbar / \log(\hbar)$ . La loi de Weyl (4.4) nous dit que la densité de valeurs propres (i.e. le nombre par intervalle d'énergie) est  $\rho := \frac{\text{Vol}(\Sigma_E)}{(2\pi\hbar)^n}$ . On considère les valeurs propres recentrées et renormalisées  $\tilde{E}_j := \rho \cdot (E_j - E)$ .

20. Le calcul est simple. Par exemple dans  $5.10^9$  d'années, le soleil se contractera en « naine blanche » composée d'un plasma de carbone et d'oxygène se refroidissant vers une « naine noire ». La formule de Weyl prédit un rayon de l'ordre de  $R \simeq 3000\text{km}$  (celui de la Terre).

21. On connaît des modèles de chaos quantique très particuliers qui ne vérifient pas cette conjecture : le flot géodésique sur une surface arithmétique, ou le « cat map » dans le cas de période courtes [FND03].

**Conjecture 4.5. des matrices aléatoires** (*O. Bohigas et al. 1984[BGS84]*). *Loi d'universalité* ». A l'échelle  $\Delta E \ll \hbar/\log(\hbar)$ , les valeurs propres renormalisées  $\tilde{E}_j$  ont les mêmes distributions statistiques que celles d'une matrice aléatoire (voir ci-dessous) donc indépendantes du système.

Les « **matrices aléatoires de l'ensemble G.O.E** » est l'ensemble des matrices symétriques réelles  $M = (M_{i,j})_{i,j=1 \rightarrow N}$  avec la loi de probabilité Gaussienne invariante par changement de bases orthogonales

$$dP(M) = \frac{1}{Z} \exp(-\text{Tr}(M^2)) d\mu(M)$$

avec  $d\mu(M) = (\prod_{i < j} dM_{i,j}) (\prod_i dM_{i,i})$  et  $\text{Tr}(M^2) = \sum_i M_{i,i}^2 + 2 \sum_{i < j} M_{i,j}^2$ .

Comme exemple de propriété statistique, considérons l'écart  $s \geq 0$  entre deux valeurs propres consécutives de  $M$ . On note  $P(s)$  la densité de probabilité induite sur la variable  $s$  par la loi  $dP(M)$ . Pour des matrices de grande taille Wigner a montré que

$$P(s) \simeq \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4} s^2\right) \quad (4.5)$$

Le facteur  $s$  qui apparait dans (4.5) exprime une « **répulsion des niveaux** »<sup>22</sup> car un petit écart  $s \ll 1$  est peu probable. Les calculs numériques montrent que la distribution des écarts  $s_j = \tilde{E}_{j+1} - \tilde{E}_j$  d'un système de chaos quantique vérifie aussi cette loi (figure 4.5).

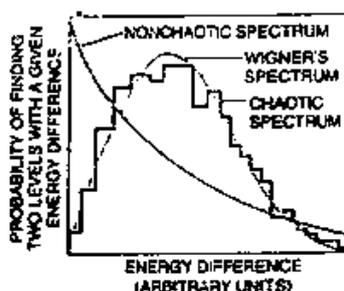


FIGURE 4.5 – Distributions des écarts de valeurs propres  $(\tilde{E}_{j+1} - \tilde{E}_j)_j$  et formule de Wigner des matrices aléatoires.

22. Explication heuristique de la répulsion de niveaux : pour une matrice  $2 \times 2$ ,  $H = \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix}$ , l'écart des valeurs propres est  $s = \sqrt{(a-b)^2 + c^2}$  donc  $s = 0$  est « peu probable » car nécessite les conditions  $a = b$  et  $c = 0$ . Plus précisément, si  $x = a - b$ ,  $y = c$  alors la mesure  $dx dy$  induit la mesure  $s ds$ . Pour des matrices Hermitiennes on obtient  $s^2 ds$ .

### 4.3 Conclusion

Grâce à l'analyse semi-classique, on peut étudier un problème ondulatoire dans le régime de petites longueurs d'ondes  $l \ll L$  devant la taille du système (par exemple l'évolution d'ondes quantiques, posant  $\hbar = l/L \ll 1$ ) en étudiant au préalable la dynamique classique associée qui est une dynamique de particules. Cette dynamique peut être chaotique c'est à dire manifester une forte sensibilité aux conditions initiales.

Dans ce cas, les propriétés de chaos classique ont une forte empreinte sur le comportement ondulatoire et rend celui ci très complexe (encore mal compris). Malgré tout, l'équation des ondes (ou équation de Schrödinger) est une équation linéaire, et en "chaos ondulatoire", la sensibilité aux conditions initiales s'arrête à l'échelle  $l$ . De façon équivalente, le régime semi-classique i.e. intervalle de temps pour lequel la correspondance classique-quantique est valable est  $t < T_E$  avec  $T_E = \log(1/\hbar) / \log \lambda$  étant le temps d'Ehrenfest. Au delà, il faut utiliser l'heuristique des matrices aléatoires encore sous forme conjecturale.

Les problématiques du « chaos quantique » sont très présentes en physique où il y a des phénomènes ondulatoires (l'étude a commencé en physique nucléaire) et en mathématique : cela concerne tous les modèles mathématiques issus de la physique ondulatoire, mais aussi la théorie de représentation des groupes et même l'arithmétique où une manifestation encore très conjecturale et fascinante serait les statistiques dans la répartition des nombres premiers et l'Hypothèse de Riemann (cf [Gra02]).

# Index

- analyse micro locale, 13
- analyse semi classique, 13
- Anosov, 25
  
- cat map, 30
- chaos quantique, 32
- coefficient d'instabilité de Lyapounov, 26
- connexion de Levi-Civita, 9
- constante de Planck, 12
- couche d'énergie, 23
- crochet de Poisson, 11
  
- direction instable, 25
- direction neutre, 25
- direction stable, 25
- distribution de Husimi, 36
- dualité onde-corpuscule, 14
- dynamique intégrable, 33
- dérivée covariante, 9
  
- entropie, 22
- ergodicité, 28
- Ergodicité quantique, 34
- espace de Hilbert, 13
- espace de Schwartz, 17
- espace des phases, 4
  
- flot géodésique, 9
- fonction d'onde, 12
- force, 3
- force potentielle, 3
  
- géodésique, 9
  
- Hamiltonien, 4
  
- impulsion, 4
  
- Le problème à deux corps, 4
- limite semiclassique, 19
- Loi de Newton, 3
- Loi de Weyl, 38
  
- matrice hyperbolique, 26
- mesure d'équilibre, 29
- mode de Fourier, 7, 30
- mécanique classique, 3
- mécanique quantique, 12
- mélangeant, 28
- mélangeant à taux super-exponentielle, 30
  
- observables, 14
- opérateur de Liouville, 11
- opérateur Hamiltonien, 12
- opérateur impulsion, 12
- opérateur pseudo-différentiel, 18
- oscillateur harmonique, 6
  
- paquet d'onde Gaussien, 17
- position d'une particule, 3
- principe d'incertitude, 17
- principe d'équivalence, 5
- principe de correspondance, 12
- principe de la mesure, 14
- pseudo Anosov, 26
  
- quantum cat map, 32
- quantum d'action, 17
  
- relativité générale, 3
- relativité restreinte, 3
- répulsion des niveaux, 39
  
- scars, 34
- symbole, 17
- systèmes intégrables, 4
  
- temps d'Ehrenfest, 37
- temps d'Erhenfest, 20
- théorème d'Egorov, 19
- trajectoire de la particule, 3
- transformée de Fourier, 16
- transformée par ondelettes, 36
  
- unique ergodicité quantique, 34

uniquement ergodique, 7

ñ collapse de la fonction d'onde, 14

ñ réduction du paquet d'onde, 14

Équations de Hamilton, 4

énergie, 10, 14

énergie cinétique, 4

énergie potentielle, 4

équation de Schrödinger, 12

évolution effective, 22

## References

- [AN07] Nalini Anantharaman and Stéphane Nonnenmacher. Half-delocalization of eigenfunctions for the laplacian on an anosov manifold. *57(7):2465–2523*, 2007.
- [Ana08] Nalini Anantharaman. Entropy and the localization of eigenfunctions. *Ann. of Math*, 168(2):435–475, 2008.
- [Ana14] N. Anantharaman. Le théorème d’ergodicité quantique. 2014.
- [Ano67] D. Anosov. Geodesic flows on compact riemannian manifolds of negative curvature. *Proceedings of the Steklov Mathematical Institute*, 90:1:1–235, 1967.
- [Arn76] V.I. Arnold. *Les méthodes mathématiques de la mécanique classique*. Ed. Mir. Moscou, 1976.
- [Bal00] V. Baladi. *Positive transfer operators and decay of correlations*. Singapore: World Scientific, 2000.
- [BC89] B.H. Bransden and C.J. Joachain. *Introduction to quantum mechanics*. Longman, 1989.
- [BDB96] A Bouzouina and S De Bievre. Equipartition of the eigenfunctions of quantized ergodic maps on the torus. *Communications in mathematical physics*, 178(1):83–105, 1996.
- [BGS84] O. Bohigas, M. J. Giannoni, and C. Schmit. Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws. *Phys. Rev. Lett.*, 52(1):1–4, Jan 1984.
- [BPLB13] Roger Bach, Damian Pope, Sy-Hwang Liou, and Herman Batelaan. Controlled double-slit electron diffraction. *New Journal of Physics*, 15(3):033018, 2013.
- [BS02] M. Brin and G. Stuck. *Introduction to Dynamical Systems*. Cambridge University Press, 2002.
- [Dav07] E.B. Davies. *Linear operators and their spectra*. Cambridge University Press, 2007.
- [DD96] E.B. Davies and E.B. Davies. *Spectral theory and differential operators*, volume 42. Cambridge Univ Pr, 1996.
- [Dol98] D. Dolgopyat. On decay of correlations in Anosov flows. *Ann. of Math. (2)*, 147(2):357–390, 1998.
- [dV85] Y. Colin de Verdière. Ergodicité et fonctions propres du laplacien. (Ergodicity and eigenfunctions of the Laplacian). *Commun. Math. Phys.*, 102:497–502, 1985.
- [Fal97] K. Falconer. *Techniques in fractal geometry*. John Wiley & Sons Ltd., Chichester, 1997.
- [Fal03] K.J. Falconer. *Fractal geometry: mathematical foundations and applications*. John Wiley & Sons Inc, 2003.
- [Fer14] C. Fermanian. Le théorème d’egorov. 2014.

- [FN04] F. Faure and S. Nonnenmacher. On the maximal scarring for quantum cat map eigenstates. *Communications in Mathematical Physics*, 245:201–214, 2004.
- [FND03] F. Faure, S. Nonnenmacher, and S. DeBièvre. Scarred eigenstates for quantum cat maps of minimal periods. *Communications in Mathematical Physics*, 239:449–492, 2003.
- [FRS08] F. Faure, N. Roy, and J. Sjöstrand. A semiclassical approach for anosov diffeomorphisms and ruelle resonances. *Open Math. Journal. (arXiv:0802.1780)*, 1:35–81, 2008.
- [FS11] F. Faure and J. Sjöstrand. Upper bound on the density of ruelle resonances for anosov flows. a semiclassical approach. *Comm. in Math. Physics, Issue 2. (arXiv:1003.0513v1)*, 308:325–364, 2011.
- [Gra02] Andrew Granville. Nombres premiers et chaos quantique. *Gazette des Mathématiciens*, 97:29–44, 2002.
- [GS94] A. Grigis and J. Sjöstrand. *Microlocal analysis for differential operators*, volume 196 of *London Mathematical Society Lecture Note Series*. Cambridge University Press, Cambridge, 1994. An introduction.
- [Gut91] M. Gutzwiller. *Chaos in classical and quantum mechanics*. Springer-Verlag, 1991.
- [GVZJ91] M.J. Giannoni, A. Voros, and J. Zinn-Justin, editors. *Chaos and Quantum Physics*. Les Houches Session LII 1989 (Elsevier, Amsterdam), 1991.
- [HS96] P.D. Hislop and I.M. Sigal. *Introduction to Spectral Theory with Applications to Schrödinger Operators*. Springer, 1996.
- [JEA] Leys J., Ghys E., and Alvarez A. *Chaos. Videos*. <http://www.chaos-math.org/fr>.
- [KH95] A. Katok and B. Hasselblatt. *Introduction to the Modern Theory of Dynamical Systems*. Cambridge University Press, 1995.
- [Liv04] C. Liverani. On contact Anosov flows. *Ann. of Math. (2)*, 159(3):1275–1312, 2004.
- [Mar02] A. Martinez. *An Introduction to Semiclassical and Microlocal Analysis*. Universitext. New York, NY: Springer, 2002.
- [Non08] S. Nonnenmacher. Some open questions in ‘wave chaos’. *Nonlinearity*, 21(8):T113–T121, 2008.
- [RS72] M. Reed and B. Simon. *Mathematical methods in physics, vol I : Functional Analysis*. Academic press, New York, 1972.
- [RS78] M. Reed and B. Simon. *Mathematical methods in physics, vol IV : Analysis of operators*. Academic Press, 1978.
- [Sch74] A. Schnirelman. Ergodic properties of eigenfunctions. *Usp. Math. Nauk.*, 29:181–182, 1974.
- [SI00] Gustafson S. and Sigal I. *Mathematical concepts of quantum mechanics*. Springer, 2000.

- [Tay96a] M. Taylor. *Partial differential equations, Vol I*. Springer, 1996.
- [Tay96b] M. Taylor. *Partial differential equations, Vol II*. Springer, 1996.
- [Tsu10] M. Tsujii. Quasi-compactness of transfer operators for contact anosov flows. *Nonlinearity, arXiv:0806.0732v2 [math.DS]*, 23(7):1495–1545, 2010.
- [Zel87] S. Zelditch. Uniform distribution of the eigenfunctions on compact hyperbolic surfaces. *Duke Math. J*, 55:919–941, 1987.
- [Zwo12a] M. Zworski. *Semiclassical analysis*, volume 138. American Mathematical Soc., 2012.
- [Zwo12b] M. Zworski. *Semiclassical Analysis*. Graduate Studies in Mathematics Series. Amer Mathematical Society, 2012.