



# Journées mathématiques X-UPS

Année 2014

Chaos en mécanique quantique

Frédéric FAURE

**Introduction au chaos classique et au chaos quantique**

*Journées mathématiques X-UPS* (2014), p. 1-58.

<https://doi.org/10.5802/xups.2014-01>

© Les auteurs, 2014.



Cet article est mis à disposition selon les termes de la licence

LICENCE INTERNATIONALE D'ATTRIBUTION CREATIVE COMMONS BY 4.0.

<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>

Les Éditions de l'École polytechnique  
Route de Saclay  
F-91128 PALAISEAU CEDEX  
<https://www.editions.polytechnique.fr>

Centre de mathématiques Laurent Schwartz  
CMLS, École polytechnique, CNRS,  
Institut polytechnique de Paris  
F-91128 PALAISEAU CEDEX  
<https://portail.polytechnique.edu/cmls/>



Publication membre du

Centre Mersenne pour l'édition scientifique ouverte

[www.centre-mersenne.org](http://www.centre-mersenne.org)

## INTRODUCTION AU CHAOS CLASSIQUE ET AU CHAOS QUANTIQUE

*par*

Frédéric Faure

---

**Résumé.** 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 « application du chat d’Arnold ».

La problématique du chaos quantique est d’étudier la dynamique des ondes quantiques dans un système dont la dynamique classique associée est chaotique comme décrite plus haut. 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. 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.

### Table des matières

Introduction.....	2
1. Mécanique classique et mécanique quantique.....	4
1.1. Mécanique classique.....	4
1.2. Mécanique quantique.....	16
2. Chaos en mécanique classique.....	29
2.1. Billard dispersif de Sinai et instabilité d’Anosov . .	29
2.2. Un flot géodésique Anosov est mélangeant (et ergo- dique).....	38

2.3. Modèle simple du <i>cat map</i> qui est mélangeant (et ergodique).....	40
3. Chaos quantique.....	42
3.1. Représentation d'un état quantique sur l'espace des phases.....	43
3.2. Deux questions mathématiques de base en chaos quantique.....	44
3.3. Équidistribution des ondes stationnaires. Ergodicité quantique.....	46
3.4. Distribution des valeurs propres.....	50
3.5. Conclusion.....	54
Références.....	54
Index.....	57

## Introduction

La théorie de la mécanique quantique a été découverte par Heisenberg, Schrödinger et d'autres au début du  $xx^e$  siècle. Elle décrit la matière par des *ondes de matière* qui évoluent selon l'*équation de Schrödinger*. Ces ondes ont une signification probabiliste en physique. Auparavant, 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. Dans la partie 1 nous proposons une brève introduction aux idées et au formalisme de la *mécanique classique* et de la *mécanique quantique*. Nous expliquerons 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. Nous présenterons des exemples simples de dynamique qui serviront dans les textes suivants de ce volume, 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.

Dans la partie 2, nous présentons la problématique du chaos déterministe et l'approche mathématique pour l'aborder. Depuis les travaux d'Henri Poincaré (1892) et ensuite Birkhoff, puis 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*. Nous présenterons un modèle assez concret de dynamique chaotique que sont les *billards dispersifs*. Nous établirons les propriétés mathématiques du chaos (mélange et ergodicité) sur un modèle similaire mais plus simple, appelé *application du chat d'Arnold*.

Finalement la partie 3 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 décrit précédemment. Plus précisément on souhaite comprendre l'évolution des ondes mais aussi la structure et la répartition spatiale des ondes stationnaires. Nous poserons ces questions en montrant quelques exemples numériques intrigants qui serviront à introduire les textes suivants de ce volume. Par exemple le *théorème d'ergodicité quantique* (1974) établit que, lorsque la dynamique classique est ergodique, 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 (c'est-à-dire 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.

*Quelques articles de présentation du sujet*

- Sur les systèmes dynamiques : [BS02, KH95, Bal00, Cou12].
  - Sur l'analyse semi-classique : [Tay11b, Zwo12, Mar02, GS94].
- Le texte de Clotilde Fermanian Kammerer (ce volume, [FK14]) présente et discute en détails la quantification de Weyl et le théorème d'Egorov.
- Sur le chaos quantique : [Gut90] [Non08]. Le texte de Nalini Anantharaman (ce volume, [Ana14]) présente et discute en détail le théorème d'ergodicité quantique.
  - Des simulations numériques peuvent être observées sur [Fau]. Des programmes avec explications des modèles peuvent être téléchargés.

## 1. Mécanique classique et mécanique quantique

**1.1. Mécanique classique.** On appelle *mécanique classique* l'ensemble des lois fondamentales de la physique en général antérieures à la mécanique quantique mais plus précisément les lois *non quantiques*. On discutera cette distinction plus précisément au paragraphe 1.2.b. En mécanique classique les lois fondamentales sont :

- 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.

**1.1.a. 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  $t \in \mathbb{R} \mapsto x(t) \in \mathbb{R}^d$  s'appelle la *trajectoire de la particule*.

**Définition 1.1 (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 :

$$(1.1) \quad m \frac{d^2 x}{dt^2} = F(x, t),$$

avec la donnée des conditions initiales de position  $x(0)$ , et vitesse  $dx/dt(0)$ .

**Remarque 1.2.** D'après le théorème de Cauchy-Lipschitz [Tay11a], il existe une solution unique à (1.1) si  $F$  est une fonction lipschitzienne.

Il est préférable de transformer l'équation du deuxième ordre en un système d'équations du premier ordre. Cela donne les équations de Hamilton ci-dessous.

**Définition 1.3.** 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> :

$$(1.2) \quad F = -\left(\frac{\partial V}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial V}{\partial x_d}\right) =: -\frac{\partial V}{\partial x},$$

où  $V(x, t)$  est une fonction à valeurs réelles appelée *énergie potentielle*. Considérons l'*impulsion* :

$$(1.3) \quad \xi := m \frac{dx}{dt} \in \mathbb{R}^d$$

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

$$(1.4) \quad H(x, \xi, t) := \frac{1}{2m} |\xi|^2 + V(x, t) \in \mathbb{R}$$

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

**Proposition 1.4 (équations de Hamilton, 1833).**

Les équations de Newton (1.1) peuvent s'écrire sous la forme<sup>(2)</sup> :

$$(1.5) \quad \frac{dx(t)}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \xi}, \quad \frac{d\xi(t)}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x},$$

déterminant un champ de vecteurs  $\mathcal{V} := (\partial H/\partial \xi, -\partial H/\partial x)$  sur l'espace des phases  $(x, \xi) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$  (figure 1).

*Démonstration.* On calcule :

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial \xi} &\stackrel{(1.4)}{=} \frac{1}{m} \xi \stackrel{(1.3)}{=} \frac{dx}{dt}, \\ -\frac{\partial H}{\partial x} &\stackrel{(1.4)}{=} -\frac{\partial V}{\partial x} \stackrel{(1.2)}{=} F \stackrel{(1.1)}{=} m \frac{d^2x}{dt^2} \stackrel{(1.3)}{=} \frac{d\xi}{dt}. \quad \square \end{aligned}$$

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

<sup>(2)</sup>La notation vectorielle  $\partial H/\partial x$  désigne le vecteur  $(\partial H/\partial x_1, \dots, \partial H/\partial x_d)$ , et  $\partial H/\partial \xi$  le vecteur  $(\partial H/\partial \xi_1, \dots, \partial H/\partial \xi_d)$ .

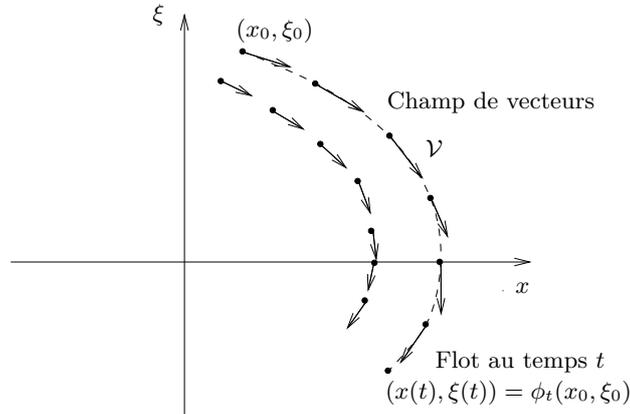


FIGURE 1. Champ de vecteurs de Hamilton  $\mathcal{V}$  et flot hamiltonien  $\phi_t$  dans l'espace des phases.

**Remarque 1.5.** Nous ferons un commentaire dans la remarque 1.17 sur l'aspect antisymétrique assez particulier des équations de Hamilton (1.5) qui, d'une certaine façon, laisse déjà entrevoir la mécanique quantique ondulatoire. En 1833 Hamilton a utilisé au départ ces équations pour exprimer l'optique géométrique des rayons, qui n'est qu'une approximation de l'optique ondulatoire [GS77]. Nous verrons de façon analogue que la mécanique classique est une approximation de la mécanique quantique ondulatoire.

**1.1.b. 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.

**Exemple 1.6 (le problème à deux corps).** C'est un système intégrable d'importance historique car c'est par lui que Newton a écrit l'équation (1.1) en 1687. À l'échelle du système solaire, on peut considérer la Terre comme un point de masse  $m = 6 \cdot 10^{24}$ 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  $u = x/|x|$  vecteur unitaire et  $C = \mathcal{G} \cdot m \cdot m_S$  avec la masse du Soleil  $m_S = 2 \cdot 10^{30}$ kg et la constante de gravitation universelle  $\mathcal{G} = 6,67 \cdot 10^{-11}$ N.m<sup>2</sup>.kg<sup>-2</sup>. Cette force dérive de l'énergie potentielle

$$(1.6) \quad V(x) = -C \frac{1}{|x|}.$$

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  $m = 9,31 \cdot 10^{-31}$ 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  $q = 1,6 \cdot 10^{-19}$ C est la charge élémentaire de l'électron et du proton et  $k_C = 9 \cdot 10^9$ Nm<sup>2</sup>C<sup>-2</sup> 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 (respectivement de l'électron) sont

des ellipses (ou paraboles ou hyperboles selon la condition initiale) [Arn76].

**Exemple 1.7 (puits de potentiel, oscillateur harmonique)**

À 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 :

$$(1.7) \quad H(x, \xi) = \frac{1}{2m}\xi^2 + \frac{1}{2}kx^2$$

et s'appelle le modèle de l'*oscillateur harmonique*. Les trajectoires sont des ellipses dans l'espace des phases<sup>(3)</sup>, voir figure 2.

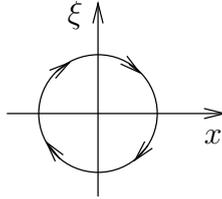


FIGURE 2. Une trajectoire de l'oscillateur harmonique dans l'espace des phases. La position  $x(t)$  et la vitesse  $v(t) = \frac{1}{m}\xi(t)$  oscillent en quadrature.

**Exemple 1.8 (particule libre sur le cercle  $S^1$  ou le tore  $\mathbb{T}^d$ )**

La position d'une particule sur le cercle est  $x \in S^1 := \mathbb{R}/\mathbb{Z}$  (c'est-à-dire définie 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

<sup>(3)</sup>Avec le changement de variables  $X := \sqrt{(k/2)}x$ ,  $Y := \xi/\sqrt{2m}$  et posant  $\omega := \sqrt{k/m}$ ,  $Z = X + iY$ , (1.5) se traduit par  $dZ/dt = -i\omega Z$ , qui donne le mouvement de rotation  $Z(t) = Z(0)e^{-i\omega t}$ .

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 (1.5) donnent

$$(1.8) \quad \frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \xi} = \xi, \quad \frac{d\xi}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} = 0.$$

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.

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  $x(t) = \xi_0 \cdot t + x_0$  avec  $\xi_0 \in \mathbb{R}^d$ . Voir figure 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 quelle 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, pour  $k \in \mathbb{Z}^d$ ,  $\xi_0 \cdot k = 0 \Rightarrow k = 0$ . En dimension  $d = 2$ , cela signifie que  $(\xi_0)_1 / (\xi_0)_0 \notin \mathbb{Q}$  (pente irrationnelle). En dimension quelconque cela signifie que l'hyperplan  $\xi_0^\perp := \{k \in \mathbb{Z}^d \mid \xi_0 \cdot k = 0\}$  n'intersecte le réseau  $\mathbb{Z}^d$  qu'en  $k = 0$ .

**Théorème 1.9 (d'équidistribution de Kronecker-Weyl, 1910)**

*Si  $\xi_0 \in \mathbb{R}^d$  est un vecteur irrationnel alors la trajectoire  $x(t) = \xi_0 \cdot t + x_0$  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  $x_0 \in \mathbb{T}^d$ ,*

$$(1.9) \quad \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T a(\xi_0 \cdot t + x_0) dt = \int_{\mathbb{T}^d} a(x) dx,$$

*c'est-à-dire 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  $\varphi_k(x) := \exp(i2\pi k \cdot x)$  appelée *mode de Fourier*. D'après la théorie de Fourier on peut décomposer la fonction  $a$  en série de Fourier  $a = \sum_k a_k \varphi_k$  avec les coefficients de Fourier  $a_k = \int_{\mathbb{T}^d} \overline{\varphi_k(x)} a(x) dx$ . Si  $k \neq 0$  alors

$k \cdot \xi_0 \neq 0$  et

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

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

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

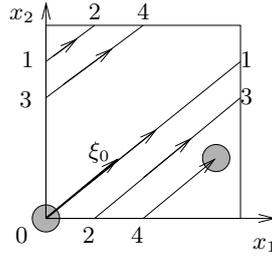


FIGURE 3. Une trajectoire sur le tore  $\mathbb{T}^2 = \mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2$  illustrant le théorème 1.9. Les numéros successifs représentent les points identifiés par les conditions périodiques. Si la pente de  $\xi_0$  est irrationnelle alors la trajectoire est dense et même ergodique, sinon la trajectoire est périodique. Cependant un nuage de points (ici un disque) garde sa forme en se translatant : la dynamique n'est pas mélangeante.

Voici une application de l'unique ergodicité.

**Corollaire 1.10 (loi de Benford).** Soit  $k_n \in \{1, 2, \dots, 9\}$  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  $p_k = \log(1 + 1/k)/\log(10)$ , soit  $p_1 = 30\%$ ,  $p_2 = 17\%$ ,  $\dots$ ,  $p_9 = 4.5\%$ , avec la définition

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

*Démonstration.* Dans un premier temps, comme dans le théorème 1.9, 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  $a \in C^0([0, 1[)$ ,

$$(1.10) \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N a(x_n) = \int a(x) dx.$$

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

$$\sum_{n=1}^N a(x_n) = \text{card} \{n \leq N \mid x_n \in I\} \quad \text{et} \quad \int a(x) dx = |I|,$$

donc (1.10) s'écrit simplement

$$\text{proba}(I) := \frac{1}{N} \text{card} \{n \leq N \mid x_n \in I\} = |I|.$$

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  $x_n := \log u_n / \log 10 \bmod 1$ . Alors  $x_{n+1} = x_n + \alpha \bmod 1$  avec<sup>(4)</sup>

$$\alpha = \frac{\log 2}{\log 10} \notin \mathbb{Q} \quad \text{et} \quad \frac{\log(k_n)}{\log 10} \leq x_n < \frac{\log(k_n + 1)}{\log 10},$$

soit  $x_n \in I_{k_n} := \left[ \frac{\log(k_n)}{\log 10}, \frac{\log(k_n + 1)}{\log 10} \right[$ . Comme la suite  $x_n$  est ergodique on déduit que

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

**Exemple 1.11 (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

---

<sup>(4)</sup>En effet si  $\log 2 / \log 10 = p/q \in \mathbb{Q}$  alors  $2^q = 10^p = 2^p 5^p$  ce qui implique  $p = q = 0$ , donc impossible.

normale à sa surface (cette force est telle qu'elle impose à la particule de rester sur la surface). Cela s'écrit donc :

$$(1.11) \quad P_x \frac{dv}{dt} = 0$$

avec la vitesse  $v = dx/dt \in \mathbb{R}^3$  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 4(a). En terme géométriques on note  $Dv/dt = 0$ , et  $D := Pd$  s'appelle

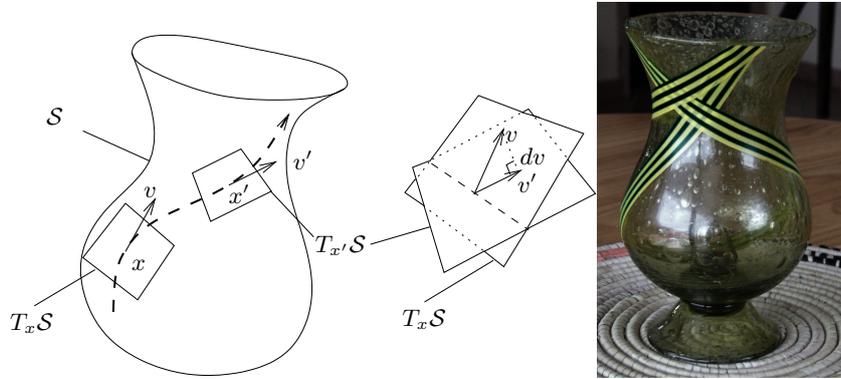


FIGURE 4. (a) Géodésique sur une surface  $\mathcal{S}$  : le vecteur vitesse  $v(t) = dx/dt$  est solution de  $P_x dv/dt = 0$  où  $P_x$  est le projecteur orthogonal sur le plan tangent  $T_x\mathcal{S}$  au point  $x$ . (b) En pratique une géodésique est obtenue en collant un ruban de scotch « de façon la plus plate possible », ici sur un vase ayant de la courbure de Gauss positive et négative.

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>(5)</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 [Tay11a, Tay11b] que

<sup>(5)</sup>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.

- [Tay11a, p. 52] L'équation (1.11) a une unique solution  $x(t) \in \mathcal{S}$  qui de plus est solution des équations de Hamilton (1.5) 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 cotangent  $\xi \in T_x^*\mathcal{S}$ . Comme cette formulation est intrinsèque et géométrique (c'est-à-dire invariante par changement de coordonnées) elle s'adapte au cas des variétés riemanniennes, pour lesquelles 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  $2 \dim \mathcal{S} = 4$ .

- [Tay11a, p. 47] Si  $A = x(0)$  et  $B = x(t)$  sont deux points de la même géodésique, alors parmi tous les chemins paramétrés  $\gamma : t \mapsto x(t)$  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).

### 1.1.c. Flot hamiltonien et crochets de Poisson

Nous précisons quelques aspects de la dynamique hamiltonienne qui seront utiles plus tard. Pour simplifier l'exposé, nous supposons que pour toutes conditions initiales données  $(x(0), \xi(0)) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$  la solution  $(x(t), \xi(t)) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$  de (1.5) existe et est unique pour tout  $t \in \mathbb{R}$  (le théorème de Cauchy-Lipschitz garantit cela localement en temps si  $V$  est lipschitzienne).

**Définition 1.12.** Avec les notations précédentes le *flot hamiltonien* est la famille d'applications pour  $t \in \mathbb{R}$  :

$$(1.12) \quad \phi_t : \begin{cases} \mathbb{R}^{2d} & \longrightarrow \mathbb{R}^{2d} \\ (x(0), \xi(0)) & \longmapsto (x(t), \xi(t)) \end{cases}$$

(c'est un groupe à un paramètre). Voir figure 1.

**Théorème 1.13 (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  $\mathcal{V} = (\frac{\partial H}{\partial \xi}, -\frac{\partial H}{\partial x})$  défini en (1.5) est de divergence nulle :

$$\operatorname{div}(\mathcal{V}) = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial H}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left( -\frac{\partial H}{\partial x} \right) \stackrel{(1.5)}{=} 0. \quad \square$$

**Proposition 1.14 (conservation de l'énergie).** *Si la fonction  $H$  est indépendante de  $t$  (c'est-à-dire  $H$  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 :

$$\frac{dH(x(t), \xi(t))}{dt} = \left( \frac{\partial H}{\partial x} \right) \frac{dx}{dt} + \left( \frac{\partial H}{\partial \xi} \right) \frac{d\xi}{dt} \stackrel{(1.5)}{=} \left( -\frac{d\xi}{dt} \right) \frac{dx}{dt} + \left( \frac{dx}{dt} \right) \frac{d\xi}{dt} = 0. \quad \square$$

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, c'est-à-dire sauf à un sous-ensemble de mesure nulle.

**Définition 1.15.** *L'opérateur de Liouville exprime l'évolution d'une distribution de probabilité sur l'espace des phases au temps  $t \in \mathbb{R}$  :*

$$(1.13) \quad \mathcal{L}_t : \begin{cases} C^\infty(\mathbb{R}^{2d}) \longrightarrow C^\infty(\mathbb{R}^{2d}) \\ f \longmapsto \mathcal{L}_t f := f \circ \phi_{-t}. \end{cases}$$

Remarquons qu'en utilisant le théorème de Liouville 1.13, 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 1.16.** *Pour toute fonction  $f \in C^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ , l'évolution infinitésimale est donnée par*

$$(1.14) \quad \frac{d(\mathcal{L}_t f)}{dt} = \{H, f\},$$

où

$$(1.15) \quad \{H, f\} := \frac{\partial H}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial \xi} - \frac{\partial H}{\partial \xi} \frac{\partial f}{\partial x},$$

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

*Démonstration.* On calcule :

$$\begin{aligned} \frac{d(\mathcal{L}_t f)}{dt} &\stackrel{(1.13)}{=} \frac{d(f \circ \phi_{-t})}{dt} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{d(\phi_{-t})_x}{dt} + \frac{\partial f}{\partial \xi} \frac{d(\phi_{-t})_\xi}{dt} \\ &\stackrel{(1.12)}{=} \frac{\partial f}{\partial x} \left( -\frac{dx}{dt} \right) + \frac{\partial f}{\partial \xi} \left( -\frac{d\xi}{dt} \right) \\ &\stackrel{(1.5)}{=} \frac{\partial f}{\partial x} \left( -\frac{\partial H}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial f}{\partial \xi} \left( -\left( -\frac{\partial H}{\partial x} \right) \right) = \{H, f\}. \quad \square \end{aligned}$$

**Remarque 1.17.** Le formalisme de la mécanique classique hamiltonienne qui vient d'être esquissé possède une formulation en géométrie différentielle très intéressante et très utile appelée *géométrie symplectique*. Nous renvoyons à [Arn76] [Tay11a, Sec1.14] pour une introduction proche de la physique et [Can01, MS98, GS90, GS77] pour plus d'approfondissements. Le point de départ de cette approche est que les équations de Hamilton (1.5) sur  $\mathbb{R}^{2d}$  peuvent s'exprimer de façon géométrique, c'est-à-dire indépendamment du système de coordonnées, de la façon suivante. On introduit la 2-forme  $\omega := \sum_{j=1}^d dx^j \wedge d\xi^j$  sur  $\mathbb{R}^{2d}$  appelée *forme symplectique*. Alors le champ de vecteur de Hamilton  $\mathcal{V}$  est déterminé par l'équation

$$(1.16) \quad \omega(\mathcal{V}, \bullet) = dH,$$

où  $dH$  est la différentielle de la fonction  $H(x, \xi)$ .

*Démonstration.* En coordonnées on note

$$\mathcal{V} = \sum_{j=1}^d \mathcal{V}_{x,j} \frac{\partial}{\partial x^j} + \mathcal{V}_{\xi,j} \frac{\partial}{\partial \xi^j}.$$

Alors d'une part

$$\omega(\mathcal{V}, \bullet) = \sum_j \mathcal{V}_{x,j} d\xi^j - \mathcal{V}_{\xi,j} dx^j$$

et d'autre part

$$dH = \sum_j \frac{\partial H}{\partial \xi^j} d\xi^j + \frac{\partial H}{\partial x^j} dx^j.$$

L'identité (1.16)) donne bien  $\mathcal{V}_{x,j} = \partial H / \partial \xi^j$  et  $-\mathcal{V}_{\xi,j} = \partial H / \partial x^j$  qui sont les équations de Hamilton (1.5).  $\square$

Cette formulation faisant intervenir la géométrie symplectique peut paraître surprenante. Elle laisse en fait soupçonner que la mécanique quantique ondulatoire est « cachée » derrière la mécanique classique. Nous verrons dans la section suivante avec le théorème d'Egorov que la mécanique classique s'obtient à partir de la mécanique quantique ondulatoire à la limite des petites longueurs d'ondes ( $\hbar \rightarrow 0$ ). Par ailleurs il y a une formulation géométrique de cette limite dans le cadre de la *quantification géométrique* [Woo92] qui montre explicitement que la forme symplectique  $\omega$  classique provient directement de la forme symplectique canonique sur le projectif  $\mathbb{P}(\mathcal{H})$  de l'espace de Hilbert quantique  $\mathcal{H}$ .

## 1.2. Mécanique quantique.

**1.2.a. Équation de Schrödinger.** Il est apparu dès le XIX<sup>e</sup> 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 des  $x \in \mathbb{R}^3$  qui évolue en temps  $t \in \mathbb{R}$  selon l'*équation de Schrödinger*.

**Définition 1.18.** L'équation de Schrödinger est l'analogie de l'équation de Newton (ou de Hamilton) en mécanique classique et s'écrit :

$$(1.17) \quad i\hbar \frac{\partial \psi_t}{\partial t} = \text{Op}_\hbar(H)\psi_t$$

avec  $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$  J.s. appelée *constante de Planck*<sup>(6)</sup> et  $\text{Op}_\hbar(H)$  est un opérateur linéaire<sup>(7)</sup> appelé *opérateur hamiltonien* défini par

$$(1.18) \quad \text{Op}_\hbar(H) := \frac{1}{2m} |\text{Op}_\hbar(\xi)|^2 + V(x),$$

avec

$$(1.19) \quad \text{Op}_\hbar(\xi) = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_d} \right) =: -i\hbar \frac{\partial}{\partial x},$$

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

Dans (1.18), on a utilisé la notation de *produit scalaire d'opérateurs vectoriels* :

$$|\text{Op}_\hbar(\xi)|^2 := \sum_{j=1}^d (\text{Op}_\hbar(\xi))_j^2 = (-i\hbar)^2 \left( \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2 \cdot}{\partial x_i^2} \right) = -\hbar^2 \Delta.$$

Ainsi  $\text{Op}_\hbar(H)\psi$  est la fonction :

$$(1.20) \quad (\text{Op}_\hbar(H)\psi)(x) = \frac{1}{2m} (-\hbar^2 \Delta \psi)(x) + V(x)\psi(x), \quad \Delta \psi := \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i^2}.$$

Noter que  $\text{Op}_\hbar(H)$  se déduit du hamiltonien classique  $H$  défini par l'équation (1.4) en substituant la variable impulsion  $\xi$  par l'opérateur impulsion  $\text{Op}_\hbar(\xi)$ . Cela s'appelle le *principe de correspondance* que l'on discutera par la suite.

**Remarque 1.19.** L'espace de Hilbert  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$  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)

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

<sup>(6)</sup>Attention, en physique on pose  $h = 2\pi\hbar$  alors que dans les ouvrages de mathématiques il est habituel de noter  $h$  cette même constante  $\hbar$ .

<sup>(7)</sup>Dans les ouvrages de physique il est habituel de noter  $\widehat{H} = \text{Op}_\hbar(H)$ .

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 (1.17) admet une solution que l'on peut écrire<sup>(8)</sup> :

$$(1.21) \quad \psi_t = U(t)\psi_0, \quad U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\text{Op}_\hbar(H)\right).$$

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 :

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

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 XX<sup>e</sup> 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* [Zwo12, Tay11b, chap. 7]. Voir la page web [Fau] pour des animations commentées d'ondes quantiques.

**1.2.b.** *Signification physique et probabiliste de la fonction d'onde  $\psi(x)$*  [BJ89]. 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

---

<sup>(8)</sup>En effet en dérivant (1.21) par rapport à  $t$ , on retrouve (1.17).

est :

$$(1.22) \quad P(U) = \frac{1}{\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}} \int_U |\psi(x)|^2 dx,$$

avec la constante de normalisation  $\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} := (\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 dx)^{1/2}$ . Autrement dit la densité de probabilité est  $\frac{1}{\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}} |\psi(x)|^2 dx$ . Noter que grâce au préfacteur  $1/\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}$ , et 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  $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ . Cette invariance est aussi vraie pour l'équation d'évolution (1.17) 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 étonnant (1.22) (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

$$(1.23) \quad \langle x \rangle := \int x |\psi(x)|^2 dx = \langle \psi | x \psi \rangle.$$

Dans ce principe de la mesure il est aussi postulé qu'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 (1.23) est en fait plus générale. Par exemple, pour une mesure de l'énergie, la *valeur moyenne* prédite est donnée par

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

et il est postulé en physique que cela est valable pour toutes les *observables* de la forme  $\text{Op}_{\hbar}(a)$  (voir (1.32)). Ce postulat de la mesure est en accord remarquable avec toutes les expériences de physique menées jusqu'à ce jour.

**1.2.c.** *L'expérience des doubles fentes de Young.* Voir figure 5. Il s'agit d'une des expériences les plus intrigantes 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. En rapport avec cette expérience qu'il commente dans son chapitre 1, Richard Feynman [Fey63] (physicien notoire dans l'élaboration de la mécanique quantique) a écrit « Personne ne comprends la mécanique quantique ».

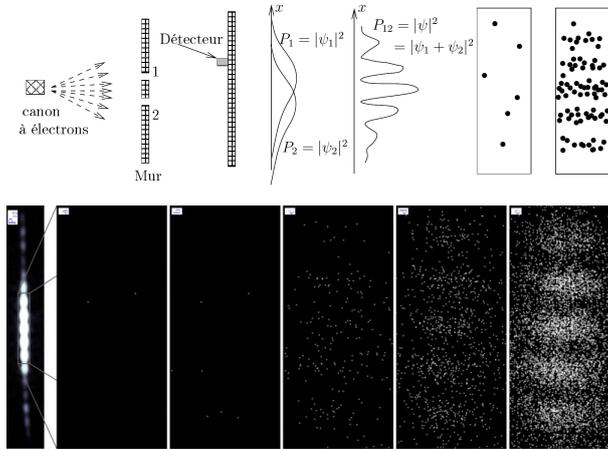


FIGURE 5. Expérience faite en 2012 [BPLB13], interférences et détection de l'onde quantique d'un électron après le passage dans une double fente. Après un petit nombre de détections les résultats semblent aléatoires, mais après un grand nombre d'expériences identiques on observe la densité de probabilité  $|\psi(x)|^2$  prédite par la théorie quantique. Voir la video des impacts sur la page web du journal.

**1.2.d. Équation de Schrödinger stationnaire.** Comme l'opérateur hamiltonien  $\text{Op}_\hbar(H)$  défini par (1.20) 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 œuvre la *théorie spectrale des opérateurs*, et il faut préciser un espace fonctionnel [Dav07], [Dav95], [RS72], [HS96], [GS11]. 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  $E$  :

$$(1.24) \quad \text{Op}_{\hbar}(H)\psi_0 = E\psi_0, \quad E \in \mathbb{R}.$$

On appelle  $E$  l'énergie de l'état  $\psi_0$ . Il est facile de résoudre l'équation d'évolution (1.17) partant de l'état  $\psi_0(x)$  et cela donne

$$(1.25) \quad \psi_t(x) = e^{-iEt/\hbar}\psi_0(x).$$

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 [BJ89] :

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

avec la constante de Rydberg  $\mathcal{R} = \frac{1}{2}\alpha^2 mc^2$  et la constante de structure fine  $\alpha = k_e e^2 / \hbar c$ . Historiquement ce spectre discret a permis d'expliquer les raies de fluorescence des atomes, observées dès 1752 par T. Melvill. Voir figure 6.

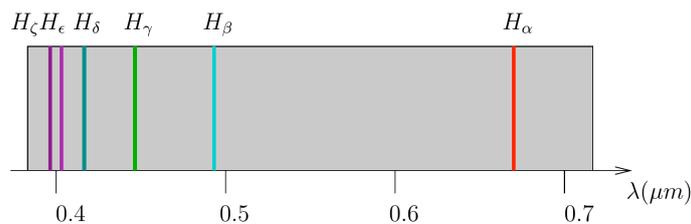


FIGURE 6. On éclaire un gaz d'hydrogène avec un laser pour lui fournir de l'énergie. Les électrons des atomes réémettent l'énergie  $h\nu$  sous forme lumineuse (appelée fluorescence) après une transition entre des niveaux  $E_n \rightarrow E_m$ , avec  $E_m < E_n$ . Par exemple les raies de Balmer (1885) ont des longueurs d'ondes  $\lambda_n$  dans le visible données par  $h\nu_n = 2\pi\hbar/\lambda_n = E_n - E_2$ ,  $n \geq 3$ .

*Modèle très simple.* C'est celui à une dimension  $d = 1$  d'une particule libre dans l'intervalle  $x \in [0, L]$ . On a

$$H(x, \xi) = \frac{1}{2m}\xi^2, \quad \text{Op}(H) = -\frac{1}{2m}\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$$

et (1.24) s'écrit

$$\psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

avec les conditions  $\psi(0) = \psi(L) = 0$ . Les ondes stationnaires sont donc  $\psi_n(x) = \sin(n\pi x/L)$ ,  $n \geq 1$  et les niveaux d'énergie sont  $E_n = \frac{1}{2m}(n\pi\hbar/L)^2$ .

**1.2.e.** *Explication du principe de correspondance sur un modèle simple.* Avant d'introduire la quantification de Weyl, considérons la fonction de Hamilton classique linéaire suivante<sup>(9)</sup>

$$(1.26) \quad H(x, \xi) = v \cdot \xi + w \cdot (-x),$$

où  $\mathcal{V} = (v, w) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d = \mathbb{R}^{2d}$  est un vecteur (constant) fixé. Les équations de Hamilton (1.5) 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. Voir figure 7.

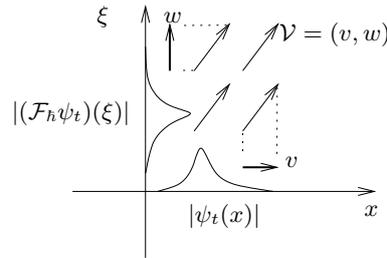


FIGURE 7. Champ de vecteurs de Hamilton  $\mathcal{V} = (v, w)$  du modèle simple (1.26)). On montre qu'avec l'équation de Schrödinger, une onde (respectivement sa transformée de Fourier) se déplace aussi à la vitesse  $v$  en  $x$  (respectivement  $w$  en  $\xi$ ).

<sup>(9)</sup>Attention ce modèle ne correspond pas directement à un modèle de physique. Il peut cependant être considéré (par linéarisation) comme le comportement local d'une fonction  $H(x, \xi)$  quelconque.

Au niveau de la mécanique quantique, avec le principe de correspondance on obtient l'opérateur :

$$(1.27) \quad \text{Op}_{\hbar}(H) = v \cdot \text{Op}_{\hbar}(\xi) + w \cdot (-x),$$

où  $\text{Op}_{\hbar}(\xi)$  est défini par (1.19), et l'équation de Schrödinger (1.17) peut se résoudre pour donner explicitement pour toute fonction  $\psi_0 \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ <sup>(10)</sup> :

$$(1.28) \quad \psi_t(x) = (e^{-it\text{Op}_{\hbar}(H)/\hbar}\psi_0)(x) = e^{iw(xt - \frac{1}{2}vt^2)/\hbar}\psi_0(x - vt).$$

Ainsi la fonction  $|\psi_t|(x) = |\psi_0(x - vt)|$  se déplace à la vitesse  $v$  selon  $x$ , comme en mécanique classique. Voir figure 7. Ensuite, pour comprendre l'effet de  $w$ , considérons la  $\hbar$ -transformée de Fourier<sup>(11)</sup> de  $\psi_t$  :

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

L'équation (1.28) donne :

$$(1.29) \quad (\mathcal{F}_{\hbar}\psi_t)(\xi) = e^{-iv(\xi t - \frac{1}{2}wt^2)/\hbar} (\mathcal{F}_{\hbar}\psi_0)(\xi - wt)$$

qui montre que la fonction  $|\mathcal{F}_{\hbar}\psi_t|(\xi) = |\mathcal{F}_{\hbar}\psi_0)(\xi - wt)|$  se déplace à la vitesse  $w$  selon  $\xi$ . Voir figure 7.

Ce petit modèle justifie à posteriori le principe de correspondance car avec le hamiltonien (1.26), 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>(12)</sup>. Pour un hamiltonien quelconque  $H(x, \xi)$ , le champ de vecteur  $\mathcal{V}$  n'est pas uniforme mais l'idée du calcul semi-classique est de montrer qu'à la limite  $\hbar \rightarrow 0$ , on peut considérer

<sup>(10)</sup>En effet

$$i\hbar \frac{d\psi_t}{dt} = -w(x - vt)\psi_t(x) + i\hbar(-v)e^{iw(xt - \frac{1}{2}vt^2)/\hbar}(\partial_x\psi_0) = \text{Op}_{\hbar}(H)\psi_t$$

car  $\partial_x\psi_t = i\frac{wt}{\hbar}\psi_t + e^{iw(xt - \frac{1}{2}vt^2)/\hbar}\partial_x\psi_0$ .

<sup>(11)</sup>Inversement,  $\psi_t(x) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{i\xi x/\hbar} (\mathcal{F}_{\hbar}\psi_t)(\xi) d\xi$ .

<sup>(12)</sup>en langage de la géométrie différentielle, l'impulsion  $\xi$  est un vecteur cotangent.

que  $\mathcal{V}$  est *localement constant* dans l'espace des phases  $(x, \xi)$  (on dit *micro-localement*) ; on se ramène à ce modèle simple où le principe de correspondance est valide. Dans le calcul semi-classique, on calcule les corrections à cette approximation sous la forme d'un développement en  $\hbar$ .

**1.2.f. Paquet d'onde gaussien et principe d'incertitude.** Les équations (1.28) et (1.29) 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 (c'est-à-dire que 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 considère le *paquet d'onde gaussien*

$$(1.30) \quad \psi_{x_0, \xi_0}(x) := a e^{i\xi_0 \cdot x / \hbar} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} |x - x_0|^2}$$

avec  $a := 1/(2\pi)^{d/2} (\pi\sigma^2)^{d/4}$  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>(13)</sup>

$$\begin{aligned} (\mathcal{F}_\hbar \varphi_{x_0, \xi_0})(\xi) &= a \hbar^{-d/2} e^{-ix_0 \cdot \xi / \hbar} e^{-|\xi - \xi_0|^2 / (\sqrt{2}/\sigma)^2} \\ &= a \sigma^d \frac{1}{\hbar^{d/2}} e^{-ix_0 \cdot (\xi - \xi_0) / \hbar} e^{-|\xi - \xi_0|^2 / 2(\hbar/\sigma)^2}, \end{aligned}$$

donnant  $|\mathcal{F}_\hbar \varphi_{x_0, \xi_0}|^2(\xi) = a^2 \sigma^{2d} \hbar^{-d} e^{-|\xi - \xi_0|^2 / (\hbar/\sigma)^2}$  qui est une gaussienne de largeur  $\Delta \xi = \hbar/\sigma$  et centrée en  $\xi_0$ . On observe que le produit des largeurs est<sup>(14)</sup>

$$(1.31) \quad \Delta x \cdot \Delta \xi = \hbar$$

indépendant de  $\sigma$ .

Interprétation physique : ainsi diminuer  $\Delta x$  augmente  $\Delta \xi$  et réciproquement. Rappelons que dans le cas d'une particule libre (1.8) on a  $\xi = mv = m \frac{dx}{dt}$  qui est la vitesse. L'équation (1.31) donne  $\Delta x \cdot \Delta v = \hbar/m$  qui s'appelle le *principe d'incertitude*. Par exemple

<sup>(13)</sup>Pour le calcul on utilise l'intégrale gaussienne  $\int_{\mathbb{R}^d} e^{-|y|^2} dy = \pi^{d/2}$ .

<sup>(14)</sup>Il est plus naturel d'écrire  $\Delta x \cdot \Delta(\xi/\hbar) = 1$  puisque  $\omega = \xi/\hbar$  est la fréquence spatiale.

pour un électron,  $m = 9 \cdot 10^{-31} \text{kg}$  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  $m = 7 \cdot 10^{22} \text{kg}$  donnant  $\hbar/m = 10^{-56} \text{m}^2/\text{s}$ , qui est imperceptible). Voir aussi remarque 2.1.e.

Interprétation mathématique : le principe d'incertitude montre que dans l'espace des phases,  $\Delta x \cdot \Delta \xi = \hbar$  est comme une surface élémentaire appelée *quantum d'action*. On peut considérer les variables  $(x, \xi)$  de l'espace des phases comme *indépendantes* sur des échelles de surface  $S \gg \hbar$ . C'est cette idée qui est formulée et exploitée rigoureusement dans les théorèmes de l'analyse semi-classique comme les théorèmes de composition et commutateur d'observables (1.35) et (1.41).

**1.2.g.** *Quantification de Weyl, voir le texte de Clotilde Fermanian Kammerer (ce volume)*. Pour une fonction  $a(x, \xi) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d})$  quelconque, que l'on appelle *symbole*<sup>(15)</sup>, sur l'espace des phases, on associe un opérateur  $\text{Op}_\hbar(a) : \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$  appelé *opérateur pseudo-différentiel*<sup>(16)</sup> obtenu par la *règle de quantification de Weyl* suivante [Zwo12, lemme 4.10] [Tay11b] :

$$(1.32) \quad \text{Op}_\hbar(a) := \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^{2d}} \int (\mathcal{F}a)(\omega_x, \omega_\xi) e^{i(\omega_x x + \omega_\xi \text{Op}_\hbar(\xi))} d\omega_x d\omega_\xi,$$

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

$$(1.33) \quad (\mathcal{F}a)(\omega_x, \omega_\xi) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^{2d}} \int a(z, \xi) e^{-i(\omega_x z + \omega_\xi \xi)} dz d\xi,$$

de sorte que, par transformation de Fourier inverse,

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

---

<sup>(15)</sup>  $\mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d}) \subset C^\infty(\mathbb{R}^{2d})$  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.

<sup>(16)</sup> En physique les opérateurs  $\text{Op}_\hbar(a)$  sont appelés *observables*. Par exemple, la position  $\text{Op}_\hbar(x)$ , l'impulsion  $\text{Op}_\hbar(\xi)$ , l'énergie  $\text{Op}_\hbar(H(x, \xi))$  sont des observables.

et où (1.32) fait apparaître des opérateurs que l'on a vus dans (1.28) :

$$(1.34) \quad (e^{i(\omega_x x + \omega_\xi \text{Op}_\hbar(\xi))} \psi)(x) = e^{i\omega_x x + \frac{1}{2}\hbar\omega_\xi \omega_x} \psi(x + \hbar\omega_\xi).$$

On peut en déduire une expression équivalente et plus habituelle pour la quantification de Weyl<sup>(17)</sup>

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

**Remarque 1.20.** Vérifions que la règle de quantification (1.32) donne bien (1.18) : 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  $(\mathcal{F}V)(\omega_x, \omega_\xi) = (\mathcal{F}V(\omega_x)) \cdot \delta(\omega_\xi)$ , d'où  $\text{Op}_\hbar(V(x)) = V(x)$ ). 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 (1.17). A partir de (1.32) on vérifie aussi que  $\text{Op}_\hbar(\bar{a}) = (\text{Op}_\hbar(a))^*$  (adjoint).

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

**Proposition 1.21** ([Zwo12]).

• Composition d'opérateurs et produit de symboles : *Pour tout  $a, b \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d})$  on a pour  $\hbar \ll 1$  (le reste est en norme opérateur)*

$$(1.35) \quad \text{Op}_\hbar(a) \circ \text{Op}_\hbar(b) = \text{Op}_\hbar(a \cdot b) + O(\hbar).$$

<sup>(17)</sup>On utilise la transformée de Fourier (1.33), on fait le changement de variable  $\omega_\xi \mapsto y = x + \hbar\omega_\xi$  et  $\int_{\mathbb{R}^d} d\omega_x e^{i\omega_x(\frac{1}{2}(x+y)-z)} = (2\pi)^d \delta(\frac{1}{2}(x+y) - z)$ ,

$$\begin{aligned} & (\text{Op}_\hbar(a)\psi)(x) \\ & \stackrel{(1.32)}{=} \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int \left( \int a(z, \xi) e^{-i(\omega_x z + \omega_\xi \xi)} dz d\xi \right) (e^{i(\omega_x x + \omega_\xi \text{Op}_\hbar(\xi))} \psi)(x) d\omega_x d\omega_\xi \\ & \stackrel{(1.34)}{=} \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int \left( \int a(z, \xi) e^{-i(\omega_x z + \omega_\xi \xi)} dz d\xi \right) e^{i\omega_x x + \frac{1}{2}\hbar\omega_\xi \omega_x} \psi(x + \hbar\omega_\xi) d\omega_x d\omega_\xi \\ & = \frac{\hbar^{-d}}{(2\pi)^d} \int \left( \int a\left(\frac{1}{2}(x+y), \xi\right) e^{-i((y-x)\xi/\hbar)} d\xi \right) \psi(y) dy \end{aligned}$$

• Commutateurs d'opérateurs et crochets de Poisson de symboles (1.15) :

$$(1.36) \quad \left[ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \text{Op}_{\hbar}(a), \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \text{Op}_{\hbar}(a) \right] = \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \text{Op}_{\hbar}(\{a, b\}) (1 + O(\hbar)).$$

• Trace d'opérateurs :

$$(1.37) \quad \text{Tr}(\text{Op}_{\hbar}(a)) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x, \xi) dx d\xi.$$

Comme exemple très simple mais important de (1.36), on calcule que  $x(-i\hbar \frac{d}{dx})\psi - (-i\hbar \frac{d}{dx})(x\psi) = i\hbar\psi$  et par ailleurs  $\{x, \xi\} = 1$ . Cela s'écrit :  $\left[ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \text{Op}_{\hbar}(x), \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \text{Op}_{\hbar}(\xi) \right] = \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \text{Op}_{\hbar}(\{x, \xi\})$ .

**1.2.h.** *Théorème d'Egorov, voir le texte de Clotilde Fermanian Kammerer (ce volume).* Nous allons voir maintenant avec le *théorème d'Egorov*, l'intérêt de la quantification de Weyl : à 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  $\omega_x = \xi/\hbar \gg 1$ . En physique, la petite valeur de  $\hbar$  à l'échelle humaine explique qu'il ait fallu attendre le XX<sup>e</sup> 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  $\mathcal{M}_a : f(x, \xi) \mapsto a(x, \xi)f(x, \xi)$  l'opérateur de multiplication associé. Utilisant l'opérateur d'évolution de Liouville (1.13) défini par  $\mathcal{L}_t f = f \circ \phi_{-t}$ , on a la relation simple suivante<sup>(18)</sup> :

$$(1.38) \quad \mathcal{L}_t \circ \mathcal{M}_a \circ \mathcal{L}_{-t} = \mathcal{M}_{\mathcal{L}_t a}.$$

---

<sup>(18)</sup>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 (1.38) comme une *équation d'évolution classique des observables*. Rappelons que l'équation d'évolution infinitésimale correspondante (1.14) est  $d(\mathcal{L}_t a)/dt = \{H, a\}$ .

Le théorème d'Egorov suivant montre qu'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  $U(t)$  défini par (1.21), 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 1.22 (d'Egorov, [Zwo12, Th. 11.1]).** *Pour tout  $a \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d})$ , tout  $t \in \mathbb{R}$ , on a la relation*

$$(1.39) \quad U(t) \circ \text{Op}_\hbar(a) \circ U(-t) = \text{Op}_\hbar(a_t)$$

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

$$(1.40) \quad a_t = \mathcal{L}_t a + O_t(\hbar).$$

Au niveau infinitésimal cette relation s'écrit :

$$(1.41) \quad i\hbar \frac{d\text{Op}_\hbar(a_t)}{dt} = [\text{Op}_\hbar(H), \text{Op}_\hbar(a_t)] = i\hbar \text{Op}_\hbar(\{H, a_t\}) + O(\hbar^2).$$

**Remarque 1.23.** On comprend (1.39) comme une *équation d'évolution quantique des observables*. La notation  $O_t(\hbar)$  dans (1.40) 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'Ehrenfest*. On verra qu'il joue un rôle important en chaos quantique.

*Idée de preuve du théorème d'Egorov.* La relation (1.41) se déduit de (1.36). Ensuite (1.39) se déduit par intégration. En effet se rappelant  $U(t) = \exp(-it\text{Op}_\hbar(H)/\hbar)$  en (1.21) et  $d(\mathcal{L}_t a)/dt = \{H, a\}$  en (1.14) on obtient en dérivant (1.39) et faisant  $t = 0$  que :

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

## 2. Chaos en mécanique classique

Dans cette partie 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 XIX<sup>e</sup> siècle avec Hadamard et Poincaré, puis leur étude a progressé au XX<sup>e</sup> siècle avec Birkhoff, Anosov, Smale, Bowen, Ruelle etc. et fait toujours l'objet de recherches en physique et en mathématiques.

Commençons par l'exemple simple à expliquer (mais un peu 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 mettre en évidence 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 particulier mais où les propriétés de chaos sont vraiment plus simples à démontrer. L'étude des systèmes dynamiques est plus générale que celle des dynamiques hamiltonienne (c'est-à-dire de la forme particulière (1.5)). On peut ainsi parler de dynamique chaotique pour des flots engendrés par des champs de vecteurs quelconques, pour des automates cellulaires etc.

### 2.1. 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. Voir figure 8. Elle a donc un comportement déterministe. Mais on observe que le comportement est imprévisible, *chaotique*. Pourquoi ?

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 9(a).

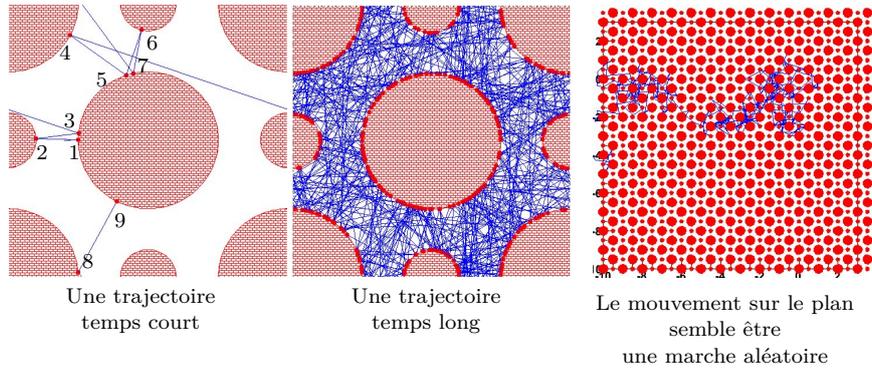


FIGURE 8. (a) Premiers rebonds d'une trajectoire dans le billard de Sinaiï. (b) Une trajectoire avec de nombreux rebonds. (c) Cette même trajectoire représentée sur  $\mathbb{R}^2$  qui est le recouvrement de  $\mathbb{T}^2$  (c'est-à-dire conditions de périodicité enlevées).

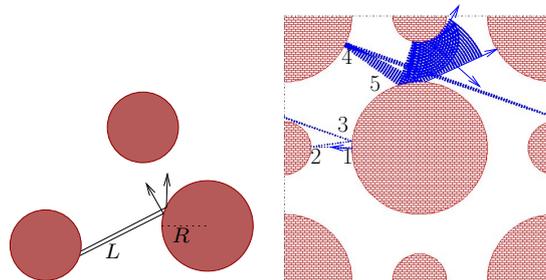


FIGURE 9. (a) Billard dispersif. (b) Nuage de billes indépendantes avec une incertitude initiale en position de  $\Delta y = 10^{-4}$ . Dans cet exemple, les différentes trajectoires deviennent *totalemt décorrélées* après le 6<sup>e</sup> rebond.

Après quelques rebonds seulement, deux trajectoires initialement très proches peuvent avoir des évolutions très différentes (décorrélées). Sur la figure 9(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 6 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. Voir [Rue91] [Rue95] et les vidéos de É. Ghys et al. sur le chaos [LGA].

*Question (très actuelle).* Est-il possible de faire des prédictions sur l'évolution malgré ce hasard ? de comprendre les lois de ce hasard ?

**2.1.a. Approche probabiliste.** Pour répondre à la question ci-dessus, il est nécessaire d'adopter une approche probabiliste. Voici l'idée.

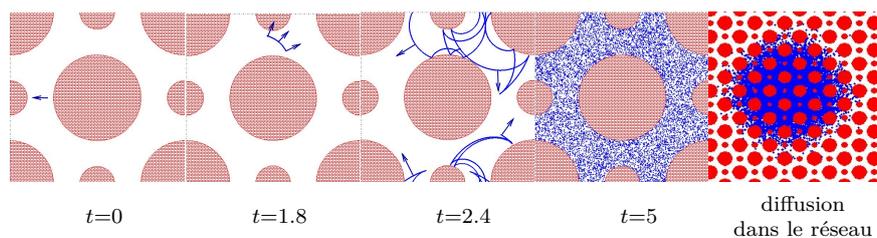


FIGURE 10. Évolution d'un ensemble très localisé de conditions initiales ( $\Delta y = 10^{-4}$ ). La distribution s'équidistribue sur le billard. Dans le réseau, elle diffuse (le rayon croît comme  $r(t) \simeq C \cdot \sqrt{t}$ ).

Sur la figure 10 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>(19)</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.

<sup>(19)</sup>Le travail va donc porter à trouver les lois d'évolution pour cette distribution de probabilité. C'est un sujet actuel de recherche.

**Remarque 2.1.**

(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 considérée comme la dynamique des trajectoires géodésiques sur une surface à courbure négative (cela signifie que les courbures principales sont opposées). Voir la figure 11.

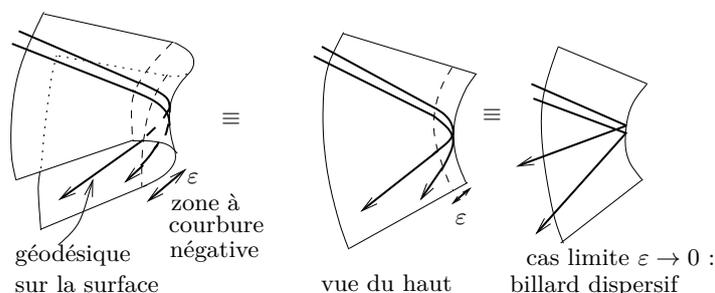


FIGURE 11. Le flot dans un billard dispersif est un cas limite de flot sur une surface à courbure négative concentrée sur la ligne de rebond.

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

**2.1.b. Espace des phases et couche d'énergie**

*Cas du flot géodésique sur une surface lisse.* Nous avons vu dans l'exemple 1.11 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'en chaque point  $x \in \mathcal{S}$  il faut aussi considérer la variable impulsion  $\xi \in T_x^*\mathcal{S} \cong \mathbb{R}^2$ . 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  $E > 0$ ) qui est définie par

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

appelée *couche d'énergie*. La variété  $\Sigma_E$  est compacte si  $\mathcal{S}$  est compacte et on a  $\dim \Sigma_E = 3$ .

*Cas d'un billard dispersif.* Le domaine est aussi noté  $\mathcal{S}$ . L'énergie  $E = H(x, \xi) = \frac{1}{2} |\xi|^2$  est indépendante de  $x$ . On déduit que  $v = dx/dt = \partial H / \partial \xi = \xi$  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 et cela rend leur étude mathématique plus difficile [CM06]. (On observe en effet des singularités dans la figure 10 à  $t = 2.4$ ).

**2.1.c. 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 elle montre une *manifestation de chaos* appelée *mélange* (voir paragraphe 2.2) et d'autre part cette propriété se vérifie dans certains modèles comme le flot géodésique sur une variété compacte à courbure strictement négative ou les billards dispersifs (à ceci près que le flot du billard n'est pas  $C^\infty$ ).

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 et que  $\mathbf{x} = (x, \xi)$ .

**Définition 2.2.** Un flot  $\phi_t$ ,  $t \in \mathbb{R}$ , engendré par un champ de vecteurs  $v$  sur une variété différentiable compacte  $M$  est un *flot d'Anosov* si en tout point  $\mathbf{x} \in M$ , l'espace tangent se décompose en

$$(2.1) \quad T_{\mathbf{x}}M = E_0(\mathbf{x}) \oplus E_u(\mathbf{x}) \oplus E_s(\mathbf{x})$$

qui est une décomposition continue en  $\mathbf{x}$  et invariante par le flot, avec  $E_0(\mathbf{x}) := \mathbb{R}v(\mathbf{x})$  (c'est-à-dire espace engendré par  $v(\mathbf{x})$ ), et il existe une métrique  $\|\cdot\|$  sur  $TM$ , un coefficient d'*instabilité*  $\lambda > 1$ ,  $C > 0$ , tels que

$$(2.2) \quad \begin{aligned} \forall w \in E_u(\mathbf{x}), \forall t \geq 0, \quad & \| (D\phi_t)w \| \geq C\lambda^t \|w\|, \\ \forall w \in E_s(\mathbf{x}), \forall t \geq 0, \quad & \| (D\phi_t)w \| \leq C\lambda^{-t} \|w\|. \end{aligned}$$

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 12. Alors (2.2) signifie en gros qu'un petit écart à une trajectoire de référence sera amplifié exponentiellement avec le temps  $t$  comme

$$(2.3) \quad \Delta \mathbf{x}(t) \simeq \lambda^t \Delta \mathbf{x}(0) = e^{t/\tau} \Delta \mathbf{x}(0)$$

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

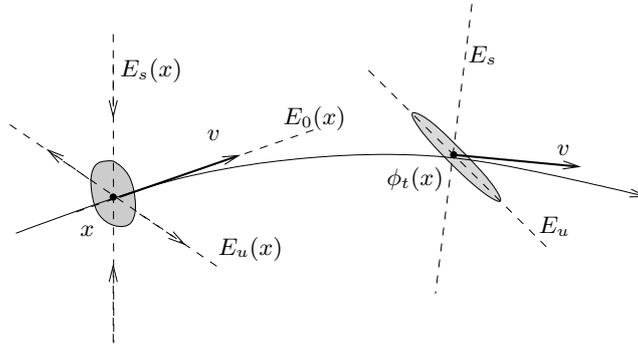


FIGURE 12. Flot d'Anosov près d'une trajectoire quelconque. Une distribution de points (nuage gris) est étirée dans la direction transverse  $E_u$ , contractée dans la direction  $E_s$  et pas déformée dans la direction neutre du flot  $E_0$ .

**Théorème 2.3 (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  $\Sigma_E$ ,  $E > 0$ ).*

**2.1.d. Mécanisme de l'instabilité d'Anosov pour un billard dispersif.** Il n'est pas évident à priori de relier l'image 11 (flot représenté en  $x$ ) et l'image 12 (flot représenté en  $\mathbf{x} = (x, \xi)$ ). Nous allons expliquer cette relation et donner une idée de la preuve (ou plutôt du mécanisme) du théorème 2.3 en discutant le cas d'un billard dispersif (bien que le flot de celui-ci ne soit pas lisse). Remarquons que la dynamique dans un billard plan est une succession de propagations en ligne droite et

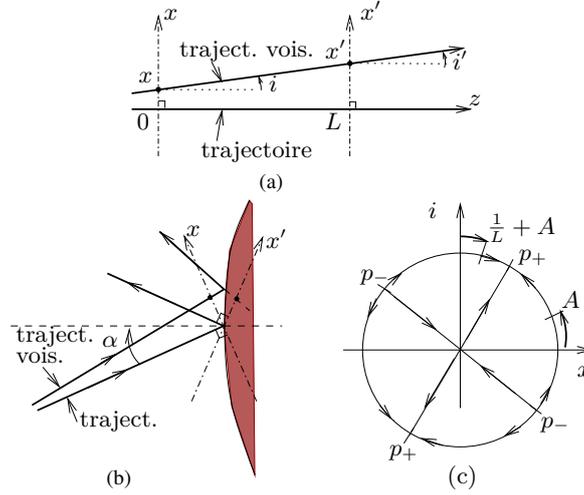


FIGURE 13. (a) Section de Poincaré pour une propagation et (b) pour un rebond sur une paroi de rayon  $R$ . Une trajectoire voisine est repérée par la position  $x$  transverse et l'angle  $i$ . (c) dynamique hyperbolique de  $p' = [M_{R,\alpha,L}](p)$  sur les directions  $p = i/x \in \mathbb{P}(\mathbb{R}^2)$ .

de réflexions sur des obstacles. Concernant la propagation, voir figure 13(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 13(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  $A := 2/R \cos \alpha$ . Par composition des deux résultats, pour une propagation de longueur  $L$  suivie d'une réflexion (comme

sur la figure 9), on déduit que la matrice de passage est le produit

$$(2.4) \quad M_{R,\alpha,L} := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ A & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & L \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & L \\ A & LA+1 \end{pmatrix}.$$

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  $A_{\min} = 2/R_{\max} \leq A \leq A_{\max} = \infty$ . On a

$$\det M_{R,\alpha,L} = 1, \quad \text{Tr } M_{R,\alpha,L} = 2 + LA \geq 2 + L_{\min}A_{\min} > 2.$$

Par conséquent<sup>(20)</sup>,  $M_{R,\alpha,L}$  a deux valeurs propres réelles  $\ell, \ell^{-1}$  avec  $\ell > 1$  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  $p = i/x \in \overline{\mathbb{R}} \equiv \mathbb{P}(\mathbb{R}^2)$  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 l'intervalle  $p' \in [A_{\min}, +\infty]$  et

$$\frac{d[M_{R,\alpha,L}](p)}{dp} = \frac{1}{(1+Lp)^2} < 1,$$

autrement dit cet intervalle est strictement contracté, voir figure 13(c).

Considérons maintenant une suite de points  $\mathbf{x}_k = (x_k, y_k, \theta_k) \in M$ ,  $k \in \mathbb{Z}$ , sur une même trajectoire, telle que  $\mathbf{x}_{k+1} = \phi_{t_k}(\mathbf{x}_k)$  soit une propagation suivit d'une réflexion comme précédemment. Alors la direction instable  $E_u(\mathbf{x}_0) \subset T_{\mathbf{x}_0}M$  au point  $\mathbf{x}_0$  est donnée par l'opération suivante. Tout d'abord  $E_u(\mathbf{x}_0)$  est orthogonale à la direction de propagation  $E_0(\mathbf{x}_0)$ , et en confondant  $E_u(\mathbf{x}_0)$  avec la pente  $p$  dans le plan  $(x, i)$  précédent, en utilisant la trajectoire dans le passé, on a

$$(2.5) \quad E_u(\mathbf{x}_0) = \lim_{N \rightarrow +\infty} (M_{R,\alpha,L})(\mathbf{x}_{-1}) \cdot (M_{R,\alpha,L})(\mathbf{x}_{-2}) \cdots (M_{R,\alpha,L})(\mathbf{x}_{-N})p_0,$$

<sup>(20)</sup>Si  $M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$  est une matrice avec  $T = \text{Tr}(M) > 2$  et  $\det(M) = 1$  alors ses valeurs propres sont  $\lambda_{\pm} = \frac{1}{2}(T \pm \sqrt{T^2 - 4})$  vérifiant  $0 < \lambda_- = \lambda_+^{-1} < 1 < \lambda_+$ .

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  $\mathbf{x}_k$  futurs on obtient

$$(2.6) \quad E_s(\mathbf{x}_0) = \lim_{N \rightarrow +\infty} (M_{R,\alpha,L}^{-1})(\mathbf{x}_1) \cdot (M_{R,\alpha,L}^{-1})(\mathbf{x}_2) \cdots (M_{R,\alpha,L}^{-1})(\mathbf{x}_N) p_0$$

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  $\lambda \geq (1 + \frac{1}{2} L_{\min} A_{\min})^{1/L_{\max}} > 1$ .

On a ainsi identifié les directions stables et instables  $E_s, E_u$  qui entrent dans la décomposition (2.1).

**Remarque 2.4.**

- On aperçoit la difficulté dans le cas du billard dispersif qui est que pour  $\alpha = \pi/2$  (rebond rasant), on a  $A = A_{\max} = \infty$ .

- Dans le cas du flot géodésique sur une variété lisse à courbure négative, il n'y a pas cette singularité ( $A_{\max} < \infty$ ) et des expressions (2.5) et (2.6) on peut déduire que  $\mathbf{x}_0 \rightarrow E_{u,s}(\mathbf{x}_0)$  sont des fonctions Hölder continues (mais  $C^2$  en aucun point), tout comme la fonction de Weierstrass [Fal03, chap. 11].

**2.1.e. Principe d'incertitude quantique et instabilités.** Reprenons la discussion qualitative (et physique) liée au principe d'incertitude (1.31). Considérons un *objet quantique* dans un billard dispersif (par exemple une boule de loto qui rebondit dans la machine). Si  $m \simeq 10\text{g}$ , alors  $\Delta x \cdot \Delta v = \hbar/m \simeq 10^{-36}\text{m}^2/\text{s}$  est très petit. Un compromis pour minimiser chaque terme du produit est  $\Delta x \simeq 10^{-18}\text{m}$  et  $\Delta v \simeq 10^{-18}\text{m/s}$ . Pour simplifier la discussion, supposons une amplification exponentielle des incertitudes avec le temps, comme (2.3), 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* bien que d'origine microscopique, a une influence à notre échelle macroscopique<sup>(21)</sup>.

---

<sup>(21)</sup>Cependant l'onde quantique n'apparaît pas à notre échelle, car la décohérence (processus de mesure avec l'environnement) intervient bien avant.

**2.2. Un flot géodésique Anosov est mélangeant (et ergodique).** On a vu l'instabilité des trajectoires qui s'exprime par des matrices hyperboliques comme (2.4). 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 14.

**Théorème 2.5 (Anosov).** *Un flot géodésique Anosov est mélangeant :  $\forall u, v \in C^\infty(M)$ , pour  $t \rightarrow \infty$  on a*

$$(2.7) \quad \left| \int_M v \cdot (u \circ \phi_{-t}) dx - \int_M v dx \cdot \int_M u dx \right| \rightarrow 0.$$

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

$$(2.8) \quad \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \left( \int_M v \cdot (u \circ \phi_{-t}) dx \right) dt = \int_M v dx \cdot \int_M u dx.$$

La preuve du mélange est ancienne (Anosov 1967 [Ano69]). Sinai l'a montré pour les billards dispersifs. La preuve du mélange à taux exponentiel est récente [Dol98, Liv04, Tsu10]. En prenant la moyenne temporelle de la propriété de mélange (2.7) on déduit l'ergodicité (2.8) (avec le théorème de Cesàro).

**Remarque 2.6.**

- 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 (2.7) 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  $\int_M v \cdot (u \circ \phi_{-t}) dx - \int_M v dx \cdot \int_M u dx$ .)

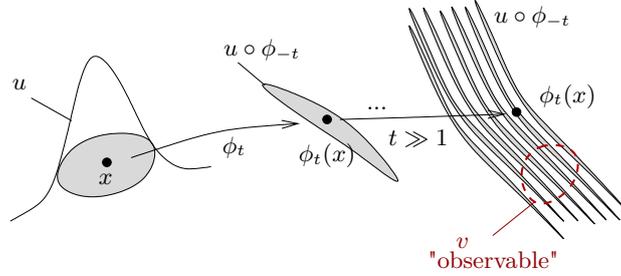


FIGURE 14. Fonction de corrélation

$$C_{v,u}(t) = \int_M v \cdot (u \circ \phi_{-t}) dx$$

$$\text{et mélange : } C_{v,u}(t) \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} \int_M v dx \cdot \int_M u dx.$$

- La propriété de *mélange* (2.7) signifie *perte d'information* car pour  $t \rightarrow \infty$ ,  $u \circ \phi_{-t}$  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 d'*ergodique* (2.8) à *uniquement ergodique* (1.9) : dans (1.9) on peut fixer n'importe quelle condition initiale  $x_0$  (cela revient à prendre une distribution de Dirac  $v = \delta_{x_0}$  dans (2.8)). L'unique ergodicité implique l'ergodicité.

$$\text{mélange} \implies \text{ergodique} \iff \text{uniquement ergodique}$$

- 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.

La propriété suivante est en fait une définition plus standard d'*ergodique*.

**Proposition 2.7.** *Le flot  $\phi_t$  préservant la mesure  $dx$  est ergodique si et seulement si toute fonction  $L^2$  stationnaire est constante (c'est-à-dire ( $u \in L^2(M)$  et  $\forall t, u = \mathcal{L}^t u$ )  $\implies u = \text{cste}$ ). De façon équivalente si et seulement si tout ensemble mesurable  $A \subset M$  tel que  $\mathcal{L}^t(A) = A$  (c'est-à-dire invariant) vérifie  $\text{Vol}(A) = 0$  ou  $\text{Vol}(A) = \text{Vol}(M)$ .*

*Démonstration.* Considérons le sous-espace des fonctions  $L^2$  stationnaires :

$$\text{Inv} := \{u \in L^2(M) \mid \forall t \in \mathbb{R}, \mathcal{L}^t u = u\} \subset L^2(M).$$

Von Neumann (1932) a montré que [Cou12, p. 10] :

$$P = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \mathcal{L}^t dt$$

converge fortement et que la limite  $P$  est le projecteur orthogonal sur  $\text{Inv}$  (c'est aussi le projecteur spectral de  $\mathcal{L}^t$  sur la valeur propre 1, pour tout  $t \in \mathbb{R}$ ). Ainsi

$$\text{Flot ergodique} \stackrel{(2.8)}{\iff} P = \langle \bullet, 1 \rangle \langle 1, \bullet \rangle \iff \text{Inv} = \{u = \text{cste}\}. \quad \square$$

**2.3. 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

$$(2.9) \quad M = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix},$$

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 (2.1).

La matrice  $M$  définit une dynamique sur  $\mathbb{R}^2$  par  $x \mapsto Mx$ . Elle définit<sup>(22)</sup> aussi une dynamique sur le tore  $\mathbb{T}^2 = (\mathbb{R}/\mathbb{Z})^2$  :

$$(2.10) \quad f : \begin{cases} \mathbb{T}^2 := \mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2 & \longrightarrow \mathbb{T}^2 \\ x & \longmapsto Mx \bmod \mathbb{Z}^2. \end{cases}$$

---

<sup>(22)</sup>Du fait que la matrice  $M$  est à coefficient entiers, l'application  $f$  est bien définie : car si  $n \in \mathbb{Z}^2$ ,  $x \in \mathbb{R}^2$  alors

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

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

Voir figure 15.

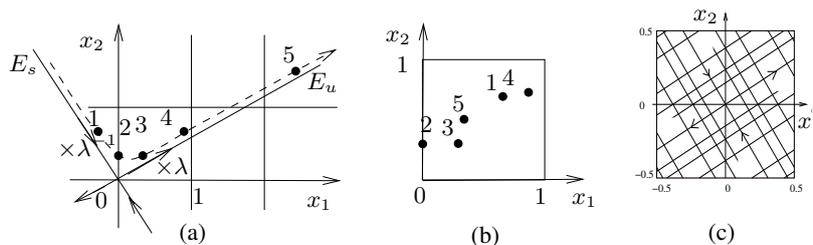


FIGURE 15. (a) Trajectoire du point initial  $(-0.3, 0.6)$  sous l'application  $f$  du *cat map*, sur  $\mathbb{R}^2$  (la trajectoire est sur une hyperbole). (b) Après la restriction modulo 1 sur  $\mathbb{T}^2$ , presque toute trajectoire semble imprévisible, *chaotique*. (c) Les pentes des directions stables  $E_s$  et instables  $E_u$  sont irrationnelles et ainsi ces droites sont denses sur  $\mathbb{T}^2$ .

Le théorème suivant montre que la dynamique du *cat map* (2.10) est très chaotique :

**Théorème 2.8.** *Le cat map  $f : \mathbb{T}^2 \rightarrow \mathbb{T}^2$  est mélangeant à taux super-exponentiel :  $\forall \alpha > 0, \forall u, v \in C^\infty(M), \exists C > 0$ , pour  $n \rightarrow +\infty$ ,*

$$(2.11) \quad \left| \int_{\mathbb{T}^2} v \cdot (u \circ f^{-n}) dx - \int v dx \int u dx \right| \leq C e^{-\alpha n}.$$

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

$$(2.12) \quad \begin{aligned} \int_{\mathbb{T}^2} \bar{\varphi}_\ell \cdot (\varphi_k \circ f^{-n}) dx &= \int \exp(i2\pi(k \cdot M^{-n}x - \ell \cdot x)) dx \\ &= \int \exp(i2\pi({}^t M^{-n}k - \ell) \cdot x) dx = \delta_{{}^t M^{-n}k = \ell}. \end{aligned}$$

Si  $k \neq 0$  alors  $|{}^t M^{-n}k| \rightarrow \infty$  lorsque  $n \rightarrow +\infty$  car  $M$  est hyperbolique. Donc (2.12) 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

$$\forall N, \exists C_N, \forall k, \quad |u_k| \leq \frac{C_N}{(|k| + 1)^N}.$$

De même pour  $v \in C^\infty(\mathbb{T}^2)$ . En utilisant (2.12) on a

$$\int_M v \cdot (u \circ f^{-n}) dx = \sum_k \bar{v}_\ell u_k \delta_{tM^{-n}k=\ell}.$$

Or  $|{}^tM^{-n}k| \geq C\lambda^n$  croît exponentiellement donc avec  $\ell = {}^tM^{-n}k$  et  $k$  fixé on a

$$|v_\ell| \leq \frac{C_N}{(|\ell| + 1)^N} \leq \frac{C'_N}{\lambda^{nN}} = C'_N e^{-n(N \log \lambda)}$$

pour tout  $N$ . On déduit (2.11). Le terme constant  $\int v dx \int u dx = v_0 u_0$  provient des composantes  $k = \ell = 0$  qui ne fuient pas à l'infini.  $\square$

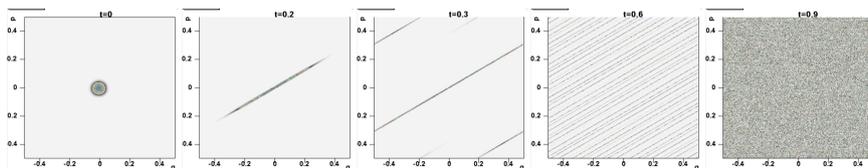


FIGURE 16. *Mélange, chaos* dans le modèle du cat map classique : une distribution de points initialement concentrée près du point fixe instable  $(0, 0)$  se disperse selon la direction instable  $E_u$  et converge vers la *distribution d'équilibre*.

**Remarque 2.9.** 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, Tsu12].

### 3. Chaos quantique

De façon un peu imprécise, un *modèle de chaos quantique* est une dynamique quantique définie par l'équation de Schrödinger (1.17) avec un hamiltonien  $H$  tel que le flot classique  $\phi_t$  (défini par les équation de mouvement de Hamilton (1.5)) est *chaotique* sur la couche d'énergie  $\Sigma_E$  (au sens défini en Section 2, c'est-à-dire flot ergodique ou même mélangeant).

Nous avons vu que le paradigme (c'est-à-dire 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 :

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

où  $\hbar > 0$  est un paramètre équivalent à la longueur d'onde, qui nous servira à fixer l'échelle d'étude. Nous serons intéressé par la limite  $\hbar \rightarrow 0$ .

**Remarque 3.1.**

- Dans le cas du flot géodésique sur une variété riemannienne  $(\mathcal{M}, g)$ , le laplacien est celui de Hodge :  $\Delta := -d^*d$  (où  $d$  est la *dérivée extérieure*) [Tay11a, Sec.2.4]. 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 (2.10). Voir [BDB96] [FNDB03].

Dans cette section, on soulève quelques questions que l'on se pose en chaos quantique puis on mentionne certains résultats et conjectures sur les modèles précédents avec des illustrations. Les preuves détaillées sont données dans les textes de Clotilde Fermanian Kammerer (ce volume) et Nalini Anantharaman (ce volume).

**3.1. Représentation d'un état quantique sur l'espace des phases.** Pour discuter de la dynamique quantique d'un point de vue dynamique classique il faut une formulation dans l'espace des phases  $(x, \xi)$ . Nous avons évoqué une façon de le faire qui est d'utiliser les opérateurs pseudo-différentiels  $\text{Op}_\hbar(a)$ , où  $a(x, \xi) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d})$  est un symbole. Alors la valeur moyenne  $\langle \psi | \text{Op}_\hbar(a) \psi \rangle \in \mathbb{R}$  apporte une information sur l'état  $\psi$  concernant l'observable  $a$ .

Pour détecter la présence d'un état quantique  $\psi$  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 gaussien  $\psi_{x_0, \xi_0}$  défini en (1.30) et d'associer l'opérateur

$\widehat{a}_{x_0, \xi_0} := |\psi_{x_0, \xi_0}\rangle\langle\psi_{x_0, \xi_0}|$  qui est le projecteur orthogonal de rang 1 sur cet état. Alors

$$(3.1) \quad \text{Hus}_\psi(x_0, \xi_0) := \langle\psi|\widehat{a}_{x_0, \xi_0}\psi\rangle = |\langle\psi_{x_0, \xi_0}|\psi\rangle|^2$$

est une distribution positive de probabilité<sup>(23)</sup> sur l'espace des phases associée à l'état  $\psi$  appelée *distribution de Husimi* de l'état  $\psi$ . Le problème mathématique est que l'opérateur  $\widehat{a}_{x_0, \xi_0}$  ainsi défini n'est pas un opérateur pseudo-différentiel (c'est-à-dire que  $\widehat{a}_{x_0, \xi_0}$  ne peut pas s'écrire sous la forme  $\text{Op}_\hbar(a)$  avec un symbole  $a$  acceptable car ce serait une distribution de Dirac  $a = \delta_{(x_0, \xi_0)}$  en  $(x_0, \xi_0)$ , trop singulière), par conséquent les théorèmes d'Egorov etc. ne sont pas valables. Néanmoins la distribution de Husimi renseigne précisément sur l'état  $\psi$  et on l'utilisera dans les illustrations. On retrouve la transformée de Husimi en théorie du signal sous le nom *transformée par ondelettes*. Cependant pour pouvoir énoncer les résultats de l'analyse semi-classique dans la suite, on va considérer des valeurs moyennes  $\langle\psi_j|\text{Op}_\hbar(a)\psi_j\rangle$  où  $a$  est un symbole acceptable, c'est-à-dire qui varie lentement à l'échelle  $\sqrt{\hbar}$  du paquet d'onde. Cela masquera justement les fluctuations à l'échelle  $\sqrt{\hbar}$  que l'on peut observer sur la figure 17.

### 3.2. Deux questions mathématiques de base en chaos quantique.

(1) *Question d'évolution.* Étant donné un état initial  $\psi_0$ , décrire son évolution  $\psi_t$  au temps  $t$ , solution de l'équation de Schrödinger (1.17). 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 (2.7)? Voir figure 18(b).

---

<sup>(23)</sup>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  $\psi_{x_0, \xi_0}$ .

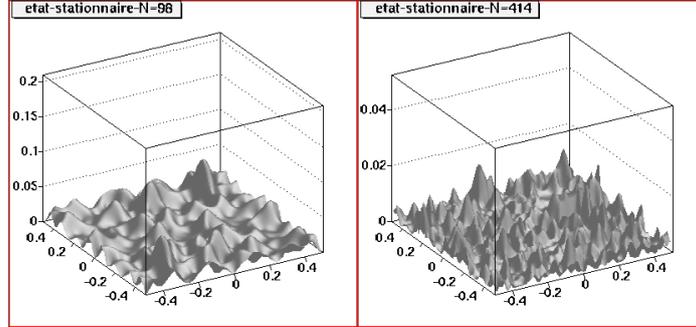


FIGURE 17. Distribution de Husimi (3.1) d'états stationnaires du *quantum cat map*. On observe qu'ils semblent s'équidistribuer (au sens des distributions) pour  $\hbar = 1/(2\pi N) \rightarrow 0$ . C'est cela qui est exprimé dans le *théorème d'ergodicité quantique*.

(2) *Question sur les états stationnaires.* On considère l'équation aux valeurs propres (1.24) :

$$(3.2) \quad \text{Op}_\hbar(H)\psi_j = E_j\psi_j.$$

Décrire la répartition des valeurs propres<sup>(24)</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 (1.25) 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 (2.7). Voir figure 17.

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  $\text{Op}_\hbar(H)$ .

**Remarque 3.2.**

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 (1.6) (c'est-à-dire atome d'hydrogène) ou de

<sup>(24)</sup>Dans les cas considérés ici on montre que  $\text{Op}_\hbar(H)$  a un spectre discret de valeurs propres  $E_j \geq 0$ .

l'oscillateur harmonique (1.7), des techniques algébriques basées sur la théorie des groupes permettent de trouver exactement les valeurs propres  $E_j$  et les états propres  $\psi_j$  (cela est dû aux symétries particulières du problème).

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

**3.3. Équidistribution des ondes stationnaires. Ergodicité quantique.** L'ergodicité quantique concerne la question d'équidistribution des fonctions propres  $\psi_j$  mentionnée au paragraphe 3.2. Pour caractériser cela, on a vu que si  $a(x, \xi)$  est une fonction sur l'espace des phases (un symbole), on lui associe un opérateur  $\text{Op}_\hbar(a)$  appelé observable qui justement « détecte » certaines propriétés des états quantiques  $\psi_j$  à travers les valeurs moyennes<sup>(25)</sup> :

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

Dire que  $\psi_j$  est *équidistribué* sur la couche d'énergie  $\Sigma_E$  signifie plus précisément que la valeur de  $\langle \psi_j | \text{Op}_\hbar(a) \psi_j \rangle$  doit être proche de la moyenne spatiale de  $a$  sur  $\Sigma_E$  pour toute observable  $a$ . La moyenne spatiale étant définie par

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

où  $d\mu_E$  est la *mesure de Liouville* sur  $\Sigma_E$ , définie par

$$(3.3) \quad d\mu_E dE = dx d\xi$$

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 à 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  $[E; E + \hbar^\alpha]$  avec  $0 < \alpha < 1$ .

---

<sup>(25)</sup>Le plus simple est d'imaginer une observable  $a(x, \xi)$  ayant son support dans un domaine  $U$  de l'espace des phases.  $\langle \psi_j | \text{Op}_\hbar(a) \psi_j \rangle$  va donc « détecter » la présence de l'état quantique  $\psi_j$  dans ce domaine  $U$ . Cet exemple amène à l'idée de représentation d'un état quantique sur l'espace des phases, voir §3.1.

**Théorème 3.3 (ergodicité quantique, [Šni74, CdV85, Zel87])**

Considérons une énergie  $E$  fixée 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

$$(3.4) \quad \frac{1}{\mathcal{N}_{\hbar}} \sum_{E_j \in [E; E + \hbar^\alpha]}^j \left| \langle \psi_j | \text{Op}_{\hbar}(a) \psi_j \rangle - \frac{1}{\text{Vol}(\Sigma_E)} \int_{\Sigma_E} a(x, \xi) d\mu_E \right|^2 \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} 0$$

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

**Remarque 3.4.**

- On peut interpréter le terme de gauche de (3.4) 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 formule souvent le théorème d'ergodicité quantique (Q.E.) par *la plupart des états stationnaires sont équidistribués à la limite semi-classique*.

- En 1994 S. Rudnick et P. Sarnak ont conjecturé que pour une dynamique mélangeante, tous les états stationnaires sans exception sont équidistribués à la limite semi-classique, c'est-à-dire que

$$\left| \langle \psi_j | \text{Op}_{\hbar}(a) \psi_j \rangle - \frac{1}{\text{Vol}(\Sigma_E)} \int a(x, \xi) d\mu_E \right| \rightarrow 0$$

pour  $\hbar \rightarrow 0$  et 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 le texte de N. Anantharaman (ce volume) pour plus de détails). Cette question de Q.U.E. est à l'heure actuelle considérée comme une question très ouverte en chaos quantique.

- Le théorème d'ergodicité quantique 3.3 n'exclut pas l'existence d'une suite d'états  $\psi_{j(\hbar)}$  non équidistribués, c'est-à-dire telle que

$$\exists \varepsilon > 0, \exists a(x, \xi), \forall \hbar, \left| \langle \psi_{j(\hbar)} | \text{Op}_{\hbar}(a) \psi_{j(\hbar)} \rangle - \int a(x, \xi) d\mu_E \right| > \varepsilon > 0.$$

De tels états stationnaires sont appelés *scars* (cicatrices) par E. Heller dans les années 1990. Leur existence donnerait un contre-exemple à Q.U.E. En physique, ces états ont été observé numériquement (et expérimentalement) dans certains *billards chaotiques* [GVZJ91]. Ils sont partiellement concentrés sur des trajectoires périodiques, mais il n'est cependant pas clair que ces états satisfont à la définition précise précédente. Voir figure 18 ou *quantum scars* sur google images.

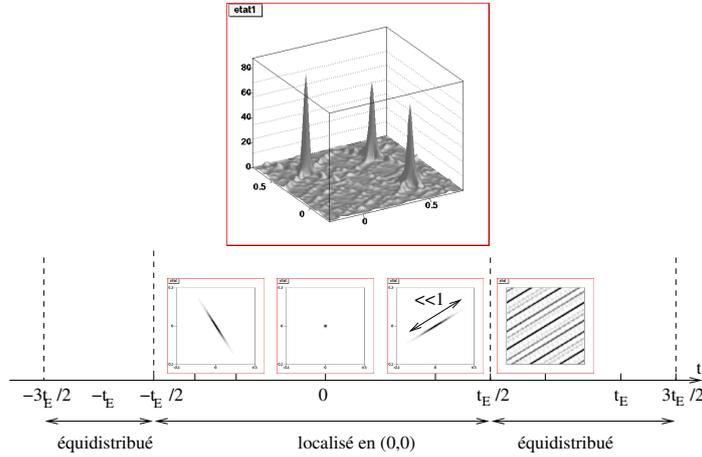


FIGURE 18. Ce sont des phénomènes très particuliers, et « contre-intuitifs ». (a) *Scars* dans le modèle du *quantum cat map* en représentation de Husimi. C'est un état stationnaire localisé sur une orbite périodique (ici de période 3). (b) En représentation de Husimi, un paquet d'onde initial à  $t = 0$ , évolue, s'étire selon la direction  $E_u$  et s'équidistribue (et de même dans le passé). Mais curieusement dans cet exemple, 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*. Cette période explique en fait l'existence du *scars* [FNDB03, FN04].

- Dans le cas de dynamique Anosov, l'existence de scars a été démontrée seulement dans le modèle particulier du *quantum cat map* [FNDB03]. C'est bien un contre-exemple à la conjecture Q.U.E. Il a

été 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 soient de mesure nulle parmi les modèles de systèmes dynamique mélangeants mais cependant dense ?

*Idée de preuve du théorème d'ergodicité quantique 3.3 (voir le texte de N. Anantharaman (ce volume))*

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 :

$$(3.5) \quad S_2(a) := \frac{1}{\mathcal{N}_h} \sum_{\substack{j \\ E_j \in [E, E+h^\alpha]}} |\langle \psi_j | \text{Op}_h(a) \psi_j \rangle|^2 \xrightarrow{h \rightarrow 0} 0.$$

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

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

Pour tout  $T > 0$  fixé et  $\hbar \ll 1$ , on a

$$\begin{aligned} \text{Op}_h(\langle a \rangle_T) &= \frac{1}{T} \int_0^T \text{Op}_h(a \circ \phi_{-t}) dt \\ &\stackrel{(1.39)}{=} \frac{1}{T} \int_0^T U(t) \text{Op}_h(a) U(-t) dt + O(\hbar). \end{aligned}$$

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, par Cauchy-Schwarz,

$$\begin{aligned} |\langle \psi_j | \text{Op}_\hbar(\langle a \rangle_T) \psi_j \rangle|^2 &\leq \| \text{Op}_\hbar(\langle a \rangle_T) \psi_j \|^2 \\ &= \langle \psi_j | (\text{Op}_\hbar(\langle a \rangle_T))^2 \psi_j \rangle \\ &\stackrel{(1.35)}{=} \langle \psi_j | (\text{Op}_\hbar(\langle a \rangle_T^2)) \psi_j \rangle + O(\hbar), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{et} \quad S_2(a) &\leq \frac{1}{\mathcal{N}_\hbar} \sum_{\substack{j \\ E_j \in [E; E + \hbar^\alpha]}} \langle \psi_j | (\text{Op}_\hbar(\langle a \rangle_T^2)) \psi_j \rangle + O(\hbar) \\ &= \frac{1}{\mathcal{N}_\hbar} \text{Tr}(\chi(\text{Op}_\hbar(H))(\text{Op}_\hbar(\langle a \rangle_T^2))) + O(\hbar) \\ &\stackrel{(3.6), (1.37)}{=} \frac{1}{\text{Vol}(\Sigma_E)} \int_{\Sigma_E} \langle a \rangle_T^2(x, \xi) d\mu_E + O(\hbar) \end{aligned}$$

avec une fonction  $\chi$  caractéristique de l'intervalle  $[E; E + \hbar^\alpha]$  (en fait une suite de fonctions  $C^\infty$  qui l'approche). Finalement on montre que l'ergodicité (proposition 2.7) implique que  $\int_{\Sigma_E} \langle a \rangle_T^2(x, \xi) d\mu_E \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 0$ . Cela permet de déduire (3.5) en prenant  $T$  assez grand puis  $\hbar \rightarrow 0$ .  $\square$

**3.4. Distribution des valeurs propres.** On s'intéresse maintenant aux valeurs propres  $(E_j)_j$  de (3.2) des opérateurs  $\text{Op}_\hbar(H)$  à la limite  $\hbar \rightarrow 0$ . Les résultats suivants décrivent ces spectres à des échelles  $\Delta E$  de plus en plus fines par rapport à  $\hbar$ . Pour atteindre ces échelles  $\Delta E$  plus fines, il faut comprendre la dynamique quantique sur des échelles de temps  $\Delta t$  de plus en plus longues, d'après la relation  $\Delta E \cdot \Delta t \simeq \hbar$  (en effet  $E, t$  sont des variables conjuguées de Fourier comme l'atteste  $e^{-iEt/\hbar}$  dans (1.25)). Voir figure 19.

**3.4.a. 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 proportionnel au volume de l'espace de phase correspondant. Il n'y a pas d'hypothèse sur la dynamique classique (chaotique ou pas).

**Théorème 3.5 (loi de Weyl, [Zwo12]).** *Pour tout  $0 < \alpha < 1$  et  $\hbar \rightarrow 0$ , en posant  $\text{Vol}(\Sigma_E) := \int_{\Sigma_E} d\mu_E$ , on a*

$$(3.6) \quad \#\{j \mid E_j \in [E; E + \hbar^\alpha]\} = \frac{\hbar^\alpha}{(2\pi\hbar)^d} (\text{Vol}(\Sigma_E) + o(1)).$$

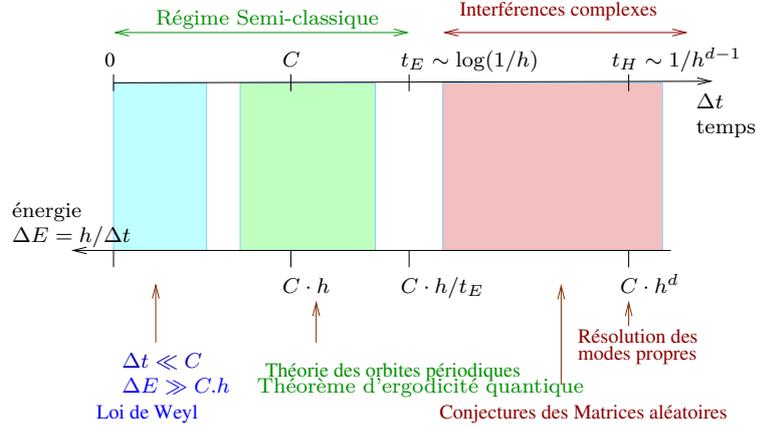


FIGURE 19. Échelles de temps-énergie typiques en chaos quantique, à la limite  $\hbar \rightarrow 0$  et d'après la relation  $\Delta E \cdot \Delta t \simeq \hbar$ . Ici  $C$  désigne une constante arbitraire mais indépendante de  $\hbar$  et  $t_E \simeq \log(1/\hbar)/\log \lambda$  est le temps d'Ehrenfest.  $t_H = \hbar^{d-1}$  est le *temps d'Heisenberg* qui est beaucoup plus long.

*Idée de preuve.* On considère une suite de fonctions  $\chi_\varepsilon : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  qui tendent vers la fonction caractéristique de l'intervalle  $[E, E + \hbar^\alpha]$  pour  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Alors

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\chi_\varepsilon(\text{Op}_\hbar(H))) &\stackrel{(1.37)}{=} \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int \chi_\varepsilon(H(x, \xi)) dx d\xi \\ &\stackrel{(3.3)}{=} \frac{\hbar^\alpha}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\Sigma_E} d\mu_E, \end{aligned}$$

et cela donne (3.6) à la limite  $\varepsilon \rightarrow 0$ .  $\square$

L'idée heuristique de la loi de Weyl est que, d'après le principe d'incertitude, un état quantique occupe le volume  $(\Delta x \Delta \xi)^d \simeq (2\pi\hbar)^d$  (un quantum). Ainsi (3.6) compte le nombre de quanta dans la zone d'espace des phases  $H^{-1}([E; E + \hbar^\alpha])$  dont le volume est  $\hbar^\alpha \text{Vol}(\Sigma_E)$ . Autrement dit la densité de valeurs propres (c'est-à-dire le nombre par intervalle d'énergie) est  $\rho \sim \text{Vol}(\Sigma_E)/(2\pi\hbar)^d$ .

En physique cette loi a de nombreuses applications. Elle permet de déterminer le rayon des étoiles à neutron ou naines blanches<sup>(26)</sup> en fonction de leur masse par exemple !

**3.4.b.** *Formule des traces de Gutzwiller* [Gut90]. 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.

**3.4.c.** *Conjecture des matrices aléatoires*

On suppose maintenant un système générique<sup>(27)</sup> dont la dynamique classique est chaotique (mélangeante). Cette conjecture décrit le spectre de  $\text{Op}_\hbar(H)$  à l'échelle  $\Delta E \ll \hbar/\log(1/\hbar)$  ou la dynamique des états pour  $t \gg t_E$ . La loi de Weyl (3.6) nous dit que la densité de valeurs propres (c'est-à-dire le nombre par intervalle d'énergie) est  $\rho := \text{Vol}(\Sigma_E)/(2\pi\hbar)^d$ . On considère les valeurs propres recentrées et renormalisées  $\tilde{E}_j := \rho \cdot (E_j - E)$  d'un modèle de chaos quantique.

Pour énoncer la conjecture, il nous faut définir :

**Définition 3.6.** *L'ensemble de matrices aléatoires 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

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

et  $Z$  constante de normalisation.

Comme exemple de propriété statistique, considérons l'écart  $s \geq 0$  entre deux valeurs propres consécutives de  $M$ . On note  $P(s)ds$  la

---

<sup>(26)</sup>Le calcul est simple. Par exemple dans  $5 \cdot 10^9$  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).

<sup>(27)</sup>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 [FNDB03].

densité de probabilité induite sur la variable  $s$  par la loi  $dP(M)$ . Pour des matrices de grande taille  $N \gg 1$  Wigner a montré que

$$(3.7) \quad P(s) \simeq \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4} s^2\right).$$

Le facteur  $s$  qui apparaît dans (3.7) exprime une *répulsion des niveaux*<sup>(28)</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, voir figure 20. Voici une conjecture célèbre en chaos quantique basée sur cette observation et sur des considérations heuristiques.

**Conjecture 3.7 (loi d'universalité des matrices aléatoires, O. Bohigas et al. 1984 [BGS84])**

À l'échelle  $\Delta E \ll \hbar/\log(1/\hbar)$ , les valeurs propres renormalisées  $\tilde{E}_j$  ont les mêmes distributions statistiques que celles d'une matrice aléatoire de l'ensemble  $G.O.E.$  donc indépendantes du système.

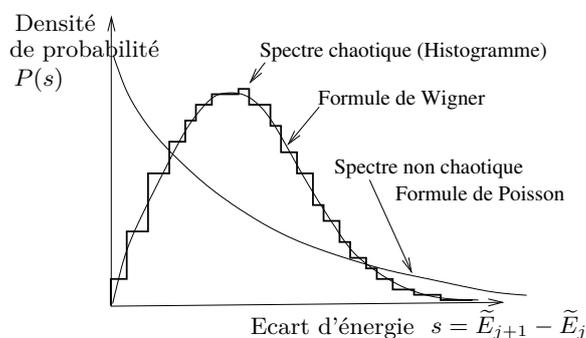


FIGURE 20. Distributions des écarts de valeurs propres  $s_j = (\tilde{E}_{j+1} - \tilde{E}_j)_j$  et formule de Wigner des matrices aléatoires.

<sup>(28)</sup>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 obtiendrait  $s^2 ds$ .

**3.5. Conclusion.** Grâce à l'analyse semi-classique, on peut étudier un problème ondulatoire dans le régime de petites longueurs d'ondes  $\ell \ll L$  devant la taille du système (par exemple l'évolution d'ondes quantiques, en posant  $\hbar = \ell/L \ll 1$ ) en étudiant au préalable la dynamique classique associée qui est une dynamique de particules.

Cette dynamique classique 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 rendent 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  $\ell$ . De façon équivalente, le régime semi-classique c'est-à-dire 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 qui est 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 des représentation des groupes et même l'arithmétique, où une manifestation encore très conjecturale et fascinante serait les statistiques de matrices aléatoires dans la répartition des nombres premiers et l'Hypothèse de Riemann (cf. [Gra03]).

### Références

- [Ana08] N. ANANTHARAMAN – « Entropy and the localization of eigenfunctions », *Ann. of Math. (2)* **168** (2008), no. 2, p. 435–475.
- [Ana14] ———, « Le théorème d'ergodicité quantique », in *Chaos en mécanique quantique*, Journées X-UPS, Les Éditions de l'École polytechnique, Palaiseau, 2014, ce volume.
- [AN07] N. ANANTHARAMAN & S. NONNENMACHER – « Half-delocalization of eigenfunctions for the Laplacian on an Anosov manifold », *Ann. Inst. Fourier (Grenoble)* **57** (2007), no. 7, p. 2465–2523.
- [Ano69] D. V. ANOSOV – *Geodesic flows on closed Riemann manifolds with negative curvature*, Proceedings of the Steklov Institute of Math., vol. 90, American Mathematical Society, Providence, R.I., 1969.

- [Arn76] V. I. ARNOLD – *Méthodes mathématiques de la mécanique classique*, Éditions Mir, Moscou, 1976.
- [BPLB13] R. BACH, D. POPE, S. H. LIU & H. BATELAAN – « Controlled double-slit electron diffraction », *New Journal of Physics* **15** (2013), no. 3, article no. 033018.
- [Bal00] V. BALADI – *Positive transfer operators and decay of correlations*, Advanced Series in Nonlinear Dynamics, vol. 16, World Scientific Publishing Co., Inc., River Edge, NJ, 2000.
- [BGS84] O. BOHIGAS, M.-J. GIANNONI & C. SCHMIT – « Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws », *Phys. Rev. Lett.* **52** (1984), no. 1, p. 1–4.
- [BDB96] A. BOUZOUINA & S. DE BIÈVRE – « Equipartition of the eigenfunctions of quantized ergodic maps on the torus », *Comm. Math. Phys.* **178** (1996), no. 1, p. 83–105.
- [BJ89] B. H. BRANSDEN & C. J. JOACHAIN – *Introduction to quantum mechanics*, Longman, 1989.
- [BS02] M. BRIN & G. STUCK – *Introduction to dynamical systems*, Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
- [Can01] A. CANNAS DA SILVA – *Lectures on symplectic geometry*, Lect. Notes in Math., vol. 1764, Springer-Verlag, Berlin, 2001.
- [CM06] N. CHERNOV & R. MARKARIAN – *Chaotic billiards*, Math. Surveys and Monographs, vol. 127, American Mathematical Society, Providence, RI, 2006.
- [Cou12] Y. COUDÈNE – *Théorie ergodique et systèmes dynamiques*, Savoirs Actuels, EDP Sciences, Les Ulis ; CNRS Éditions, Paris, 2012.
- [Dav95] E. B. DAVIES – *Spectral theory and differential operators*, Cambridge Studies in Advanced Math., vol. 42, Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [Dav07] ———, *Linear operators and their spectra*, Cambridge Studies in Advanced Math., vol. 106, Cambridge University Press, Cambridge, 2007.
- [Dol98] D. DOLGOPYAT – « On decay of correlations in Anosov flows », *Ann. of Math. (2)* **147** (1998), no. 2, p. 357–390.
- [Fal03] K. FALCONER – *Fractal geometry. Mathematical foundations and applications*, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, 2003.
- [Fau] F. FAURE – « Films d’animations d’ondes quantiques », <http://bit.ly/1zuyexa>.
- [FN04] F. FAURE & S. NONNENMACHER – « On the maximal scarring for quantum cat map eigenstates », *Comm. Math. Phys.* **245** (2004), no. 1, p. 201–214.
- [FNDB03] F. FAURE, S. NONNENMACHER & S. DE BIÈVRE – « Scarred eigenstates for quantum cat maps of minimal periods », *Comm. Math. Phys.* **239** (2003), no. 3, p. 449–492.
- [FRS08] F. FAURE, N. ROY & J. SJÖSTRAND – « A semiclassical approach for Anosov diffeomorphisms and Ruelle resonances », *Open Math. Journal* **1** (2008), p. 35–81.
- [FS11] F. FAURE & J. SJÖSTRAND – « Upper bound on the density of Ruelle resonances for Anosov flows », *Comm. Math. Phys.* **308** (2011), no. 2, p. 325–364.
- [FK14] C. FERMANIAN KAMERER – « Le théorème d’Egorov », in *Chaos en mécanique quantique*, Journées X-UPS, Les Éditions de l’École polytechnique, Palaiseau, 2014, ce volume.
- [Fey63] R. FEYNMAN – *Le cours de physique de Feynman, Mécanique quantique*, 1963.
- [GVZJ91] M.-J. GIANNONI, A. VOROS & J. ZINN-JUSTIN (éds.) – *Chaos et physique quantique*, Amsterdam, North-Holland Publishing Co., 1991.

- [Gra03] A. GRANVILLE – « Nombres premiers et chaos quantique », *Gazette des Mathématiciens, Soc. Math. France* (2003), no. 97, p. 29–44.
- [GS94] A. GRIGIS & J. SJÖSTRAND – *Microlocal analysis for differential operators. An introduction*, London Math. Soc. Lect. Note Series, vol. 196, Cambridge University Press, Cambridge, 1994.
- [GS77] V. GUILLEMIN & S. STERNBERG – *Geometric asymptotics*, Math. Surveys, vol. 14, American Mathematical Society, Providence, RI, 1977.
- [GS90] ———, *Symplectic techniques in physics*, 2<sup>e</sup> éd., Cambridge University Press, Cambridge, 1990.
- [GS11] S. J. GUSTAFSON & I. M. SIGAL – *Mathematical concepts of quantum mechanics*, 2<sup>e</sup> éd., Universitext, Springer, Heidelberg, 2011.
- [Gut90] M. C. GUTZWILLER – *Chaos in classical and quantum mechanics*, Interdisciplinary Applied Math., vol. 1, Springer-Verlag, New York, 1990.
- [HS96] P. D. HISLOP & I. M. SIGAL – *Introduction to spectral theory, with applications to schrödinger operators*, Applied Math. Sciences, vol. 113, Springer-Verlag, New York, 1996.
- [KH95] A. KATOK & B. HASSELBLATT – *Introduction to the modern theory of dynamical systems*, Encyclopedia of Math. and its Appl., vol. 54, Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [LGA] J. LEYS, É. GHYS & A. ALVAREZ – « Chaos », Videos, <http://www.chaos-math.org/fr.html>.
- [Liv04] C. LIVERANI – « On contact Anosov flows », *Ann. of Math. (2)* **159** (2004), no. 3, p. 1275–1312.
- [Mar02] A. MARTINEZ – *An introduction to semiclassical and microlocal analysis*, Universitext, Springer-Verlag, New York, 2002.
- [MS98] D. MCDUFF & D. SALAMON – *Introduction to symplectic topology*, 2<sup>e</sup> éd., Oxford Math. Monographs, The Clarendon Press, Oxford University Press, New York, 1998.
- [Non08] S. NONNENMACHER – « Some open questions in ‘wave chaos’ », *Nonlinearity* **21** (2008), no. 8, p. T113–T121.
- [RS72] M. REED & B. SIMON – *Methods of modern mathematical physics. I. Functional analysis*, Academic Press, New York-London, 1972.
- [RS78] ———, *Methods of modern mathematical physics. IV. Analysis of operators*, Academic Press, New York-London, 1978.
- [Rue91] D. RUELLE – *Hasard et chaos*, Odile Jacob, Paris, 1991.
- [Rue95] ———, *Turbulence, strange attractors, and chaos*, World Scientific Series on Nonlinear Science. Series A : Monographs and Treatises, vol. 16, World Scientific Publishing Co., Inc., River Edge, NJ, 1995.
- [Šni74] A. I. ŠNIREL’MAN – « Ergodic properties of eigenfunctions », *Uspehi Mat. Nauk* **29** (1974), no. 6, p. 181–182.
- [Tay11a] M. E. TAYLOR – *Partial differential equations I. Basic theory*, 2<sup>e</sup> éd., Applied Math. Sciences, vol. 115, Springer, New York, 2011.
- [Tay11b] ———, *Partial differential equations II. Qualitative studies of linear equations*, 2<sup>e</sup> éd., Applied Math. Sciences, vol. 116, Springer, New York, 2011.
- [Tsu10] M. TSUJII – « Quasi-compactness of transfer operators for contact Anosov flows », *Nonlinearity* **23** (2010), no. 7, p. 1495–1545.
- [Tsu12] ———, « Contact Anosov flows and the Fourier-Bros-Iagolnitzer transform », *Ergodic Theory Dynam. Systems* **32** (2012), no. 6, p. 2083–2118.
- [CdV85] Y. COLIN DE VERDIÈRE – « Ergodicité et fonctions propres du laplacien », *Comm. Math. Phys.* **102** (1985), no. 3, p. 497–502.

- [Woo92] N. M. J. WOODHOUSE – *Geometric quantization*, 2<sup>e</sup> éd., Oxford Math. Monographs, The Clarendon Press, Oxford University Press, New York, 1992, Oxford Science Publ.
- [Zel87] S. ZELDITCH – « Uniform distribution of eigenfunctions on compact hyperbolic surfaces », *Duke Math. J.* **55** (1987), no. 4, p. 919–941.
- [Zwo12] M. ZWORSKI – *Semiclassical analysis*, Graduate Studies in Math., vol. 138, American Mathematical Society, Providence, RI, 2012.

## Index

- analyse micro-locale, 18  
 analyse semi-classique, 18  
 Anosov, 33
- cat map, 40  
 chaos quantique, 42  
 coefficient d’instabilité de  
   Lyapounov, 36  
 collapse de la fonction d’onde, 19  
 connexion de Levi-Civita, 12  
 constante de Planck, 17  
 couche d’énergie, 33  
 crochet de Poisson, 15
- dérivée covariante, 12  
 direction instable, 34  
 direction neutre, 34  
 direction stable, 34  
 distribution de Husimi, 44  
 dualité onde-corpuscule, 19  
 dynamique intégrable, 45
- énergie, 14, 21  
 énergie cinétique, 5  
 énergie potentielle, 5  
 entropie, 31  
 équation de Schrödinger, 16  
 équations de Hamilton, 5  
 ergodicité, 38  
 ergodicité quantique, 47  
 ergodique, 39  
 espace de Hilbert, 17  
 espace de Schwartz, 25  
 espace des phases, 5  
 évolution effective, 31
- flot géodésique, 11
- fonction d’onde, 16  
 force, 4  
 force potentielle, 5  
 forme symplectique, 15
- géodésique, 12  
 géométrie symplectique, 15
- hamiltonien, 5
- impulsion, 5
- limite semi-classique, 27  
 loi de Benford, 10  
 loi de Newton, 4  
 loi de Weyl, 50
- matrice hyperbolique, 36  
 mécanique classique, 4  
 mécanique quantique, 16  
 mélangeant, 38  
 mélangeant à taux  
   super-exponentiel, 41  
 mesure d’équilibre, 39  
 mode de Fourier, 9, 41
- observables, 19  
 opérateur de Liouville, 14  
 opérateur hamiltonien, 17  
 opérateur impulsion, 17  
 opérateur pseudo-différentiel, 25  
 oscillateur harmonique, 8
- paquet d’onde gaussien, 24  
 position d’une particule, 4  
 principe d’équivalence, 7  
 principe d’incertitude, 24  
 principe de correspondance, 17

- principe de la mesure, 19
- problème à deux corps, 6
  
- quantum cat map, 43
- quantum d'action, 25
  
- réduction du paquet d'onde, 19
- relativité générale, 4
- relativité restreinte, 4
- répulsion des niveaux, 53
  
- scars, 48
- symbole, 25
- systèmes intégrables, 6
  
- temps d'Ehrenfest, 28, 48
- temps d'Heisenberg, 51
- théorème d'Egorov, 27
- théorème d'équidistribution de Kronecker-Weyl, 9
- trajectoire de la particule, 4
- transformée de Fourier, 23
- transformée par ondelettes, 44
  
- unique ergodicité quantique, 47
- uniquement ergodique, 9
  
- valeur moyenne, 19

Frédéric Faure, Institut Fourier, UMR CNRS 5582, 100 rue des Maths, BP74  
38402 St Martin d'Hères  
*E-mail* : `frederic.faure@ujf-grenoble.fr`