

UNIVERSITÉ PARIS-SACLAY

ENS PARIS-SACLAY

Cours de physique non-linéaire

Mélanie LEBENTAL

Master 1 de physique fondamentale

2 février 2026

Table des matières

1	La diversité en physique non-linéaire	2
1.1	Systèmes déterministes / stochastiques	2
1.2	Systèmes linéaires / non-linéaires	3
1.3	Conclusion par l'exemple	5
2	Points fixes et cycles limites	7
2.1	Introduction aux bifurcations	7
2.2	Cycles limites	11
2.3	Théorème de Poincaré-Bendixson	15
3	Chaos et transition vers le chaos	17
3.1	Exemple historique : l'attracteur de Lorenz	17
3.2	Applications discrètes	21
3.3	Caractériser le chaos	26
3.4	Ouverture : définir des systèmes non chaotiques?	31
4	Introduction au chaos quantique et à la physique semi-classique	33
4.1	Méthode WKB et fonctions d'onde	34
4.2	Formule de trace	37
4.3	Matrices aléatoires	49
A	Annexe au chapitre 4	55
A.1	Variables angle-action	55
A.2	Méthode de la phase stationnaire	55
A.3	La fonction de Green	57
A.4	Le propagateur	59

Introduction

Ce "poly" n'a pas vocation à remplacer le cours mais à le compléter, par exemple en précisant certaines définitions qu'il n'est pas aisé d'explicitier suffisamment en amphithéâtre. Certains chapitres ne pourront peut être pas être traités intégralement en cours par manque de temps. Ce poly permettra de les compléter pour les étudiants curieux.

Le terme "chaos" est employé couramment, même dans un contexte non-scientifique. L'objectif de ce cours est de clarifier son sens et de démythifier la physique qui s'y rattache : des systèmes très simples peuvent présenter un comportement chaotique. Nous verrons qu'il existe des outils pour caractériser ce chaos et lui donner un sens précis. Le dernier chapitre est une introduction au chaos quantique, c'est-à-dire aux propriétés d'un système ondulatoire dont l'équivalent classique est chaotique. Mis à part ce dernier chapitre, toute la physique traitée dans les autres chapitres est purement classique.

Chapitre 1

La diversité en physique non-linéaire

La physique non-linéaire est un domaine trop vaste pour être parcouru dans ce cours de 13 heures. Ce premier chapitre a pour objet de donner un bref aperçu de cette diversité. Dans les chapitres suivants, nous nous concentrerons sur quelques aspects liés au chaos déterministe.

1.1 Systèmes déterministes / stochastiques

1.1.1 Chaos et systèmes déterministes

Dans ce cours, nous étudierons seulement des systèmes déterministes, car c'est le cadre le plus simple pour aborder le chaos. Il s'agit de modéliser le système physique étudié par une ou plusieurs équations différentielles de la forme $\dot{x} = f(x, t)$. Alors le théorème de Cauchy-Lipschitz affirme l'existence d'une unique solution maximale $x(t)$ pour chaque condition initiale fixée. Si la condition initiale reste la même, la solution reste aussi identique. Le chaos peut apparaître car il est impossible de reproduire exactement la même condition initiale de manière expérimentale ou numérique. Il existe toujours une incertitude sur la position initiale. Or pour certains systèmes instables, un changement infime de la condition initiale peut conduire à une solution très différente. Cette sensibilité à la condition initiale est appelée "chaos". D'un point de vue théorique, pour une condition initiale fixée, la solution est toujours la même : elle est parfaitement déterminée et reproductible. C'est pourquoi le chaos qui apparaît dans cette situation est appelé **chaos déterministe**.

1.1.2 Systèmes stochastiques

Le domaine de la physique non-linéaire est beaucoup plus vaste que les seuls systèmes déterministes et comprend en particulier les systèmes stochastiques. Le système physique est alors modélisé par une ou plusieurs équations différentielles auxquelles on ajoute un bruit, appelé **processus stochastique**. Pour une même condition initiale, il existe alors différentes solutions suivant la réalisation du bruit. Les outils théoriques et expérimentaux à mettre en œuvre sont assez différents de ceux que nous étudierons dans ce cours. Voici quelques illustrations :

— L'équation KPZ, du nom de Kardar, Parisi et Zhang qui l'ont proposée en

1986¹ pour décrire la croissance d'une interface, est une équation de Langevin :

$$\frac{\partial h(\vec{r}, t)}{\partial t} = \nu \Delta h + \frac{\lambda}{2} (\vec{\nabla} h)^2 + \eta(\vec{r}, t) \quad (1.1)$$

où h est la hauteur de l'interface et η un processus stochastique. Le terme en laplacien qui est linéaire représente la diffusion. Le terme $(\vec{\nabla} h)^2$ est l'ordre le plus bas de non-linéarité. Il conduit à une croissance de l'interface très différente qui est plus proche des phénomènes observés dans la nature.

- Les marchés financiers. Ce domaine a été initié vers 1900 par le français Louis Bachelier qui propose un processus gaussien, purement aléatoire. Dans les années 1950, les économistes Markowitz et Samuelson appliquent ces théories pour la modélisation des risques financiers. C'est surtout Benoît Mandelbrot qui en 1962 utilise les moyens informatiques d'IBM pour analyser les propriétés statistiques des données issues des marchés financiers, en particulier le cours du coton. Il s'intéresse entre autres à l'échelle d'observation. Nous le reverrons au chapitre 3 dans le cadre des fractales.
- Un électroencéphalogramme permet d'enregistrer l'activité du cerveau en posant plusieurs électrodes sur la tête du patient. Lors d'une crise d'épilepsie, les signaux sont fortement modifiés. Les études actuelles s'attachent à analyser leurs propriétés statistiques afin d'anticiper les crises. Des études similaires sont aussi en cours pour les électrocardiogrammes (signaux électriques du cœur).
- Cryptographie par laser. La lumière émise par un laser peut présenter des propriétés statistiques appropriées pour la cryptographie². En général on utilise des diodes lasers avec une cavité externe qui renvoie l'émission dans la cavité laser avec un retard. En jouant sur les différentes constantes de temps, le système peut se révéler instable.
- L'étude de la turbulence dans l'eau, l'air ou les plasmas peut s'effectuer à partir d'équations déterministes ou de modèles stochastiques. Elle est d'importance primordiale pour le fonctionnement de quantité d'appareils et pour notre compréhension de l'atmosphère et des océans. Je vous propose l'exemple de la tache rouge de Jupiter, découverte par Cassini en 1665, qui change de forme, de couleur et de vitesse au fil des années et qui semble rétrécir.

1.2 Systèmes linéaires / non-linéaires

Expérience du couplage des métronomes. Deux métronomes pas trop lourds sont placés sur un skateboard léger constitué d'une planchette en bois posée sur deux canettes vides. D'abord, on place les métronomes sur le sol (donc ils ne sont pas couplés) et on écoute les battements quand ils ne sont pas réglés au même tempo. Ensuite, les métronomes sont posés sur le skateboard et lancés en décalés. Au bout de quelques minutes, on constate qu'ils se sont synchronisés. J'utilise la graduation 200 et l'autre métronome est décalé d'une demi-graduation. Suivant la nature du sol sur lequel roulent les canettes, la synchronisation est en phase ou en opposition de phase. Cette

1. Kardar, Parisi et Zhang, *Dynamic scaling of growing interfaces*, Physical Review Letters, vol. 56, 889 (1986).

2. Cet article propose une revue sur le sujet : M. Sciamanna et K. A. Shore, *Nature Photonics*, vol. 9, p. 151 (2015).

expérience est issue de l'article "Synchronization of metronomes" de James Pantaleone, *American Journal of Physics*, vol.70, page 992 (2002). Si ce système était linéaire, il ne pourrait pas y avoir d'interaction entre les métronomes réglés à des fréquences différentes.

1.2.1 Système linéaire et transformée de Fourier

Un système linéaire présente l'avantage d'être étudiable par transformée de Fourier. Par exemple, considérons l'équation différentielle d'un oscillateur forcé :

$$m\ddot{x} = -kx + f(t) \quad (1.2)$$

Si x est suffisamment régulière, ce que l'on peut raisonnablement supposer en physique, alors elle peut s'écrire comme la transformée de Fourier d'une fonction $X(\omega)$:

$$x(t) = \int X(\omega) e^{i\omega t} d\omega \quad (1.3)$$

On peut calculer simplement les dérivations temporelles :

$$\ddot{x}(t) = \int X(\omega) \frac{d^2 e^{i\omega t}}{dt^2} d\omega = - \int \omega^2 X(\omega) e^{i\omega t} d\omega \quad (1.4)$$

ainsi que l'équation différentielle (1.2) :

$$\int [-m\omega^2 X(\omega) + kX(\omega) - F(\omega)] e^{i\omega t} d\omega = 0 \quad (1.5)$$

Le membre de gauche est la transformée de Fourier inverse de la fonction $-m\omega^2 X(\omega) + kX(\omega) - F(\omega)$, or elle est identiquement nulle, comme le montre le membre de droite, c'est donc la fonction nulle :

$$-m\omega^2 X(\omega) + kX(\omega) - F(\omega) = 0 \quad (1.6)$$

Ceci permet d'obtenir facilement l'amplitude en fonction de la pulsation

$$X(\omega) = \frac{F(\omega)/m}{\omega_0^2 - \omega^2} \quad (1.7)$$

avec $\omega_0^2 = k/m$. Cette méthode n'est pas utilisable avec une équation non-linéaire comme celle du pendule paramétrique :

$$m\ddot{x} = -k(t)x(t) + f(t) \quad (1.8)$$

1.2.2 Régime transitoire

La transformée de Fourier est un outil efficace, mais elle évacue la question du régime transitoire. Prenons pour exemple l'équation du pendule avec frottements fluides :

$$\ddot{x} = -\gamma\dot{x} - \omega_0^2 x + f(t) \quad (1.9)$$

La solution générale est la somme de la solution homogène (ie. avec $f = 0$) et d'une solution particulière qui est justement ce qu'on obtient avec la transformée de Fourier. La solution homogène correspond au régime transitoire. Elle présente ou non des oscillations suivant le signe de $\gamma - 2\omega_0$, mais elle est toujours amortie par un facteur $e^{-\gamma t/2}$. Si on attend suffisamment longtemps (typiquement pour $t > \gamma$), il ne reste plus que la solution particulière issue de la transformée de Fourier.

Il est possible d'utiliser la transformée de Laplace qui est proche de la transformée de Fourier et permet de prendre en compte des conditions aux limites temporelles.

1.2.3 Résolution par la fonction de Green

Une équation différentielle linéaire peut être résolue par la méthode de la fonction de Green. C'est un outil plus puissant que la transformée de Fourier, mais plus difficile à manipuler. Nous la retrouverons au chapitre 4.

Cette méthode est vue en général en L3 dans le cours d'électromagnétisme au sujet du rayonnement dipolaire où on cherche le potentiel vecteur \vec{A} généré par des sources de courant \vec{j} qui vérifie l'équation aux sources :

$$\Delta \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{d^2 \vec{A}}{dt^2} = -\mu_0 \vec{j} \quad (1.10)$$

Reprenons l'équation de l'oscillateur

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = f(t) \quad (1.11)$$

La fonction de Green $G(t, \tau)$ est définie comme la solution de l'équation avec une source impulsionnelle :

$$\frac{d^2}{dt^2} G(t, \tau) + \omega_0^2 G(t, \tau) = \delta(t - \tau) \quad (1.12)$$

Si on connaît G , alors on peut reconstruire les solutions x avec n'importe quelle source f :

$$x(t) = \int_{\tau} G(t, \tau) f(\tau) d\tau \quad (1.13)$$

Cette solution x vérifie bien l'équation différentielle (1.11). Cette méthode n'est toutefois applicable que si l'équation différentielle est linéaire.

1.2.4 Conditions aux bords

Même si l'équation différentielle est linéaire, les instabilités et le chaos peuvent apparaître à cause des conditions aux bords. Les billards en sont une bonne illustration. Dans un billard, une particule matérielle se déplace en ligne droite et se réfléchit sur les bords de manière spéculaire (comme un rayon lumineux - choc élastique). Dans un billard circulaire, les trajectoires sont régulières, alors que dans un billard en forme de stade³, il a été montré que la dynamique de la particule est ergodique, c'est-à-dire chaotique. Nous verrons une définition précise de l'ergodicité à la fin du chapitre 3.

1.3 Conclusion par l'exemple

*Expérience d'impulsions acoustiques générées par un violon. Cette expérience a été proposée par Philippe Balcou pour sa conférence auprès des étudiants en novembre 2023 suite au prix Nobel sur les impulsions optiques attosecondes. Il s'agit d'un analogue acoustique qui reproduit les deux grands principes des expériences historiques attosecondes. Le premier élément est une **très forte non-linéarité qui génère un grand nombre d'harmoniques**. Pour le violon, cette non-linéarité provient du phénomène de stick-slip de l'archet sur la corde. Le son est capté par un microphone*

3. Le stade de Bunimovich, du nom du mathématicien qui a démontré son ergodicité, est un rectangle flanqué de deux demi-cercles.

de grande bande-passante équipé d'un ampli, dont le signal est affiché à l'oscilloscope (trace du haut sur la figure 1.1). La transformée de Fourier du signal temporel montre un nombre considérable d'harmonique de la note jouée, bien au-delà de 20 kHz qui est la limite maximale de l'audition humaine. Ensuite, on utilise la propriété que la transformée de Fourier d'un peigne de Dirac est un peigne de Dirac. En effet, les harmoniques de la note jouée créent un peigne de Dirac dans le domaine fréquentiel. Après l'application d'un filtre passe-haut par l'oscilloscope vers 8 kHz pour s'affranchir des différents bruits et de l'influence de la caisse de résonance, on voit apparaître un peigne d'impulsions dans le domaine temporel (trace du bas sur la figure 1.1).



FIGURE 1.1 – Capture d'écran d'oscilloscope. Le signal temporel du son émis par la corde frottée du violon est capté par un micro et correspond à la trace du haut en jaune. La trace du bas en blanc est ce même signal après application d'un filtre passe-haut par l'oscilloscope avec une fréquence de coupure de 8,6 kHz. Réalisation C. Lafargue et S. L'Horset.

Chapitre 2

Points fixes et cycles limites

On essaie d'identifier des propriétés génériques des équations différentielles, sans avoir à les résoudre de manière exacte. Cette méthode de travail a été initiée par Henri Poincaré (Nancy 1854, Paris 1912).

2.1 Introduction aux bifurcations

Expérience du flambage d'un bâton : Le bout de bois est vertical. On applique une force sur une extrémité. L'autre extrémité est posée sur la table. La première bifurcation est réversible : le bâton s'arrondit d'un côté. C'est une brisure de la symétrie de rotation. Si on continue à appuyer, le bâton se casse. Cette deuxième bifurcation est irréversible. L'étude de la bifurcation consiste en l'évolution de la variable θ , angle entre le bâton et la verticale, en fonction de la force exercée.

2.1.1 Exemple simple

On considère l'équation différentielle

$$\frac{dN}{dt} = aN \quad a \in \mathbb{R} \quad (2.1)$$

qui correspond, par exemple, à l'évolution d'une population de bactéries. N représente alors le nombre de bactéries. Les solutions exactes sont connues. Si $a > 0$, la population croît, $N(t) = N_0 e^{at} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \infty$. Si $a < 0$, la population décroît, $N(t) = N_0 e^{-|a|t} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0$. N_0 est la condition initiale : $N_0 = N(t=0)$.

Le **point fixe**, appelé aussi point d'équilibre ou point stationnaire, est tel que $\frac{dN}{dt} = 0$. Par la suite, on le notera avec l'indice e . Cet exemple admet un unique point fixe $N_e = 0$.

On s'intéresse à la **stabilité** du point fixe. C'est-à-dire qu'on se demande ce qui arrive à une perturbation autour du point fixe. Si elle relaxe vers le point fixe, celui-ci est dit **stable**, sinon il est dit **instable**. On écrit $N = N_e + \delta N$ et on l'injecte dans l'équation (2.1), ce qui donne $\delta N' = a \delta N$, dont la solution est $\delta N(t) = \delta N_0 e^{at}$. La perturbation est donc amplifiée si $a > 0$, système instable, et elle relaxe vers 0 si $a < 0$, système stable. On peut alors tracer le diagramme de bifurcation, c'est-à-dire le point fixe N_e en fonction du paramètre a . Les flèches indiquent si le point fixe est stable ou instable. On parle de **bifurcation** lorsque le comportement d'un système

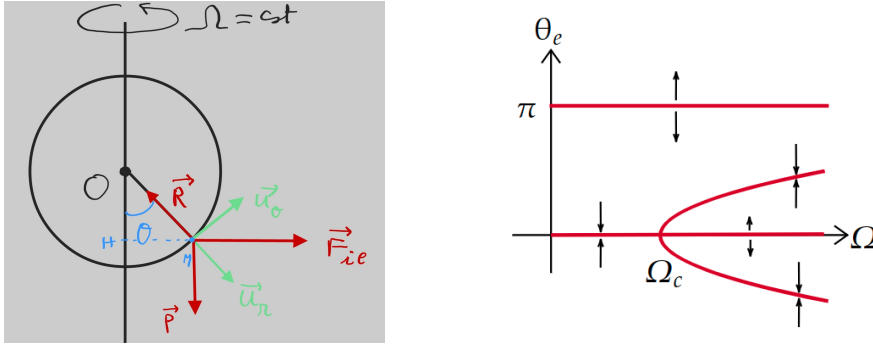


FIGURE 2.1 – Gauche : Schéma du bifurcateur traité au paragraphe 2.1.2. Les forces qui agissent sur la bille sont le poids \vec{P} , la réaction de la gouttière \vec{R} et la force d'inertie d'entraînement (= force centrifuge) \vec{F}_{ie} . Schéma de YH Melka. Droite : Diagramme de bifurcation du "bifurcateur" de la figure (a). Schéma de S Gutsche.

change radicalement en fonction d'un paramètre de contrôle. Ici elle a lieu en $a = 0$: le point fixe était stable pour $a < 0$ et devient instable pour $a > 0$.

2.1.2 La bifurcation fourche sur l'exemple du "bifurcateur"

Expérience de la bille dans un anneau en rotation : L'appellation "bifurcateur" vient des agrégatifs. Il s'agit d'un anneau avec une gouttière intérieure dans laquelle peut rouler une bille. L'anneau est mis en rotation autour d'un axe vertical à la vitesse Ω . La position de la bille est mesurée par l'angle θ avec l'axe vertical. Les notations sont rappelées à la figure 2.1. Quand l'anneau est immobile $\Omega = 0$, la bille est en bas $\theta = 0$. Tant que Ω reste inférieur à une vitesse critique Ω_c , la bille reste à $\theta = 0$. Pour $\Omega > \Omega_c$ la position d'équilibre de la bille est $\theta \neq 0$. On constate qu'il y a une brisure de symétrie : la bille part d'un côté ou de l'autre.

On souhaite trouver la position d'équilibre de la bille en fonction de la vitesse de rotation. On écrit le principe fondamental de la dynamique dans le référentiel de l'anneau qui n'est pas galiléen, pour la bille de masse m qui est soumise à son poids, à la réaction de l'anneau et à la force centrifuge. On projette cette équation sur \vec{u}_θ pour s'affranchir de la réaction de l'anneau. La bille est assujétie à se déplacer dans l'anneau de rayon R :

$$mR\ddot{\theta} = -mg \sin \theta + mR \sin \theta \Omega^2 \cos \theta \quad (2.2)$$

Comme on cherche la position d'équilibre de la bille, son accélération est nulle :

$$0 = -mg \sin \theta_e + mR \sin \theta_e \Omega^2 \cos \theta_e \quad (2.3)$$

Cette équation possède plusieurs solutions. Si $\sin \theta_e = 0$, alors $\theta_e = 0$ (bille en bas) ou $\theta_e = \pi$ (bille en haut). Si $\sin \theta_e \neq 0$, alors on peut diviser l'expression (2.3) par $\sin \theta$ et on obtient :

$$\cos \theta_e = \frac{g}{R\Omega^2} \quad (2.4)$$

qui n'a de sens que si Ω est suffisamment grand pour que $\cos \theta_e$ soit inférieur à 1. Ceci conduit à la vitesse de rotation critique : $\Omega_c = \sqrt{g/R}$. On obtient donc le diagramme de bifurcation tracé à droite de la figure 2.1 : pour $\Omega < \Omega_c$, les seules solutions sont

0 et π , et les solutions $\pm \arccos(\frac{g}{R\Omega^2})$ s'ajoutent pour $\Omega > \Omega_c$. La bifurcation a lieu en $\Omega = \Omega_c$. Pour $R = 10$ cm et $g = 10$ m.s⁻², la vitesse critique vaut $\Omega_c = 10$ rd/s, soit 100 tour/minute, ce qui semble cohérent avec l'expérience.

On s'intéresse à la forme des solutions au voisinage de la bifurcation, c'est-à-dire pour θ_e petit. On part de l'équation (2.4), en utilisant que le membre de gauche s'écrit $\cos \theta_e \simeq 1 - \theta_e^2/2$:

$$\begin{aligned}\theta_e^2 &= 2\left(1 - \frac{\Omega_c^2}{\Omega}\right) \\ \theta_e &= \pm\sqrt{2}\sqrt{1 - \frac{\Omega_c^2}{\Omega}} = \pm\sqrt{2}\sqrt{\frac{\Omega^2 - \Omega_c^2}{\Omega^2}} = \pm\sqrt{2}\sqrt{\frac{(\Omega - \Omega_c)(\Omega + \Omega_c)}{\Omega^2}} \simeq \pm 2\sqrt{\frac{\Omega - \Omega_c}{\Omega}} \\ \theta_e &= \pm 2\sqrt{\epsilon} \quad \text{avec} \quad \epsilon = \frac{\Omega - \Omega_c}{\Omega}\end{aligned}\tag{2.5}$$

ϵ est un paramètre normalisé qui correspond à l'écart à la vitesse critique Ω_c . On retrouve une forme générique de bifurcation $\theta_e \propto \pm\sqrt{\epsilon}$.

Qu'en est-il de la stabilité de ces solutions d'équilibre? L'équation dynamique (2.2) fait apparaître une dérivée seconde et non une dérivée première. La méthode vue précédemment n'est donc pas directement applicable. Il est possible d'introduire des frottements fluides de la forme $\gamma\dot{\theta}$ et supposer qu'ils sont très grands devant le terme d'inertie $mR\ddot{\theta}$. Mais c'est une méthode *ad hoc* qui n'est pas vraiment justifiable. Nous verrons juste après comment procéder de manière systématique.

2.1.3 Forme normale

Afin de clarifier les discussions, il est plus pratique d'utiliser une **forme normale**, c'est-à-dire de se ramener systématiquement au même type d'équation. Ici il s'agit d'une équation différentielle du premier degré

$$\dot{x} = f(x)\tag{2.6}$$

x est un scalaire et $\dot{x} \equiv dx/dt$. f une fonction dérivable qui ne dépend pas explicitement du temps. On verra comment introduire le temps à la fin de cette partie. Les points fixes correspondent aux solutions de l'équation $\dot{x} = 0$, c'est-à-dire $f(x_e) = 0$. Pour connaître leur stabilité, il faut considérer une petite perturbation δx au voisinage du point fixe, $x = x_e + \delta x$, puis remplacer dans l'équation (2.6) :

$$\dot{x}_e + \delta\dot{x} = f(x_e + \delta x)\tag{2.7}$$

Par définition du point fixe $\dot{x}_e = 0$. On développe f autour de x_e :

$$\delta\dot{x} = f(x_e) + \delta x \frac{df}{dx}(x_e) + o(\delta x)\tag{2.8}$$

Par définition du point fixe, $f(x_e) = 0$, ce qui conduit à

$$\delta\dot{x} = \delta x \frac{df}{dx}(x_e)\tag{2.9}$$

La solution de cette équation est

$$\delta x(t) = \delta x_0 e^{\frac{df}{dx}(x_e)t}\tag{2.10}$$

La perturbation δx diverge si $\frac{df}{dx}(x_e)$ est positive et elle tend vers 0 si $\frac{df}{dx}(x_e)$ est négative. La stabilité du point fixe dépend donc du signe de la dérivée de f en ce point.

Pour un système dynamique avec une dérivée seconde, comme le bifurcateur du paragraphe précédent, $\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = 0$, on introduit $v = \dot{x}$, ce qui conduit au système d'équations différentielles d'ordre 1 :

$$\begin{cases} \dot{x} = f_x(x, v) = v \\ \dot{v} = f_v(x, v) = -\gamma v - \omega_0^2 x \end{cases} \quad (2.11)$$

C'est un traitement analogue à celui des systèmes hamiltoniens :

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \end{cases} \quad (2.12)$$

Si on veut introduire le temps, par exemple pour un forçage, $\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega^2 x = A \cos \omega t$, alors on ajoute une troisième variable $x_3 = t$ et on conserve les deux premières $x_1 = x$ et $x_2 = v$, ce qui conduit au système

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = v \\ \dot{x}_2 = -\gamma x_2 - \omega_0^2 x_1 + A \cos(\omega x_3) \\ \dot{x}_3 = 1 \end{cases} \quad (2.13)$$

Il existe toute une zoologie des bifurcations très bien décrite dans le livre de Strogatz.

- **Bifurcation nœud-selle** : $\dot{x} = r + x^2$, où r est un paramètre.
- **Bifurcation "ciel bleu"** (blue sky) : $\dot{x} = r - x^2$. Son appellation vient de ce que les points fixes apparaissent pour r positif alors qu'il n'en existe pas pour r négatif. Ils apparaissent de rien.
- **Bifurcation transcritique** : $\dot{x} = r x - x^2$. Il y a deux points fixes pour $r < 0$ et aussi deux points fixes pour $r > 0$, mais c'est comme s'ils échangeaient leur stabilité en $r = 0$. Une bifurcation n'est pas forcément un endroit où il y a création de point fixe, mais de manière plus générale, là où il se passe quelque chose.
- **Bifurcation fourche supercritique** : $\dot{x} = r x - x^3$. C'est le cas de l'anneau du paragraphe 2.1.2 quand on développe le sinus ou cosinus. Si on reprend l'analogie avec un système hamiltonien, équation (2.12), alors f est la dérivée de l'énergie. Si le système a une symétrie qui rend l'énergie paire (fond d'un puits par exemple), alors f est impair. La bifurcation fourche supercritique est la forme de f la plus simple qui permet d'en rendre compte.
- **Bifurcation fourche souscritique** : $\dot{x} = r x + x^3$. C'est la même que la supercritique, mais à l'envers. Les points fixes non triviaux sont instables.
- **Bifurcation fourche souscritique stabilisée** : $\dot{x} = r x + x^3 - x^5$. Il existe des points fixes non triviaux stables pour certaines valeurs du paramètres r , mais il apparaît un hysteresis.
- **Bifurcation imparfaite**. C'est une dénomination générale qui signifie qu'on brise la symétrie en ajoutant une constante h , par exemple $\dot{x} = h + r x - x^3$. L'espace des paramètres est désormais de dimension 2 et il peut se passer des phénomènes nouveaux. C'est, en particulier, le domaine de la *théorie des catastrophes* qui a été créée par René Thom (Montbéliard 1923, Bures-sur-Yvette 2002), médaille Fields 1958.

2.2 Cycles limites

A la partie 2.1.2, nous nous sommes intéressés aux solutions stationnaires du système différentiel. Il existe d'autres ensembles de solutions intéressants : les cycles, qui sont des solutions oscillantes (et donc pas stationnaires) et nécessitent au moins deux variables.

2.2.1 Bifurcation de Hopf

La bifurcation de Hopf est l'exemple le plus simple où l'évolution d'un paramètre transforme le point fixe $(0, 0)$ en solution oscillante. L'équation différentielle s'écrit

$$\dot{z} = \mu z - z|z|^2 \quad \text{avec} \quad \mu = \mu_r + i\mu_i \quad (2.14)$$

Si on écrit $z = \rho e^{i\theta}$ dans (2.14) et si on sépare les parties réelle et imaginaire, alors on obtient le système suivant

$$\dot{\theta} = \mu_i = \text{constante} \quad (2.15)$$

$$\dot{\rho} = \mu_r \rho - \rho^3 \quad (2.16)$$

L'amplitude ρ présente une bifurcation fourche de paramètre de contrôle μ_r . Pour $\mu_r < 0$, la seule solution stationnaire est $\rho = 0$. Or $f'(\rho_e = 0) = \mu_r < 0$, donc cette solution est stable. L'amplitude de z est nulle donc il n'y a pas de cycle. Pour $\mu_r > 0$, la solution stationnaire $\rho_e = 0$ est instable. Par contre il existe d'autres solutions $\rho_e = \pm\sqrt{\mu_r}$ qui sont stables. L'amplitude de z est non nulle et d'après (2.15), son argument tourne à vitesse constante. Lorsque μ_r évolue, on passe d'une solution nulle à une solution qui décrit un cercle.

Les applications de la bifurcation de Hopf sont nombreuses. Parmi les plus célèbres, on peut citer les réactions chimiques oscillantes où les concentrations de deux réactifs oscillent. On écrit alors $z = x + iy = [A] + i[B]$. Des oscillations apparaissent parce que plusieurs réactions chimiques sont en compétition avec des constantes de temps différentes. La plus célèbre réaction chimique oscillante est celle de Belousov-Zhabotinsky. La solution passe du rouge au bleu sur une période d'une minute durant plusieurs heures suivant la quantité de réactifs au départ. Belousov est un biochimiste russe qui a essayé de publier sa découverte dans les années 50. Zhabotinsky est l'étudiant à qui on a demandé de vérifier cette expérience au début des années 60.

Réaction oscillante de Briggs-Rauscher : Le protocole expérimental est décrit sur ce site <http://www.geocities.ws/profmokeur/chimie/osc.htm> . On voit des oscillations entre I^- qui est incolore et I^2 qui est ambré. A la fin I^- et I^2 se couplent à l'amidon et rendent la solution bleu foncé. Cette expérience, sans être dangereuse, doit être néanmoins conduite avec précaution à cause de l'iode et de l'eau oxygénée.

Définition d'un cycle limite : Un cycle limite est une trajectoire fermée, périodique et isolée. C'est-à-dire que les trajectoires proches sont soit attirées, soit repoussées, mais ne restent pas à proximité.

Dans le cas de la bifurcation de Hopf. Pour $\mu_r < 0$, chaque condition initiale conduit à une trajectoire qui tourne en spiralanant vers 0. Pour $\mu_r > 0$, la spirale sort de 0 qui est instable et tend vers le cercle limite de rayon μ_r .

2.2.2 Oscillateur de van der Pol

L'oscillateur de Van der Pol est un exemple important conduisant à un cycle limite, car l'entretien des oscillations n'est pas généré par un forçage (second membre de l'équation différentielle). L'équation s'écrit

$$\ddot{x} - \mu \left(1 - \frac{x^2}{x_0^2}\right) \dot{x} + \omega_0^2 x = 0 \quad \mu \in \mathbb{R} \quad (2.17)$$

Le terme de frottement $\mu\dot{x}$ devient un terme d'amplification pour $\mu > 0$. Balthasar Van der Pol avait proposé cette équation au début du XX^e siècle pour des oscillations auto-entretenuës dans des circuits électriques. Dans les expériences, cet apport d'énergie est fourni par l'amplificateur opération (AO). Cette équation rend compte aussi du phénomène de stick-slip (archet sur une corde de violon, grincement d'une craie) ou d'oscillations mécaniques comme celles du pont de Takoma (1940).

On se place dans le cas $\mu > 0$, c'est-à-dire qu'il y a du gain ($-\mu\dot{x}$) et des frottements non-linéaires ($+\frac{x^2}{x_0^2}\dot{x}$). On écrit le système d'équations pour $(x, v \equiv \dot{x})$:

$$\begin{cases} \dot{x} = v \\ \dot{v} = \mu \left(1 - \frac{x^2}{x_0^2}\right) v - \omega_0^2 x \end{cases} \quad (2.18)$$

Il existe un point fixe trivial $(0, 0)$. On étudie sa stabilité au voisinage $\ddot{x} - \mu\dot{x} + \omega_0^2 x = 0$. C'est une équation différentielle linéaire du second ordre à coefficients constant et sans second membre. Les solutions sont donc de la forme $x(t) = Ae^{r_+t} + Be^{r_-t}$ où r_{\pm} est solution de l'équation $r^2 - \mu r + \omega_0^2 = 0$. Ce qui conduit à $r_{\pm} = (\mu \pm \sqrt{\Delta})/2$. Suivant le signe du discriminant $\Delta = \mu^2 - 4\omega_0^2$, le comportement des solutions est différent.

- Si $\Delta > 0$, r_{\pm} est réel et la solution explose. Le point fixe est appelé un **nœud**.
- Si $\Delta < 0$, r_{\pm} sont complexes conjugués. La solution est de la forme $x(t) = e^{\mu t/2}(A \cos \sqrt{\Delta}t/2 + B \sin \sqrt{\Delta}t/2)$. Elle explose aussi, mais en spiralant autour de 0. Le point fixe est appelé un **foyer**.

Il est naturel que le point fixe $(0, 0)$ soit instable puisque le terme de gain n'est pas compensé par des pertes. Le terme en $\frac{x^2}{x_0^2}$ permet de compenser l'explosion et de stabiliser la solution sur un cycle limite. On peut montrer que ce cycle limite est unique et stable.

Remarque : Il s'agit d'un système à deux dimensions. D'après le théorème de Poincaré-Bendixon (cf. partie 2.3), il est impossible d'avoir du chaos.

Expérience d'électronique. La maquette a été fabriquée à partir du livre de Michel Krob "Electronique expérimentale". La résistance non-linéaire est fabriquée à partir d'un amplificateur opérationnel. Son potentiel non-linéaire est mis en évidence en observant la déformation de la sinusoïde d'entrée. Sa transformée de Fourier présente un pic aux fréquences ω et ω^3 : $4(\cos \omega t)^3 = \cos 3\omega t + 3 \cos \omega t$. En mode XY sur l'oscilloscope, on regarde la tension de sortie Vs et sa dérivée Vu. Avec la résistance non-linéaire, on observe un cycle (pas circulaire). Quand on retire la résistance non-linéaire, la courbe spirale vers 0.

2.2.3 Oscillateur de Duffing

L'oscillateur de Duffing s'écrit :

$$\ddot{x} + r\dot{x} + \omega_0^2 x + \beta x^3 = A \cos \omega t \quad (2.19)$$

L'oscillateur de Duffing diffère de celui de Van der Pol par plusieurs aspects :

- Il présente un terme de perte $r\dot{x}$ avec un coefficient constant r .
- Il présente une non-linéarité sur le terme correspondant au potentiel βx^3 .
- L'apport d'énergie s'effectue par forçage $A \cos \omega t$. L'ajout d'une dimension supplémentaire permet d'avoir éventuellement du chaos, d'après le Théorème de Poincaré-Bendixon (cf. partie 2.3).

Sans forçage, l'équation de Duffing s'écrit :

$$\ddot{x} + r\dot{x} + \omega_0^2 x + \beta x^3 = 0 \quad (2.20)$$

On revient à deux dimensions, donc pas de chaos possible. C'est l'équation d'un pendule non-linéaire. Il existe une solution périodique dont la période dépend de l'amplitude de la condition initiale. Cette période peut se calculer par une méthode de perturbation dite de Poincaré-Lindstedt. Pour simplifier, on supprime le terme de frottement. A l'ordre 0, on résout l'équation $\ddot{x} + \omega_0^2 x = 0$, dont la solution est de période ω_0 et d'amplitude A . A l'ordre 1, pour $\beta = 1$, la pulsation devient $\omega = \omega_0 + \omega_1$ avec $\omega_1 = \frac{3A^2}{8\omega_0^3}$, cf. TD.

Toujours sans forçage, nous allons nous intéresser à la stabilité des points fixes. On ré-écrit l'équation de Duffing sous forme normale de variables ($x_1 = x, x_2 = \dot{x}$) :

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = -rx_2 - \omega_0^2 x_1 - \beta x_1^3 \end{cases} \quad (2.21)$$

Ce système admet trois points fixes. Le point fixe trivial (0,0) et deux points fixes tels que $x_2 = 0$ et $x_1^2 = -\frac{\omega_0^2}{\beta}$. Ils existent donc si $\frac{\omega_0^2}{\beta} < 0$ et s'écrivent alors $x_1^e = \pm \sqrt{|\frac{\omega_0^2}{\beta}|}$. Pour étudier la stabilité du point fixe (x_1^e, x_2^e) , on constate que le système (2.21) à la forme

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = f(x_1, x_2) \\ \dot{x}_2 = g(x_1, x_2) \end{cases} \quad (2.22)$$

On se place à proximité du point fixe :

$$\begin{cases} x_1 = x_1^e + \delta x_1 \\ x_2 = x_2^e + \delta x_2 \end{cases} \quad (2.23)$$

puis on injecte dans (2.22) et on développe f et g pour δx_1 et δx_2 petits :

$$\begin{cases} \dot{x}_1^e + \delta \dot{x}_1 = f(x_1^e, x_2^e) + \delta x_1 \left. \frac{\partial f}{\partial x_1} \right|_{(x_1^e, x_2^e)} + \delta x_2 \left. \frac{\partial f}{\partial x_2} \right|_{(x_1^e, x_2^e)} \\ \dot{x}_2^e + \delta \dot{x}_2 = g(x_1^e, x_2^e) + \delta x_1 \left. \frac{\partial g}{\partial x_1} \right|_{(x_1^e, x_2^e)} + \delta x_2 \left. \frac{\partial g}{\partial x_2} \right|_{(x_1^e, x_2^e)} \end{cases} \quad (2.24)$$

Par définition du point fixe $\dot{x}_1^e = f(x_1^e, x_2^e) = 0$ et $\dot{x}_2^e = g(x_1^e, x_2^e) = 0$, ce qui donne :

$$\begin{cases} \delta \dot{x}_1 = \delta x_1 \left. \frac{\partial f}{\partial x_1} \right|_{(x_1^e, x_2^e)} + \delta x_2 \left. \frac{\partial f}{\partial x_2} \right|_{(x_1^e, x_2^e)} \\ \delta \dot{x}_2 = \delta x_1 \left. \frac{\partial g}{\partial x_1} \right|_{(x_1^e, x_2^e)} + \delta x_2 \left. \frac{\partial g}{\partial x_2} \right|_{(x_1^e, x_2^e)} \end{cases} \quad (2.25)$$

Ce système se ré-écrit sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \delta \dot{x}_1 \\ \delta \dot{x}_2 \end{pmatrix} = J \begin{pmatrix} \delta x_1 \\ \delta x_2 \end{pmatrix}$$

où J est par définition la matrice jacobienne de la fonction $F = (f, g)$. La stabilité du point fixe dépend des valeurs propres λ_{uv} de J . Dans la base diagonale (u, v) , le système (2.2.3) s'écrit

$$\begin{cases} \delta \dot{u} = \lambda_u \delta u \\ \delta \dot{v} = \lambda_v \delta v \end{cases} \quad (2.26)$$

On constate que si $\lambda_u < 0$ la direction u est stable, alors que si $\lambda_u > 0$ la direction u est instable. De même pour v . Dans le cas de l'oscillateur de Duffing, la matrice jacobienne s'écrit

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\omega_0^2 - 3\beta x_1^2 & -r \end{pmatrix}$$

Pour le point fixe $(0,0)$, les valeurs propres sont $\lambda_{\pm} = [-r \pm \sqrt{r^2 - 4\omega_0^2}]/2$. Si $r < 2\omega_0$, les valeurs propres sont complexes conjuguées. Comme la partie réelle $-r/2$ est négative, les perturbations spiralent vers 0. Le point fixe $(0,0)$ est stable. Si $r > 2\omega_0$, les valeurs propres sont réelles et toutes les deux négatives. Les perturbations vont directement vers 0. Les directions sont stables. Par conséquent le point fixe $(0,0)$ est toujours stable tant que $r > 0$ (c'est-à-dire qu'il y a des frottements).

Si $\omega_0^2 > 0$ et $\beta < 0$, il existe deux autres points fixes. On montre de la même manière qu'ils sont instables. Ce n'est pas intéressant parce que le point fixe trivial reste stable, donc le système va s'y installer.

La situation intéressante est le cas où $\omega_0^2 < 0$ et $\beta > 0$ car le point fixe $(0,0)$ est instable alors que les deux autres sont stables. C'est elle qui est utilisée dans l'expérience.

Expérience d'électronique. La partie non-linéaire de la maquette est la même que pour l'oscillateur de Van der Pol. Comme on ajoute du forçage, on rajoute une troisième dimension (le temps) et on peut voir apparaître du chaos. On se met sur un point fixe et on augmente le forçage. On contrôle sur la transformée de Fourier. Quand le forçage augmente, on voit un doublement de période, puis un autre, parfois on bascule sur l'autre point fixe, puis chaos. Dans ce cas, on voit un spectre continu sur la transformée de Fourier. Une trajectoire en trois dimensions est tracée dans la notice de la maquette :

*<https://media.educ.space/labmedias/50/14/501453a53909efb197f8db45cfd13d8970dd3545.pdf>
Sa structure est compliquée. On constate qu'elle ne se coupe pas elle-même.*

Signes des valeurs propres de la jacobienne. Pour déterminer le signe des valeurs propres λ_+ et λ_- de la jacobienne, et donc la stabilité du point fixe, il suffit d'étudier le signe de $\text{tr}J = \lambda_+ + \lambda_-$ et de $\det J = \lambda_+ \lambda_-$, car elles sont soit réelles, soit complexes conjuguées :

- Si les valeurs propres sont réelles, alors
 - si $\det J < 0$ les valeurs propres sont de signes différents, donc l'une d'elle est positive et une direction est instable.
 - si $\det J > 0$ les valeurs propres sont de mêmes signes. Si $\text{tr}J > 0$, elles sont toutes les deux positives et le système est instable.

- Si les valeurs propres sont complexes conjuguées, elles s'écrivent $\lambda_{\pm} = a \pm ib$, avec $a, b \in \mathbb{R}$. Alors $\det J = a^2 + b^2 > 0$ et la stabilité est déterminée par $\text{tr} J = 2a$, comme pour le cas précédent avec les valeurs propres réelles.

Conclusion A deux dimensions, les trajectoires peuvent partir à l'infini ou alors converger vers des points fixes ou des cycles limites. Leur stabilité s'obtient à partir de la matrice jacobienne. Pour calculer la jacobienne ou compter le nombre de dimensions, il faut mettre la ou les équations différentielles sous forme normale, c'est-à-dire sous la forme d'un système d'équations différentielles du premier ordre. Par contre à trois dimensions, il est possible que du chaos apparaisse.

2.3 Théorème de Poincaré-Bendixson

Les mathématiciens ne savent pas prédire quand un système présentera du chaos. Par contre, ils peuvent affirmer quand il est sûr que du chaos n'apparaîtra pas. Ainsi le théorème de Poincaré-Bendixson affirme-t-il qu'il n'y a pas de chaos à deux dimensions : si la trajectoire ne part pas à l'infini et si le système ne possède pas de point fixe¹, alors la trajectoire tend vers un cycle limite.

L'article de Serge Cantat² présente les étapes importantes de la démonstration. Elle est traitée complètement dans le livre de Hirsch, Smale et Devaney³. Notre objectif n'est pas d'expliciter la démonstration mathématique, mais d'identifier les éléments qui distinguent la dimension 2 et qui empêchent l'apparition de chaos.

2.3.1 Un peu de vocabulaire

On s'intéresse à la solution d'un système différentiel, c'est-à-dire au vecteur $X(t)$ qui vérifie

$$\frac{dX}{dt} = F(X) \quad (2.27)$$

où F est une fonction continûment dérivable. On ajoute aussi une condition initiale.

Le théorème de Cauchy-Lipschitz porte sur les solutions d'un système d'équations différentielles. Il affirme l'existence et l'**unicité** d'une solution maximale⁴ pour tout point initial donné. Donc deux solutions différentes ne peuvent pas se couper. **Une même solution ne peut pas se couper**, sauf si elle est périodique. C'est l'argument décisif qui permet de conclure le théorème de Poincaré-Bendixson.

1. Si le système possède des points fixes, il peut exister des trajectoires qui vont d'un point fixe à un autre (appelée orbite hétérocline) ou qui partent d'un point fixe en $t = -\infty$ et retournent au même point fixe en $t = +\infty$ (appelée orbite homocline).

2. Serge Cantat, *Théorème de Poincaré-Bendixson*, Journal de maths des élèves, vol. 1, page 140 (1995).

3. M. Hirsch, S. Smale et R. Devaney, *Differential equations, dynamical systems, and an introduction to chaos*, Elsevier (2013).

4. L'expression *solution maximale* signifie que cette solution existe dans un domaine le plus grand possible autour de la condition initiale.

Les trajectoires sont décrites par une application appelée le flot et notée ϕ . A tout point initial, elle associe le point de cette trajectoire après un temps t :

$$\phi_t(X_0) = X(t) \quad (2.28)$$

C'est donc une application à deux variables, le temps et la condition initiale. Une trajectoire γ est alors l'ensemble image du flot :

$$\gamma(X_0) = \{\phi_t(X_0), t \in \mathbb{R}\} \quad (2.29)$$

Le théorème de Poincaré-Bendixson porte sur l'ensemble limite ω , c'est-à-dire l'ensemble des points limites d'une trajectoire donnée :

$$\omega(X_0) = \{Y | \exists (t_n) \rightarrow \infty, \phi_{t_n}(X_0) = Y\} \quad (2.30)$$

Cet ensemble peut être un point fixe, plusieurs points fixes, un cycle ou une structure plus compliquée comme un "attracteur étrange".

2.3.2 Les avantages du 2D

Le théorème de Poincaré-Bendixson fonctionne en dimension 2 parce que cette dimension est très particulière. Le théorème de Jordan semble banal, mais il est crucial : un arc fermé simple Γ sépare le plan en 2 composantes connexes⁵, intérieur et extérieur. Si la trajectoire (qui est continue) est à l'intérieur et passe à l'extérieur, elle doit couper Γ .

Ensuite l'argument utilisé pour la démonstration est la monotonie le long d'une section. C'est-à-dire qu'on considère une droite dans le plan (section) et trois instants $t_1 < t_2 < t_3$ où la trajectoire coupe cette section. Alors les points d'intersection sont dans le même ordre sur cette section, sinon la trajectoire devrait se couper elle-même. Ou alors la trajectoire est périodique.

Théorème de Poincaré-Bendixson : Un ensemble limite $\omega(X_0)$ non vide, compact⁶ d'un système dynamique C^1 (ie. F a une dérivée continue) du plan qui ne contient pas de point fixe est un cycle limite.

Remarque : $\omega(X_0)$ n'existe pas forcément, mais s'il existe et s'il est borné, c'est un point fixe ou un cycle limite. Rien d'autre⁷ à deux dimensions, en particulier il n'y a pas de chaos.

5. Une *composante connexe* signifie un domaine en un seul morceau.

6. Dans R^n , *compact* signifie fermé et borné.

7. Il est aussi possible que ce soit une orbite homocline ou hétérocline, c'est-à-dire une trajectoire qui va d'un point fixe au même point fixe ou à un autre point fixe. Mais c'est un cas rare qui ne résiste pas à de petites variations du modèle.

Chapitre 3

Chaos et transition vers le chaos

L'objectif de ce chapitre est de se doter d'outils pour définir et caractériser le chaos. En particulier, nous étudierons les applications discrètes qui ne sont pas soumises au théorème de Poincaré-Bendixson et peuvent présenter du chaos même à une dimension.

Expérience du pendule paramétrique. Il s'agit d'une petite masse suspendue à un ressort. Elle est soumise à deux mouvements typiques : un pompage suivant les changements de longueur du ressort et des oscillations pendulaires si le ressort garde une longueur constante. Ces deux mouvements se mêlent pour générer une trajectoire chaotique, c'est-à-dire non périodique et d'apparence imprévisible. Avec une condition initiale bien choisie, on peut isoler le mouvement de pompage. Pour réaliser l'expérience, il est conseillé d'utiliser une masse légère et un ressort plutôt long de faible constante de raideur. Il vaut mieux l'accrocher à une potence.

3.1 Exemple historique : l'attracteur de Lorenz

Edward Lorenz (1917 - 2008) est américain et a passé sa carrière au service de météorologie du MIT. En 1959, il étudie par ordinateur un système d'équations non-linéaires à 12 variables. Le succès auprès du grand public est dû à un titre accrocheur paru en 1972 "Le battement d'aile d'un papillon au Brésil déclenche-t-il une tornade au Texas?" Il souligne la sensibilité aux conditions initiales qui est une caractéristique essentielle d'un système chaotique.

3.1.1 Description

Le système de Lorenz est décrit en détail dans le livre de Strogatz. Il s'agit d'un problème simplifié de convection, semblable aux rouleaux de Rayleigh-Bénard (cf. TD). Le système différentiel est le suivant

$$\begin{cases} \dot{x} &= \sigma(y - x) \\ \dot{y} &= rx - y - xz \\ \dot{z} &= xy - bz \end{cases} \quad (3.1)$$

σ , r et b sont des paramètres réels et positifs. b n'a pas de nom ; il est lié à l'aspect des rouleaux. r est le nombre de Rayleigh. σ est le nombre de Prandtl, c'est-à-dire le rapport de la viscosité ν (diffusion de la quantité de mouvement) sur la diffusivité

thermique κ .

Une expérience similaire avec une roue à eau a été construite à la Cité des Sciences et de l'Industrie à la Villette, à la section Explora mathématiques. Elle est analysée dans le livre de Strogatz.

Passons à l'étude des points fixes. $(0,0,0)$ est un point fixe trivial. Il existe deux autres points fixes, nommés C_{\pm} par Lorenz. D'après l'équation sur \dot{x} , on sait qu'un point fixe doit vérifier $x = y$. Avec l'équation sur \dot{y} , on obtient $z = r - 1$, et avec l'équation sur \dot{z} , on obtient $x = \pm\sqrt{b(r-1)}$ et r doit être plus grand que 1. Il existe donc une bifurcation en $r = 1$.

Pour analyser la stabilité du point fixe $(0,0,0)$, on linéarise le système (3.1) :

$$\begin{cases} \dot{x} &= \sigma(y - x) \\ \dot{y} &= rx - y \\ \dot{z} &= -bz \end{cases} \quad (3.2)$$

On constate alors que l'équation sur \dot{z} est découplée des deux autres : elle ne dépend que de z et les autres équations ne dépendent pas de z . Comme $b > 0$, la direction z est stable. Par contre les directions x et y sont couplées. On doit calculer la matrice jacobienne correspondante :

$$J = \begin{pmatrix} -\sigma & \sigma \\ r & -1 \end{pmatrix}$$

Peu importent les valeurs propres $\lambda_{1,2}$, on ne s'intéresse qu'à leur signe.

$\det J = \sigma(1 - r) = \lambda_1 \lambda_2$, ce qui implique que pour $r > 1$, le produit des valeurs propres est négatif, donc elles sont de signes opposés : une direction est stable et l'autre instable. Pour $r < 1$, le déterminant de J est positif, donc les valeurs propres sont de même signe. $\text{Tr} J = -1 - \sigma = \lambda_1 + \lambda_2$, donc les deux valeurs propres sont négatives et les deux directions sont stables.

On montre que les points fixes C_{\pm} sont stables de $r = 1$ à une certaine valeur r_H qui dépend de σ et b . Au-delà, ils sont instables.

Lorenz a travaillé avec les paramètres $\sigma = 10$ et $b = 8/3$, ce qui donne $r_H \simeq 24,7$. Son r valait 28. Il se trouvait donc dans la région $r > r_H$ où **les trois points fixes sont instables**. Que se passe-t-il ? Il se trouve que les trajectoires ne peuvent pas partir à l'infini. On peut montrer qu'elles finissent par entrer et rester dans une sphère de la forme $x^2 + y^2 + (z - r - \sigma)^2 = K$ avec K assez grand. Chaque trajectoire est donc repoussée d'un objet instable à un autre et n'a pas le droit de se recouper. Il apparaît une structure particulière, en feuillets, appelée **attracteur étrange**. Cette dénomination a été proposée en 1971 par David Ruelle et Floris Takens.

Comment étudier une telle structure ? Souvent on trouve dans les livres et sur internet une image des "ailes". Il s'agit du tracé d'une trajectoire dans le plan $x - z$. C'est une projection. L'information sur la direction y est perdue.

On peut aussi tracer l'évolution temporelle de la variable x pour une trajectoire. On constate que le signal est apériodique. Sa transformée de Fourier montre un spectre continu, comme pour l'oscillateur de Duffing.

Lorenz a proposé une autre analyse. Il a considéré l'évolution temporelle de z le long

d'une trajectoire et numéroté les maxima locaux z_n . Puis il a tracé z_{n+1} en fonction de z_n . Il se trouve que ces points semblent s'organiser sur une courbe, mais c'est assez spécifique à ce système dynamique.

Une représentation efficace est la **section de Poincaré**. Il s'agit d'une coupe dans l'espace des phases (pas une projection).

3.1.2 Section de Poincaré

La section de Poincaré¹ est un mode de représentation des trajectoires. Au lieu de les tracer dans \mathbb{R}^3 (ou plus s'il y a davantage de variable), on décide de faire une coupe dans l'espace des phases. Il existe deux définitions de la section de Poincaré qui ne sont pas toujours équivalentes.

- Definition 1. La section de Poincaré est la représentation de la trajectoire dans un hyperplan de l'espace des phases. C'est-à-dire que pour le système de Lorenz, elle est de dimension $6 - 1 = 5$.
- Definition 2. La section de Poincaré est une section plane (de dimension 2) de la trajectoire.

Pour les billards qui sont de dimension 2, ces deux définitions sont équivalentes. En effet l'espace des phases est de dimension 4, mais l'énergie est conservée, donc il ne reste que 3 variables indépendantes. Si on considère un hyperplan, il ne reste que deux variables, comme dans la définition 2. La section de Poincaré d'un billard est donc à deux dimensions. On trace les points où la trajectoire a heurté la frontière du billard : l'impulsion transverse (ie. sinus de l'angle d'incidence) en fonction de la position curviligne sur la paroi. Pour le billard rectangulaire par exemple, certaines trajectoires n'ont que 2 points dans la section de Poincaré. Ce sont des trajectoires périodiques.

L'intérêt de la section de Poincaré est de mettre en évidence les périodicités ou quasi-périodicités. Il faut choisir une section bien adaptée afin que la trajectoire étudiée la coupe à plusieurs reprises. On peut alors construire la suite S_n des intersections de la trajectoire avec la section. La fonction g telle que $S_{n+1} = g(S_n)$ est appelée l'application de Poincaré. Cette approche permet de transformer un système différentiel continu (des trajectoires) en une application discrète. C'est pourquoi en mathématiques, l'étude des systèmes dynamiques consiste essentiellement en l'étude d'applications discrètes.

La section de Poincaré permet de visualiser la nature des trajectoires. Une trajectoire périodique apparaît comme un nombre fini de points. Pour un système intégrable, les structures sont régulières. Par contre pour un système chaotique (ergodique pour le billard stade par exemple), une seule trajectoire couvre toute la section de Poincaré. Si on veut mettre en évidence un attracteur/repousseur d'un système chaotique, il faut ajouter des pertes au système, sinon on ne voit plus rien.

3.1.3 Contraction et dilatation du flot

Dans cette partie, on s'intéresse à l'évolution d'un groupe de trajectoires proches. On considère le système

$$\dot{\vec{X}} = \vec{F}(\vec{X}) \tag{3.3}$$

1. En anglais, la section de Poincaré est aussi appelée Surface Of Section (SOS).

et un petit volume de points dans l'espace. On se demande comment évolue ce volume après un petit instant dt . Pour le savoir, il suffit de considérer le signe de $\text{div}F$. Si $\text{div}F < 0$, alors le volume diminue. On dit qu'il y a **contraction du flot**. Si au contraire $\text{div}F > 0$, alors le volume augmente, il y a **dilatation du flot**. Dans le cas où $\text{div}F = 0$, le flot est dit **conservateur**.

Exemples : Considérons le système

$$\begin{cases} \dot{x} &= -x \\ \dot{y} &= -y \end{cases} \quad (3.4)$$

Les solutions sont de la forme $x(t) = x_0 e^{-t}$ et $y(t) = y_0 e^{-t}$. Toutes les trajectoires tendent vers le point fixe $(0,0)$. On vérifie que $\text{div}F = -2 < 0$. Le flot se contracte.

Considérons un système hamiltonien. Il s'écrit

$$\begin{cases} \dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q} \end{cases} \quad (3.5)$$

La divergence se calcule

$$\text{div}F = \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p} - \frac{\partial^2 H}{\partial p \partial q} = 0 \quad (3.6)$$

Un système hamiltonien présente un flot conservatif.

Le système de Lorenz (3.1) donne une divergence $\text{div}F = -\sigma - 1 - b < 0$. Son flot se contracte. Les trajectoires tendent vers un **attracteur**.

Démonstration à la physicienne. Dans son livre, Strogatz considère un petit volume en forme de pavé dans l'espace $V(t) = dx dy dz$, puis il calcule son évolution

$$V(t + dt) = V(t) + dt \frac{dx}{dt} S_x + dt \frac{dy}{dt} S_y + dt \frac{dz}{dt} S_z \quad (3.7)$$

$\frac{dx}{dt}$ est le déplacement de la paroi perpendiculaire à l'axe x durant dt et S_x est sa surface. De même pour y et z . Il faudrait ajouter aussi les termes pour les surfaces selon $-x$, $-y$ et $-z$. De manière générale, on peut l'écrire comme une intégrale sur la surface S du petit volume :

$$V(t + dt) = V(t) + dt \oint_S \dot{X} \cdot d\vec{S} = V(t) + dt \oint_S \vec{F} \cdot d\vec{S} = V(t) + dt \int_V \text{div}\vec{F} dv \quad (3.8)$$

Si $\text{div}\vec{F} = 0$ le volume est bien conservé.

La démonstration mathématique n'est pas plus courte. Elle repose sur le fait que le volume est conservé si le flot ϕ_t laisse la mesure μ invariante pour un petit intervalle de temps t . Le flot est conservateur si quelle que soit la fonction f (assez régulière) et pour t petit :

$$\int f \circ \phi_t d\mu = \int f d\mu \quad (3.9)$$

Ce qui signifie qu'une mesure par f reste inchangée quand on fait le changement de variable avec ϕ_t . L'équation (3.9) signifie donc que le jacobien² de ϕ_t doit être égal à 1. Or pour t petit

$$\phi_t(\vec{X}) = \vec{X} + t\dot{\vec{X}} = \vec{X} + t\vec{F} \quad (3.10)$$

On peut aussi développer chaque coefficient de la matrice jacobienne $J(\phi_t)$ pour t petit :

$$J(\phi_t(\vec{X})) = J(\vec{X} + t\vec{F}) = \text{Id} + tJ(F) \quad (3.11)$$

Ensuite on utilise une relation vue peut être en licence. Pour une matrice A quelconque $\det(1 + tA) = 1 + t \text{Tr}(A) + o(t)$.

$$\det[J(\phi_t(\vec{X}))] = \det[\text{Id} + tJ(F)] \simeq 1 + t \text{Tr}J(\vec{F}) \quad (3.12)$$

Or $\text{Tr}J(\vec{F})$ est égale à $\text{div}\vec{F}$ par définition. On obtient donc que si $\text{div}\vec{F} = 0$, alors $\det[J(\phi_t(\vec{X}))] = 1$ et le flot est conservatif.

3.2 Applications discrètes

Les applications discrètes sont de la forme

$$x_{n+1} = g(x_n) \quad n \in \mathbb{N} \quad (3.13)$$

où g est une fonction dérivable. Comme il s'agit d'une suite discrète et non d'une solution $x(t)$ continue, le théorème de Poincaré-Bendixson ne s'applique pas. La suite de scalaires (x_n) peut donc présenter du chaos, même si elle est à une seule dimension. Dans cette partie, nous allons étudier une suite (x_n) de scalaires, mais ce peuvent être des vecteurs.

A la partie 3.1.2, nous avons vu qu'un système différentiel peut être étudié grâce à une section de Poincaré qui permet de faire une sorte d'analyse stroboscopique des trajectoires. La suite des intersections d'une trajectoire avec la section de Poincaré génère une application discrète $x_{n+1} = g(x_n)$ où g est appelé l'application de Poincaré. La richesse des comportements est aussi grande que le système différentiel lui-même et une suite discrète est en général plus facile à étudier qu'un flot.

3.2.1 Exemples simples

Exemple 1 : $x_{n+1} = x_n^2$

Nous allons chercher les points fixes et étudier leur stabilité. Pour éviter de confondre avec les systèmes différentiels, le **point fixe** est noté x^* . C'est la limite de la suite. Il vérifie $x^* = g(x^*)$. Pour cet exemple, il faut résoudre $x = x^2$ donc les solutions sont $x^* = 0$ ou $x^* = 1$.

Pour étudier la stabilité d'un point fixe, on considère une petite perturbation δx_0 du point fixe : $x_0 = x^* + \delta x_0$. Ce qui donne

$$x^* + \delta x_1 = g(x^* + \delta x_0) \quad (3.14)$$

$$= g(x^*) + \delta x_0 g'(x^*) + o(\delta x_0) \quad (3.15)$$

$$\delta x_1 = \delta x_0 g'(x^*) \quad (3.16)$$

2. Le jacobien d'une application est le module du déterminant de sa matrice jacobienne.

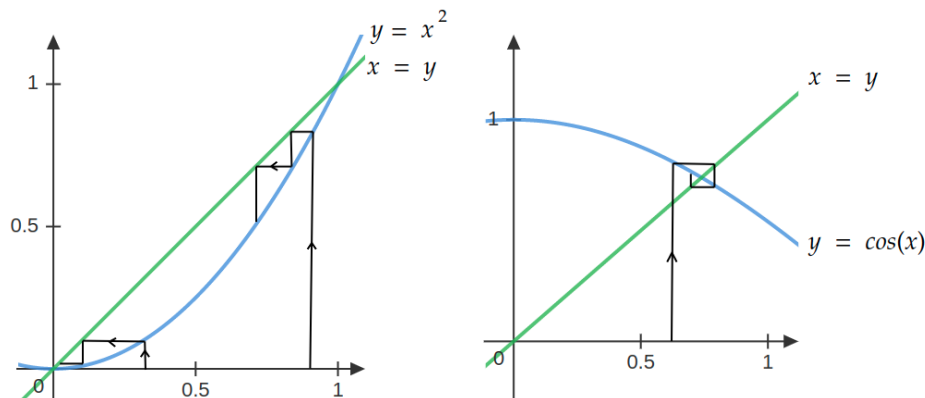


FIGURE 3.1 – Tracés de "toiles d'araignée" correspondant à l'exemple 1 (gauche) et à l'exemple 2 (droite) Schémas de S Gutsche.

où g' est la dérivée de g . A l'étape n , on obtient $\delta x_n = \delta x_0 [g'(x^*)]^n$. Donc si $|g'(x^*)| < 1$ la perturbation est atténuée. Le point fixe est stable. Alors que si $|g'(x^*)| > 1$ la perturbation est amplifiée. Le point fixe est instable.

Dans l'exemple, $g'(x) = 2x$. Donc le point fixe $x^* = 0$ est stable, alors que le point fixe $x^* = 1$ est instable.

La résolution graphique par la méthode de la "toile d'araignée" (cobweb) conduit au même résultat. Elle consiste à tracer $g(x_n)$ en fonction de x_n . Les exemples 1 et 2 sont présentés à la figure 3.1. On part d'un point initial x_0 , puis on utilise la première bissectrice pour obtenir les différents points de la suite. On constate que la suite converge vers un point fixe (point fixe stable) ou s'en écarte (point fixe instable).

Exemple 2 : $x_{n+1} = \cos(x_n)$

On cherche de même le point fixe et sa stabilité pour $x_0 \in [0, 1]$. La résolution graphique montre qu'il n'existe qu'un seul point fixe. Comme la dérivée en ce point est négative, $g'(x) = -\sin x$, la suite converge vers ce point en passant alternativement d'un côté à l'autre.

Le calcul exact du point fixe est plus compliqué car $x = \cos x$ est une équation transcendante. On peut utiliser le développement de $\cos x = 1 - x^2/2 + \dots$. On trouve comme solution positive approchée $x^* = -1 + \sqrt{3} \simeq 0,73$, ce qui n'est pas trop loin du véritable point fixe puisque $\cos(0,73) \simeq 0,74$.

3.2.2 Application logistique

L'application logistique est une des plus célèbres applications discrètes car elle est relativement simple et conduit pourtant à un comportement chaotique lorsque son paramètre r est suffisamment grand. La transition vers le chaos s'effectue par doublement de période, comme dans de nombreux systèmes physiques. L'application logistique s'écrit

$$x_{n+1} = r x_n (1 - x_n) \quad \text{avec } r > 0 \text{ et } x \in [0, 1] \quad (3.17)$$

Elle est de la même forme qu'un modèle de population vu au TD1 :

$$\frac{dN}{dt} = rN - rN^2 \quad (3.18)$$

Le premier terme correspond à la croissance de la population si $r > 0$, alors que le deuxième terme permet sa régulation si la population devient trop importante. Pour l'application logistique $x \in [0, 1]$, ce qui revient à normaliser la population : $x = N/N_0$.

Points fixes. Le point fixe $x^* = 0$ existe toujours. Comme $g'(x) = r - 2rx$, alors $g'(x = 0) = r$ et ce point fixe est stable pour $r < 1$ et instable pour $r > 1$. Il peut exister un deuxième point fixe. On cherche à résoudre

$$x = r x (1 - x) \quad (3.19)$$

Outre la solution $x^* = 0$, on obtient aussi $x^* = 1 - 1/r$. Comme on veut $x > 0$, ce point fixe n'existe que si $r > 1$. Sa stabilité s'obtient en calculant $g'(x^* = 1 - 1/r) = 2 - r$. Ce point fixe est stable si $1 < 2 - r < 1$, ce qui conduit à $1 < r < 3$. Pour $r > 3$, ce point fixe est instable.

En résumé : pour $0 < r < 1$, il n'y a que le point fixe $x^* = 0$ et il est stable. Pour $1 < r < 3$, outre 0 qui est instable, il y a un autre point fixe $1 - 1/r$ qui est stable. A partir de $r > 3$, les deux points fixes sont instables.

Ces résultats se retrouvent par résolution graphique. On constate de plus que pour $r > 3$, il apparaît un doublement de période, c'est-à-dire que la suite (x_n) converge non plus vers un unique point fixe, mais vers un cycle à deux points x_1^* et x_2^* . Ceci s'explique par le fait que pour $r = 3$, la dérivée $g'(1 - 1/r) = -1$, puis elle devient inférieure à -1 pour $r > 3$. Comme pour le cas de l'application cosinus vue juste avant, la pente négative conduit à l'apparition d'un cycle.

Nous allons maintenant identifier ce 2-cycle. Il vérifie $g(x_1^*) = x_2^*$ et $g(x_2^*) = x_1^*$, ce qui s'écrit aussi $g(g(x_1^*)) = x_1^*$ et $g(g(x_2^*)) = x_2^*$. On cherche donc les points fixes de $y_{n+1} = h(y_n)$ avec $h = g \circ g$. On obtient alors

$$y_{n+1} = r^2 y_n (1 - y_n) (1 - r y_n + r y_n^2) \quad (3.20)$$

Pour trouver ses points fixes, il faut donc résoudre une équation de degré 4, ce qui n'a rien d'évident. Or par définition les points fixes de g sont aussi solution. Donc on peut factoriser par ces deux points fixes $x^* = 0$ et $x^* = 1 - 1/r$ et ainsi se ramener à un polynôme de degré 2 dont les racines sont

$$x_{12}^* = \frac{r + 1 \pm \sqrt{(r - 3)(r + 1)}}{2r} \quad (3.21)$$

On constate qu'ils n'existent que pour $r > 3$, comme on s'y attendait. Pour étudier leur stabilité, il faut considérer $h' = (g \circ g)'$. Pour deux fonctions quelconques u et v , la formule est la suivante $(u \circ v)'(x) = v'(x) u'[v(x)]$. Si on applique cette formule avec $u = v = g$, on obtient

$$(g \circ g)'(x_1^*) = g'(x_1^*) g'[g(x_1^*)] = g'(x_1^*) g'(x_2^*) \quad (3.22)$$

De même $(g \circ g)'(x_2^*) = g'(x_2^*) g'[g(x_2^*)] = g'(x_2^*) g'(x_1^*)$. Les deux points du 2-cycle ont donc la même stabilité. Pour une certaine valeur de r , ils vont perdre leur stabilité, mais ils vont la perdre à la même valeur de r .

Le calcul donne $h'(x_{12}^*) = -r^2 + 2r + 4$. Le 2-cycle est donc stable tant que $-1 < -r^2 + 2r + 4 < 1$, ce qui donne $3 < r < 1 + \sqrt{6} \simeq 3,5$. En $r = 1 + \sqrt{6}$, $(g^2)' = -1$;

le 2-cycle devient instable et laisse place à un 4-cycle qui est stable jusqu'à un r suivant. On construit ainsi une suite (r_n) , où ont lieu les doubléments de période. Ce phénomène générique est dû à la forme de g . Feigenbaum (1944-2019) a introduit ainsi en 1974 le nombre δ qui porte son nom :

$$\delta = \frac{r_n - r_{n-1}}{r_n - r_{n+1}} \simeq 4,669 \quad (3.23)$$

Ce nombre de Feigenbaum se retrouve dans tous les phénomènes où on observe une cascade de bifurcations par doublement de période et pas seulement pour l'application logistique. En effet l'application g doit présenter des propriétés particulières pour conduire à un doublement de période. Nous le verrons en détail à la partie suivante.

On constate que la suite (r_n) converge vers $r_\infty \simeq 3,56$. Que se passe-t-il dans le cas de l'application logistique, pour $r > r_\infty$? L'étude numérique montre l'apparition d'un **régime chaotique**, c'est-à-dire que la suite (x_n) semble aléatoire. On observe aussi un **fantôme de 3-cycle**, c'est-à-dire qu'il ne s'agit pas d'un véritable 3-cycle car les points se décalent légèrement à chaque tour. Ce phénomène est lié à l'intermittence. On constate aussi que le diagramme est **autosimilaire**, c'est-à-dire qu'il a la même allure générale à plusieurs échelles.

3.2.3 Transition vers le chaos par doublement de période

Il existe plusieurs scénarii de transition vers le chaos.

- A la partie précédente, nous avons vu le scénario par **doublément de période** : lorsque le paramètre r augmente, l'évolution de la trajectoire (x_n) se modifie. Pour r suffisamment grand, la suite (x_n) semble aléatoire. Sa transformée de Fourier présente un spectre continu.
- Il existe aussi des transitions vers le chaos par **intermittences**. Pour une valeur du paramètre r fixée, la suite (x_n) est périodique, mais présente des "bouffées chaotiques" durant lesquelles (x_n) a une évolution apparemment aléatoire. Remarque : ici le temps correspond à $n = 1 \dots \infty$. Ces bouffées chaotiques sont d'autant plus fréquentes que r est grand. Ce scénario apparaît souvent en mécanique des fluides.
- Ruelle et Takens ont mis en évidence un autre mécanisme via l'apparition de **fréquences incommensurables**. Dans le régime non chaotique, la suite (x_n) est périodique de période ν_1 ou possède un spectre où la fréquence ν_1 est dominante. Quand le paramètre r augmente, il apparaît une seconde fréquence ν_2 qui n'est ni un multiple de ν_1 , ni une fraction rationnelle de ν_1 . Si r continue d'augmenter, il apparaît une troisième fréquence ν_3 , puis une quatrième, etc... Lorsque (x_n) possède plusieurs fréquences incommensurables son allure est chaotique et son spectre semble continu.

Expérience de la bille sur un plateau vibrant. L'étude théorique est numérique est conduite dans le DM. La difficulté de l'expérience consiste à maintenir la bille sur le plateau (directions xy) sans influencer sur son mouvement selon z . Il faut aussi que le vibreur ait une bande passante raisonnable autour de la fréquence 30 Hz qui est utilisée. Les chocs sont enregistrés avec un microphone et suivis par oscilloscope. Dans l'expérience, il est possible de mettre en évidence la première bifurcation et de

montrer la zone chaotique.

Nous nous concentrons désormais sur le scénario de transition vers le chaos par doublément de période. Il en existe de nombreuses illustrations expérimentales. L'apparition de ce scénario est liée à des propriétés génériques de la fonction g . Pour les mettre en évidence, nous nous intéressons à la suite

$$x_{n+1} = g_\mu(x_n) = -(1 + \mu)x_n + ax_n^2 \quad (3.24)$$

La fonction g_μ dépend du paramètre réel μ . On choisit de l'écrire sous la forme générale d'un polynôme. Le terme constant est nul. En effet, s'il n'était pas nul, cela reviendrait à décaler le point fixe $x^* = 0$. On décide aussi de s'arrêter à l'ordre 2. Nous allons voir que ce développement suffit à retrouver le mécanisme de doublément de période. Le terme a peut être ramené à 1 par un changement d'échelle : $\tilde{x} = ax$. L'équation (3.24) se réécrit ainsi :

$$\frac{\tilde{x}_{n+1}}{a} = -(1 + \mu) \frac{\tilde{x}_n}{a} + a \frac{\tilde{x}_n^2}{a^2} \quad (3.25)$$

Ce qui donne

$$\tilde{x}_{n+1} = -(1 + \mu)\tilde{x}_n + \tilde{x}_n^2 \quad (3.26)$$

On va donc partir de l'expression (3.26) en remplaçant \tilde{x} par x pour simplifier :

$$x_{n+1} = -(1 + \mu)x_n + x_n^2 \quad (3.27)$$

On s'intéresse d'abord³ au point fixe $x^* = 0$. Comme $g'_\mu(0) = -(1 + \mu)$, ce point fixe est stable pour $-1 < \mu < 0$ et instable pour $\mu > 0$. En $\mu = 0$, le point fixe $x^* = 0$ perd donc sa stabilité et comme $g'_0(0) = -1$, il apparaît un 2-cycle.

Nous cherchons maintenant les points du 2-cycle x_{12}^* qui sont solutions de $g \circ g(x) - x = 0$. Il s'agit de trouver les racines d'un polynôme de degré 4. Deux racines sont les points fixes $x^* = 0$ et $x^* = 2 + \mu$. Les deux autres racines sont

$$x_{12}^* = \frac{1}{2}(\mu \pm \sqrt{\mu^2 + 4\mu}) \quad (3.28)$$

On peut vérifier que $g(x_1^*) = x_2^*$ et $g(x_2^*) = x_1^*$. L'étape suivante est de montrer que $h = g \circ g$ ressemble à g au voisinage de x_1^* . On s'intéresse donc à la suite $y_n = x_1^* + \eta_n$ avec η_n petit :

$$y_{n+1} = x_1^* + \eta_{n+1} = h(x_1^* + \eta_n) \quad (3.29)$$

$$x_1^* + \eta_{n+1} = h(x_1^*) + \eta_n h'(x_1^*) + \frac{\eta_n^2}{2} h''(x_1^*) + o(\eta_n^2) \quad (3.30)$$

Par définition $x_1^* = h(x_1^*)$. De plus, on peut calculer $h'(x_1^*) = 1 - 4\mu - \mu^2$. En se limitant à l'ordre 2, l'équation (3.30) devient alors

$$\eta_{n+1} = (1 - 4\mu - \mu^2)\eta_n + C\eta_n^2 \quad (3.31)$$

qui ressemble beaucoup à l'équation (3.27). Pour ce faire, on procède au changement d'échelle $\tilde{\eta}_n = C\eta_n$ et on introduit le paramètre μ_1 tel que $-(1 + \mu_1) = 1 - 4\mu - \mu^2$, ce qui s'écrit aussi $\mu_1 = \mu^2 + 4\mu - 2$. On obtient alors

$$\tilde{\eta}_{n+1} = -(1 + \mu_1)\tilde{\eta}_n + \tilde{\eta}_n^2 \quad (3.32)$$

3. Il existe un autre point fixe $x^* = 2 + \mu$. Comme il est instable pour $\mu > -3$, nous ne nous y intéressons pas.

Nous venons de montrer que $h = g \circ g$ est de la même forme que g au voisinage de x_1^* . Le point fixe $\eta = 0$ (c'est-à-dire $x = x_1^*$) va donc devenir instable pour $\mu_1 > 0$ et conduire à un doublement de période pour h . On peut ainsi construire une suite μ_i telle que

$$\mu_{i+1} = \mu_i^2 + 4\mu_i - 2 \quad (3.33)$$

Cette suite possède une limite (ie. un point fixe) qui vérifie $\mu_\infty = \mu_\infty^2 + 4\mu_\infty - 2$ et dont la racine positive est

$$\mu_\infty = \frac{1}{2}(-3 + \sqrt{17}) \simeq 0,56 \quad (3.34)$$

Pour l'application logistique, on part de $r = 3$ et non de $\mu = 0$, ce qui conduit à $r_\infty \simeq 3,56$ en bon accord⁴ avec la valeur numérique 3,57 malgré la forme très générale et simplifiée de la fonction g .

La méthode que nous avons utilisée s'appelle la **renormalisation**. Elle a consisté à procéder par itération et à chaque étape à changer l'échelle et le paramètre.

3.3 Caractériser le chaos

Jusqu'à présent nous avons utilisé le terme "chaos" sans préciser ce qu'il recouvrait. Dans cette partie, nous allons définir des grandeurs qui permettent de le quantifier⁵, c'est-à-dire de donner des nombres et de le caractériser.

3.3.1 Coefficient de Lyapounov

Ce nom vient du mathématicien russe Alexandre Mikhaïlovitch Lyapounov (1857-1918). On le retrouve avec différentes orthographes suivant la traduction phonétique de l'écriture cyrillique. Il existe plusieurs définitions différentes des coefficients de Lyapounov qui recouvrent une même réalité, mais ne sont pas tout à fait équivalentes.

- En théorie ergodique, c'est-à-dire dans la branche des mathématiques qui s'intéresse au chaos, le coefficient de Lyapounov est défini à partir de la plus grande valeur propre d'une application linéaire en lien avec le théorème de Perron-Frobenius : Si on considère une matrice dont tous les coefficients sont strictement positifs (ou un multiple de cette matrice qui possède cette propriété), alors sa plus grande valeur propre est unique, réelle et positive. Cette définition n'est pas directement utile en physique.
- En physique numérique ou expérimentale, le coefficient de Lyapounov est défini à partir du taux de séparation de deux trajectoires initialement proches. On considère une trajectoire qui part de $x(t_0)$ et une autre qui est un peu décalée et part de $x(t_0) + \delta(t_0)$. On évalue l'évolution de l'écart $\delta(t)$. Si on constate que $|\delta(t)| \sim \delta_0 e^{\lambda t}$, alors les trajectoires s'écartent de manière exponentielle et le système est considéré comme chaotique. L'exposant λ est appelé le coefficient de Lyapounov. C'est une définition phénoménologique.

4. Il est possible de retrouver aussi le nombre de Feigenbaum en utilisant la règle de L'Hôpital.

5. Attention à l'ambiguïté du mot "quantifier". Il s'agit toujours de physique classique.

Le coefficient de Lyapounov peut dépendre de l'endroit où on effectue la mesure. Il permet de quantifier la précision qu'il est possible d'atteindre dans un système chaotique. Par exemple, dans le livre de Strogatz, il est obtenu un coefficient de Lyapounov de 0,9 pour le modèle de Lorenz (dans l'unité de temps choisie, par exemple la seconde). Supposons qu'on effectue les calculs numériques en "simple précision", c'est-à-dire que les nombres sont stockés avec une mantisse de 23 bits, ce qui correspond à une précision de $\delta_0 = 10^{-8}$. Ceci signifie qu'il n'est pas possible d'indiquer une position initiale à mieux que δ_0 . On veut estimer pendant combien de temps, deux trajectoires dont les positions initiales sont séparées de δ_0 seront toujours considérées comme proches, par exemple en imposant $\delta(t) = \delta_0 e^{\lambda t} < 10^{-3}$. On obtient $t < 5 \ln 10 / \lambda \simeq 13s$. Si on passe en "double précision", la mantisse est de 52 bits et l'écart minimal de $\delta_0 = 10^{-16}$. Pourtant on ne gagne finalement qu'environ un facteur 2 sur le temps : $t < 13 \ln 10 / \lambda$. Plus le coefficient de Lyapounov est grand, plus il est difficile de prévoir l'évolution du système.

- A partir du modèle, il est possible de définir un coefficient de Lyapounov au voisinage d'un point fixe instable. On considère une trajectoire périodique de période $T : x^*(t_0) = x^*(t_0 + T)$. Puis on s'intéresse à une trajectoire voisine qui passe par $x^*(t_0) + \delta_0$ et on regarde l'application de Poincaré g . C'est-à-dire qu'on se demande ce qui arrive au petit écart δ_0 après une période : $x^*(t_0) + \delta_1 = g[x^*(t_0) + \delta_0]$. On développe g au premier ordre

$$x^*(t_0) + \delta_1 = g[x^*(t_0)] + \delta_0 g'[x^*(t_0)] \quad (3.35)$$

On obtient donc l'écart au bout d'un tour : $\delta_1 = \delta_0 g'[x^*(t_0)]$. Si $g'[x^*(t_0)] < 1$, la trajectoire est stable puisque la perturbation diminue. Au contraire, si $g'[x^*(t_0)] > 1$, la perturbation est amplifiée, la trajectoire est instable. On note $g'[x^*(t_0)] = e^\lambda$ où λ est le coefficient de Lyapounov. Le cas $g'[x^*(t_0)] = 1$ est appelée **stabilité marginale ou neutre**.

Cette définition se généralise au cas où $x(t)$ est un vecteur. Alors $g'[x^*(t_0)]$ est la matrice jacobienne de g et est appelée **matrice de monodromie**. Sa plus grande valeur propre est notée $\Lambda = e^\lambda$ où λ est le coefficient de Lyapounov.

L'application du boulanger donne une illustration de cette définition. Le boulanger étire la pâte dans la direction x d'un facteur 2, qui s'amincit dans la direction y d'un facteur $1/2$ pour conserver le volume de pâte :

$$\begin{cases} x_{n+1} = 2 x_n \\ y_{n+1} = \frac{1}{2} y_n \end{cases} \quad (3.36)$$

Nous sommes dans le cas très simple d'une application linéaire déjà diagonale :

$$g' = g = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Selon la direction x , il y a élongation. La valeur propre vaut $\Lambda_1 = 2 = e^\lambda$, soit un coefficient de Lyapounov $\lambda = \ln 2$. Dans la direction y , il y a par contre contraction. Un système de ce genre est appelé hyperbolique. Dans la pratique, le boulanger doit replier la pâte à chaque étape, ce qui n'est pas décrit ici. L'application du chat vue en TD est plus propre avec utilisation de

modulo.

Il est possible d'illustrer l'application du boulanger avec de la pâte à modeler, éventuellement de deux couleurs différentes pour bien mettre en évidence le mélange.

3.3.2 Fractales

Les fractales sont un objet d'étude en soi en mathématiques, distinct du chaos et des systèmes dynamiques. Il se trouve que les **attracteurs étranges** qui apparaissent dans les systèmes chaotiques forment des structures fractales. Dans le modèle de Lorenz et l'oscillateur de Duffing, nous avons vu que la trajectoire doit rester confinée dans un domaine restreint sans pouvoir se recouper. Lorsqu'il n'existe pas de structure stable vers laquelle elle peut converger, la trajectoire est contrainte de se replier dans une structure en feuillets qui tend vers ce qui est appelé un attracteur étrange. Par exemple, pour l'application du boulanger vue au paragraphe précédent 3.3.1, le repliement de la pâte conduit à un ensemble de Cantor, ce qui explique que la pâte soit bien mélangée *in fine*.

On doit pour beaucoup la popularisation des fractales au mathématicien Benoît Mandelbrot (1924 Varsovie, 2010 Massachussets) et aux magnifiques images issues de l'ensemble qui porte son nom. Il est défini à partir de la suite $z_{n+1} = z_n^2 + c$ avec $z \in \mathbb{C}$ et $z_0 = 0$. C'est l'ensemble des $c \in \mathbb{C}$ tels que la suite (z_n) reste bornée.

Il n'existe pas de définition officielle d'une fractale. La propriété qui revient le plus souvent est l'**auto-similarité**, c'est-à-dire que les mêmes formes se retrouvent plus ou moins à plusieurs échelles différentes. Nous en avons vu un exemple avec le diagramme de bifurcations de l'application logistique au paragraphe 3.2.2. Cette invariance d'échelle provient souvent de la manière dont la structure est construite. Ce domaine d'étude, appelé **morphogénèse**, s'applique plutôt bien aux plantes. Le chou romanesco en est un bon exemple.

La dimension fractale permet de quantifier cet objet versatile qu'est la fractale. Il existe de nombreuses définitions différentes pour la dimension fractale, dont les valeurs peuvent être très différentes et correspondre à des réalités mathématiques différentes. Nous allons utiliser le flocon de von Koch comme illustration de la **dimension de boîte** qui est la dimension fractale la plus communément utilisée en physique.

Le flocon de von Koch est défini de la manière suivante. A l'étape 0, on considère un segment de longueur L_0 . A l'étape 1, ce segment initial est divisé en trois segments égaux de longueur $l_1 = L_0/3$ et sur la partie centrale on construit un triangle équilatéral de côté l_1 . La longueur totale à l'étape 1 est donc $L_1 = 4l_1 = \frac{4}{3}L_0$. A l'étape 2, on recommence, on divise chaque segment l_1 en trois segments de longueur $l_2 = l_1/3$ et sur celui du milieu on construit un triangle équilatéral. A l'étape n la longueur vaut

$$L_n = \left(\frac{4}{3}\right)^n L_0 \quad (3.37)$$

Le flocon de von Koch est défini comme la courbe limite et sa longueur est donc infinie. Il serait tentant de considérer sa surface, mais comme chaque segment est d'épaisseur nulle, sa surface est aussi strictement nulle. La dimension de boîte permet

de mettre un nombre sur cet objet qui n'est ni de dimension 1 (comme une ligne), ni de dimension 2 (comme une surface). Elle est définie par

$$d = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln M(\epsilon)}{\ln(1/\epsilon)} \quad (3.38)$$

où $M(\epsilon)$ est le nombre minimum d'éléments de taille ϵ nécessaires pour recouvrir l'ensemble. Dans le cas du flocon de von Koch, on peut définir ϵ comme la longueur du segment l_n et construire ainsi une suite $l_n = L_0/3^n$. A chaque étape, il faut 4 segments de longueur l_{n+1} pour recouvrir chaque segment de longueur l_n , ce qui donne $M(\epsilon) = 4^n$. On obtient alors

$$d = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln 4^n}{\ln(L_0/3^n)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n \ln 4}{n \ln 3 - \ln L_0} = \frac{n \ln 4}{n \ln 3} \simeq 1,26 \quad (3.39)$$

La dimension de boîte du flocon de von Koch est bien un nombre entre 1 (ligne) et 2 (surface).

Cette dimension de boîte est très pratique en physique et est en général applicable aux calculs numériques, comme dans le DM pour obtenir la dimension fractale de l'attracteur de la bille. Mais quelques cas posent problème, comme les ensembles dénombrables. Par exemple la dimension de boîte de l'ensemble $\mathbb{Q} \cap [0, 1]$ vaut 1, alors qu'on aurait souhaité un nombre strictement inférieur à 1.

La **dimension de Hausdorff** lui est parfois préférée parce qu'elle permet de créer une mesure sur l'ensemble fractale, mais elle est en général plus difficile à calculer. Sa définition est aussi beaucoup plus compliquée et repose sur un ensemble d'ouverts $(U_i)_{i \geq 1}$, dont le diamètre⁶ maximal vaut δ . On recouvre la fractale \mathcal{F} par cet ensemble et on calcule $\sum_{i \geq 1} [\text{diam } U_i]^s$ où s est un nombre positif. En faisant varier l'ensemble d'ouverts, on trouve l'ensemble qui donne le nombre le plus petit :

$$M_s(\delta, \mathcal{F}) = \inf \left\{ \sum_{i \geq 1} [\text{diam } U_i]^s \mid (U_i)_{i \geq 1} \text{ recouvre } \mathcal{F} \right\} \quad (3.40)$$

Puis on regarde pour $\delta \rightarrow 0$ et on s'intéresse au nombre limite qui dépend de la valeur de s :

$$M_s(\mathcal{F}) = \lim_{\delta \rightarrow 0} M_s(\delta, \mathcal{F}) \quad (3.41)$$

Suivant la valeur de s , $M_s(\mathcal{F})$ varie entre 0 et $+\infty$ de manière brusque. La dimension de Hausdorff s^* est la valeur de s pour laquelle la transition a lieu :

$$s^* = \inf \{ s \geq 0 \mid M_s(\mathcal{F}) < +\infty \} \quad (3.42)$$

Dans le cas de la fractale qui est le bord de l'ensemble de Mandelbrot, la dimension de boîte et la dimension de Hausdorff sont égales et valent 2. Pour l'intervalle $[a, b]^d$ de l'espace \mathbb{R}^d , ces dimensions sont aussi égales et valent d . Dans le cas général, ces dimensions sont différentes et la dimension de boîte est toujours supérieure à la dimension de Hausdorff.

6. Le diamètre d'un ouvert est la plus grande distance entre deux points de l'ouvert.

3.3.3 Définir le chaos

Jusqu'à présent, nous n'avons défini le chaos que via les coefficients de Lyapounov : si deux trajectoires initialement proches divergent, alors le système est chaotique. Il s'agit d'une définition locale et phénoménologique. De même, le calcul des coefficients de Lyapounov par la matrice de monodromie à partir du modèle dynamique est en général difficile et reste souvent aussi local. A l'heure actuelle, il n'est pas possible de prédire si un système présentera du chaos en regardant le système d'équations différentielles qui le régit. En dimension 2 seulement, le théorème de Poincaré-Bendixson affirme qu'il ne peut pas apparaître de chaos.

Les mathématiciens ont introduit des définitions de chaos. Elles ne concernent pas des flots (systèmes continus), mais des applications discrètes.

Une application g est dite **ergodique** si elle ne laisse aucun sous-ensemble invariant. En termes mathématiques, cette définition s'écrit : l'application g de E dans E est ergodique si et seulement si quel que soit l'ensemble B inclus dans E , si $g(B) = B$, alors $B = E$ ou $B = \emptyset$.

Pour que cette définition ait du sens, il faut aussi que g soit invariante, ce qui en langage de physicien signifie qu'elle conserve la mesure μ qui est utilisée sur l'espace E (ie. son jacobien pour le changement de variables vaut 1) : g est invariante si et seulement si quelle que soit l'application h

$$\int h d\mu = \int h \circ g d\mu \quad (3.43)$$

L'ergodicité correspond à ce que le physicien appelle du chaos. Par exemple, le billard en forme de stade conduit à une dynamique ergodique. La section de Poincaré d'une seule trajectoire est couverte de manière uniforme⁷.

En physique, un système est ergodique si sa moyenne temporelle est égale à sa moyenne statistique, ce qui n'est pas équivalent à la définition mathématique ci-dessus. Par exemple l'oscillateur harmonique à une dimension est ergodique au sens du physicien, pourtant ce n'est pas du tout un système chaotique.

Il existe des définitions mathématiques plus fortes du chaos : les applications mélangeantes (mixing en anglais). On considère toujours une application g sur un espace E muni d'une mesure μ . L'application g présente un **mélange fort** si et seulement si quels que soient les ensembles A et B de E , alors

$$\mu \left[g^{-k}(A) \cap B \right] \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \mu(A) \mu(B) \quad (3.44)$$

On peut remarquer que les mathématiciens préfèrent aller dans le passé g^{-k} plutôt que dans le futur g^{+k} , c'est plus propre. Cette définition signifie que non seulement g explore tout l'espace, mais qu'elle explore chaque sous-espace en y passant un temps en proportion de la taille de ce sous-espace.

Il existe une définition de **mélange faible** qui correspond à la même réalité, mais en moyenne :

$$\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \left| \mu \left[g^{-k}(A) \cap B \right] - \mu(A) \mu(B) \right| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0 \quad (3.45)$$

7. Seule la trajectoire qui joint les deux côtés parallèles du rectangle n'est pas instable.

Si une application présente du mélange fort, alors elle vérifie aussi la condition de mélange faible (la réciproque est fautive). De même la condition de mélange faible implique l'ergodicité (la réciproque est fautive).

Par exemple l'application dyadique qui s'écrit $g(x) = 2x$ modulo 1 est fortement mélangeante (avec la mesure de Lebesgue). Comme il l'a été vu en TD, elle est très sensible aux conditions initiales.

Autre exemple, la rotation irrationnelle qui s'écrit $g(\theta) = \theta + 2\pi\alpha$ avec α irrationnel et $\theta \in [0, 2\pi]$ est ergodique, mais pas mélangeante.

3.4 Ouverture : définir des systèmes non chaotiques ?

A la partie précédente, nous avons donné une définition précise d'un *système chaotique* en termes mathématiques, conduisant à trois types de chaos différents, nommés ergodique, mélange faible et mélange fort. Est-il possible de caractériser d'autres systèmes dynamiques ? La réponse est positive dans deux cas, les systèmes exactement solubles et les systèmes intégrables.

Un système exactement soluble est tel qu'on sait écrire sa solution. Par exemple, on considère l'équation $\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = 0$. Pour $\gamma < 2\omega_0$, la solution exacte est $x(t) = e^{-\gamma t/2} [A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t)]$ avec $\omega^2 = \omega_0^2 - \gamma^2/4$ et $A, B \in \mathbb{R}$.

Les systèmes intégrables⁸ sont définis dans le cadre de la mécanique analytique, c'est-à-dire qu'ils peuvent être décrits par un hamiltonien. Par définition, un système intégrable possède **autant de constantes du mouvement que de degrés de liberté** et leurs crochets de Poisson s'annulent. C'est-à-dire que si l'espace des phases est de dimension $2f$ (ie. \vec{q} et \vec{p} sont des vecteurs à f composantes), alors un système intégrable possède f constantes du mouvement, notées c_j , telles que $\dot{c}_j = 0$ et $\{c_i, c_j\} = 0$.

Ces f constantes du mouvement définissent une surface de dimension f dans l'espace des phases de dimension $2f$. Chaque trajectoire $[\vec{q}(t), \vec{p}(t)]$ se trouve sur cette surface. Si cette surface est régulière (smooth), compacte et connexe, alors le théorème de Liouville-Arnold stipule qu'il existe des variables angle-action $(\vec{\phi}, \vec{I})$ pour ce système. L'annexe (A.1) reprend quelques éléments sur les variables angle-action, en particulier $\phi_j = \omega_j t + \phi_j^0$, c'est-à-dire que cette surface de dimension f est un tore et les ω_j sont les vitesses angulaires de rotation de la phase le long du tore.

Si les ω_j ne possèdent pas de relation particulière entre eux, une trajectoire partant de $\vec{\phi}^0$ va recouvrir le tore de manière dense et uniforme au fil du temps. Si par contre, ce sont des multiples d'une même pulsation fondamentale ω_0 , ie $\omega_j = M_j \omega_0$ avec $M_j \in \mathbb{N}$, alors la trajectoire est périodique, de période $2\pi/\omega_0$. M_j est le nombre de tours dans la direction j .

Exemple de l'oscillateur harmonique à une dimension.

Le hamiltonien s'écrit $H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 q^2$. C'est un système de dimension $f = 1$ qui possède une constante du mouvement, l'énergie $E = H$. Il s'agit donc d'un système intégrable. On peut effectuer le changement de variables $E = I\omega_0$ et

8. L'étude des systèmes classiques intégrables est une spécialité à part entière en physique théorique.

$\phi = \omega_0 t + \phi^0$ qui s'écrit aussi

$$\begin{cases} q = \sqrt{\frac{2I}{m\omega_0}} \cos(\phi) \\ p = \sqrt{2mI\omega_0} \sin(\phi) \end{cases} \quad (3.46)$$

A partir de $H(\phi, I) = I\omega_0$, on retrouve bien les relations

$$\frac{\partial H}{\partial \phi} = 0 \quad \frac{\partial H}{\partial I} = \omega_0 \quad (3.47)$$

La surface d'énergie constante est une ellipse ; c'est bien un tore de dimension 1 dans l'espace des phases qui est le plan de dimension 2.

Les équations de Hamilton conduisent à

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -m\omega_0^2 q \end{cases}$$

ce qui revient à $\ddot{q} + \omega_0^2 q = 0$. On constate que $\text{div}\vec{F} = 0$, comme il se doit pour un système hamiltonien. Ce système admet le point fixe $(0, 0)$. La matrice jacobienne en ce point s'écrit

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 1/m \\ -m\omega_0^2 & 0 \end{pmatrix}$$

dont les valeurs propres vérifient $\Lambda^2 = -\omega_0^2$, soit $\Lambda_{\pm} = \pm i\omega_0$. Les trajectoires au voisinage du point fixe (et aussi dans tout le plan (q, p)) sont des ellipses. Les trajectoires restent à proximité du point fixe, mais elles ne peuvent pas s'en rapprocher parce qu'il n'y a pas de contraction $\text{div}\vec{F} = 0$. Ce point fixe est dit **stable**.

Si on ajoute un terme dissipatif $\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = 0$ avec $\gamma > 0$, le système n'est plus hamiltonien ; l'énergie n'est plus conservée. La forme normale s'écrit

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = -\gamma x_2 - \omega_0^2 x_1 \end{cases}$$

On constate que $\text{div}\vec{F} = -\gamma < 0$, il y a contraction. Au voisinage du point fixe $(0, 0)$, la matrice jacobienne s'écrit

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\omega_0^2 & -\gamma \end{pmatrix}$$

dont les valeurs propres tendent vers $(0, 0)$, soit en spiralant, soit directement. Ce point fixe est dit **asymptotiquement stable**, afin de le distinguer du cas précédent hamiltonien où il n'y a pas de contraction dans l'espace des phases.

Chapitre 4

Introduction au chaos quantique et à la physique semi-classique

Dans ce chapitre, nous allons étudier des systèmes quantiques ou ondulatoires. Il ne s'agit pas de "quantique" au sens d'"intrication", mais comme résolution d'une équation d'onde. Nous allons nous intéresser à ce qui est appelé la "dualité onde-corpuscule" qui apparaît en mécanique quantique, mais aussi dans d'autres domaines de la physique : acoustique, électromagnétisme, hydrodynamique,...

Un **système ondulatoire** est **intégrable** si on est capable d'explicitier son spectre et les fonctions d'onde associées. Il correspond à un **système classique** qui est lui-même **intégrable**, c'est-à-dire qu'il possède autant de constantes du mouvement que de degrés de liberté, cf la définition au paragraphe 3.4. Pour passer du système classique au système quantique la correspondance des opérateurs s'effectue en général facilement, sauf qu'il peut persister des problèmes de commutation¹.

Toutefois les systèmes intégrables sont des cas très particuliers et en général il n'est pas possible d'explicitier le spectre et les fonctions d'onde. Il faut donc avoir recours à d'autres méthodes pour étudier les propriétés ondulatoires. Souvent des renseignements s'obtiennent à la **limite semi-classique**, c'est-à-dire quand le système quantique tend vers le domaine classique ou, de manière plus générale, quand le système ondulatoire tend vers une approche corpusculaire, comme en optique géométrique par exemple. Les variables adimensionnées correspondantes sont par exemple $S/\hbar \rightarrow \infty$ en physique quantique (S est l'action) ou $L/\lambda \rightarrow \infty$ en optique (L est une taille caractéristique et λ la longueur d'onde).

Les mathématiciens se sont emparés de ce sujet et ont formalisé plusieurs procédés de quantification dont celui de Weyl est le plus répandu. Ils permettent de quantifier l'écart entre physique quantique et classique en fonction de \hbar . Le cours de Stéphane Nonnenmacher² est une bonne introduction à ce domaine. Je vous invite à visionner la conférence inaugurale³ de Nalini Anantharaman au Collège de France

1. Une bonne référence est le livre d'Albert Messiah *Mécanique quantique* tome 1, (1995 pour la dernière édition). Pour la question des correspondances, cf. § II.15.

2. Le polycopié du cours est en ligne sur sa page web. Il s'adresse à des étudiants en M2 de mathématiques.

3. La conférence inaugurale est tout à fait accessible pour un physicien. Les cours disponibles en podcasts sur le site du Collège de France sont beaucoup plus techniques et d'un (bon) niveau

sur la chaire de "Géométrie spectrale" qui donne un très bon aperçu des résultats obtenus ces dernières années et des questions qui restent ouvertes.

Dans ce chapitre, nous verrons trois approches très différentes de la physique semi-classique avec des traitements "à la physicienne".

Dans une première partie consacrée aux fonctions d'onde, nous discuterons d'abord de la méthode WKB qui est l'équivalent de la méthode eikonale en optique et permet de construire une fonction d'onde le long d'une trajectoire classique. Nous énoncerons ensuite le Théorème d'Ergodicité Quantique (QET) qui montre la délocalisation des fonctions d'onde à la limite semi-classique pour des systèmes chaotiques.

Puis dans une deuxième partie, nous introduirons la formule de trace qui exprime le spectre comme une somme sur les orbites périodiques. Sa portée est très vaste et elle est utilisée dans d'autres domaines que vous connaissez sous des formes simplifiées (comme en physique statistique par exemple).

Enfin la dernière partie portera sur les matrices aléatoires, un outil mathématique en développement rapide. Sans qu'on sache l'expliquer, la statistique de leurs valeurs propres reproduit les propriétés des systèmes chaotiques.

4.1 Méthode WKB et fonctions d'onde

L'acronyme WKB vient des noms de Wentzel, Kramers et Brillouin qui ont publié des articles sur le sujet de manière indépendante en 1926. Il s'agit d'obtenir une approximation raisonnable de la fonction d'onde en partant de la forme très générale $\psi(\vec{r}, t) = A e^{iS/\hbar}$. Cette approche est équivalente à la méthode eikonale en optique. Le contenu de cette partie est issu du livre de Messiah *Mécanique quantique* chapitre VI section II et du livre de Brack & Bhaduri *Semi-classical physics* page 67.

4.1.1 Présentation et résolution dans un cas simple

On part de l'équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\vec{r}) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (4.1)$$

On y injecte l'Ansatz suivant qui n'induit pas de perte de généralité

$$\psi(\vec{r}, t) = A(\vec{r}, t) e^{iS(\vec{r}, t)/\hbar} \quad A, S \in \mathbb{R} \quad (4.2)$$

Pour comprendre comment la méthode WKB fonctionne, nous allons considérer le cas unidimensionnel en stationnaire. L'équation de Schrödinger devient alors

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V \psi = E \psi \quad (4.3)$$

Les dérivées successives de ψ s'écrivent

$$\psi' = \left(A' + i \frac{S' A}{\hbar} \right) e^{iS/\hbar} \quad (4.4)$$

$$\psi'' = \left(A'' + i \frac{2S' A'}{\hbar} + i \frac{S'' A}{\hbar} - \frac{AS'^2}{\hbar^2} \right) e^{iS/\hbar} \quad (4.5)$$

M2 en mathématiques.

Ces formules sont injectées dans l'équation (4.3), puis les parties réelles et imaginaires sont séparées :

$$\text{Re :} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left(A'' - \frac{AS'^2}{\hbar^2} \right) + (V - E) A = 0 \quad (4.6)$$

$$\text{Im :} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2S'A'}{\hbar} + \frac{S''A}{\hbar} \right) = 0 \quad (4.7)$$

Jusqu'à cette étape, il n'y a pas de perte de généralité par rapport à l'équation de Schrödinger (4.3). C'est au cours de la résolution de ces équations couplées qu'on découvre des problèmes qu'il faut contourner. L'équation (4.7) s'intègre par séparation de variables :

$$\frac{A'}{A} = -\frac{S''}{2S'} \quad (4.8)$$

ce qui conduit à

$$\boxed{A = \frac{K}{\sqrt{S'}}} \quad (4.9)$$

où K est une constante. Ce résultat montre qu'il y a des problèmes si S' s'annule. Une fois injecté dans l'équation (4.6), il conduit à

$$S'^2 = 2m(E - V) + \hbar^2 \left(\frac{3S''^2}{4S'^2} - \frac{S'''}{2S'} \right) \quad (4.10)$$

Pour \hbar petit, le terme dominant est $2m(E - V)$, ce qui donne à l'ordre 0 en \hbar

$$S' = \pm \sqrt{2m(E - V)} \quad (4.11)$$

Le cas $E < V$ est interdit en physique classique, mais autorisé en physique ondulatoire : $S' = \pm i\sqrt{2m(V - E)}$. Le cas $E > V$ est autorisé en physique classique :

$$S(x, x_0, E) = \pm \int_{x_0}^x \sqrt{2m[V(x') - E]} dx' \quad (4.12)$$

La fonction d'onde s'écrit

$$\psi(x) = \frac{1}{[2m(V - E)]^{1/4}} \left(K_+ e^{iS/\hbar} + K_- e^{-iS/\hbar} \right) \quad (4.13)$$

où K_{\pm} sont des constantes. Les positions où $V(x) = E$ sont des points de rebroussement (*turning point* en anglais). Ce sont les bords des domaines $E < V$ et $V < E$. Le raccord des fonctions d'onde à ces endroits permet d'obtenir le spectre.

4.1.2 A trois dimensions

A trois dimensions, on procède comme précédemment en injectant l'Ansatz (4.2) dans l'équation de Schrödinger dépendant du temps (4.1). Après un calcul fastidieux, on obtient une équation pour le module $\rho = A^2$:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \left(\rho \frac{\vec{\nabla} S}{m} \right) = 0 \quad (4.14)$$

qui représente la conservation de la densité. On peut remarquer que $\frac{\vec{\nabla}S}{m}$ correspond à la vitesse. On obtient aussi une seconde équation

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{(\vec{\nabla}S)^2}{2m} + V - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta A}{A} \quad (4.15)$$

qui est exactement l'équation d'Hamilton-Jacobi classique, au terme $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta A}{A}$ près, appelé *terme de Bohm* ou *potentiel quantique*.

Il existe une littérature abondante et de nombreux systèmes ont été étudiés. En résumé, la méthode WKB consiste à construire une fonction d'onde qui se propage le long d'une trajectoire classique, plus ou moins comme le ferait un faisceau optique.

Visualisation des fonctions d'onde : les figures de Chladni. Une plaque de forme carrée, circulaire ou en stade est posée horizontalement sur un vibreur à une fréquence qu'on peut faire varier de 0 à quelques kHz (il faut un ampli entre le GBF et le vibreur). En déposant du sable fin sur la plaque, on voit des motifs apparaître pour certaines fréquences. Ils correspondent aux lignes nodales du mode propre.

Cette vidéo d'Harvard montre cette expérience avec une excitation par un archet. Magnifique. <https://sciencedemonstrations.fas.harvard.edu/presentations/chladni-plates>

4.1.3 Théorème d'ergodicité quantique

Le théorème d'ergodicité quantique, aussi appelé théorème de Schnirelmann (1974), a été prolongé par plusieurs mathématiciens dont Zelditch (1987) et Colin de Verdière (1985). Il considère le cas d'une propagation libre, c'est-à-dire juste le terme Laplacien $-\hbar^2\Delta/2m$, mais il peut être étendu à plusieurs types de potentiel. Il stipule que si le système est ergodique (comme le billard en forme de stade par exemple), alors la plupart des fonctions d'onde a une répartition spatiale uniforme dans la limite où leur énergie propre tend vers l'infini. Son énoncé précis et la démonstration sont donnés dans le livre de Nalini Anantharaman *Quantum ergodicity and delocalization of Schrödinger eigenfunctions* EMS Press (2022).

Quelques remarques :

- La limite où l'énergie E tend vers l'infini est bien équivalente à la limite semi-classique $\hbar \rightarrow 0$. En effet l'équation à résoudre est $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi$.
- La propriété d'ergodicité qui figure dans ce théorème est celle utilisée par les physiciens, c'est-à-dire que la moyenne d'une observable sur l'espace des phases est la même que la moyenne temporelle en suivant une trajectoire, ce qui signifie en gros que chaque trajectoire parcourt tout l'espace des phases.
- Le théorème ne concerne pas *toutes* les fonctions d'onde, mais *la plupart* d'entre elles, ce qui signifie que certaines (rares) fonctions d'onde peuvent rester localisées à la limite semi-classique. C'est le cas par exemple dans le billard en forme de stade avec des fonctions d'onde de type "Fabry-Perot" entre les deux parois horizontales qui ne pénètrent guère dans les parties circulaires du stade.
- Il s'agit d'un "théorème", donc il s'applique de manière imparable à tous les systèmes qui vérifient ses hypothèses.

4.2 Formule de trace

Dans cette partie, après une présentation des résultats généraux, nous traiterons explicitement le cas particulier du puits infini unidimensionnel. Le cas du billard en forme de rectangle fait l'objet du dernier TD. Enfin nous ferons le lien avec les expressions de la densité d'états vues en physique statistique. Comme bibliographie, vous pouvez consulter le cours des Houches de Bogomolny, *Quantum and arithmetical chaos*, ArXiv :nlin/0312061, ainsi que le livre de Brack & Bhaduri *Semi-classical physics*.

4.2.1 Présentation générale

Il est en général impossible de calculer explicitement chaque énergie propre d'un système physique. Et c'est souvent vain, car on s'intéresse à des propriétés plus globales, voire statistiques. La formule de trace répond à ce besoin. Elle est l'outil par excellence de la physique semi-classique et correspond plus ou moins à la transformée de Fourier de la densité d'états $\rho(E)$:

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E - \epsilon_n) \quad (4.16)$$

où les ϵ_n sont les énergies propres du système ondulatoire. Le calcul peut être conduit de manière exacte dans le cas intégrable et dans le cas complètement chaotique, c'est-à-dire que toutes les orbites périodiques du système classique sont instables. Une **orbite périodique** est une trajectoire classique périodique. A la limite semi-classique, on montre alors que la densité d'états, quantité purement ondulatoire, est la somme de deux termes qui ne s'expriment qu'avec des grandeurs classiques :

$$\rho(E) = \bar{\rho}(E) + \tilde{\rho}(E) \quad (4.17)$$

Si on reprend l'image de la transformée de Fourier, $\tilde{\rho}(E)$, appelé **terme oscillant**, correspond aux harmoniques, alors que $\bar{\rho}(E)$, appelé **terme lisse**, représente la valeur moyenne. Il existe des expressions générales pour ces quantités.

Le terme lisse est connu dans le cas des billards et appelé **loi de Weyl**. Pour un billard tri-dimensionnel avec conditions de Dirichlet (ie. annulation de la fonction d'onde aux bords), le terme lisse est le suivant

$$\bar{\rho}(E) = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} V - \frac{1}{16\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) S \quad (4.18)$$

où V est le volume du billard et S la surface de sa frontière. Le terme de volume est bien connu en physique statistique. Le terme de surface est plus difficile à obtenir et dépend de la condition au bord. A deux dimensions, le terme lisse ne dépend pas de l'énergie :

$$\bar{\rho}(E) = \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} A \quad (4.19)$$

où A est l'aire du billard.

A la limite semi-classique, le terme oscillant prend une forme générale

$$\tilde{\rho}(E) \propto \sum_{\text{Orbites périodiques}} C_{op} \cos(kL_{op} + \phi_{op}) \quad (4.20)$$

La somme porte sur toutes les orbites périodiques du système *classique*. Le coefficient C_{op} et la phase ϕ_{op} s'expriment avec des grandeurs classiques propres à chaque orbite périodique. L_{op} est la longueur de l'orbite et k est le nombre d'onde $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. Le facteur devant la somme est connu et dépend de la dimension du système.

Il est très probable que la forme (4.20) soit valable pour tout type de système, mais elle n'a pour l'instant été démontrée que dans le cas intégrable et le cas chaotique. Dans le cas intégrable, le coefficient C_{op} s'écrit en général

$$C_{op} = \frac{A_{op}}{\sqrt{L_{op}}} \quad (4.21)$$

où A_{op} représente l'aire couverte par l'orbite périodique.

Dans le cas où toutes les orbites périodiques sont instables, cas chaotique, le coefficient C_{op} s'exprime en fonction de la matrice de monodromie M_{op} de l'orbite :

$$C_{op} = \frac{L_{op}}{\sqrt{|\det(M_{op} - Id)|}} \quad (4.22)$$

et dépend donc des coefficients de Lyapounov. Id est la matrice identité et \det signifie déterminant. La densité d'états sous la forme (4.20) dans le cas chaotique est connue sous le nom de **formule de trace de Gutzwiller**.

4.2.2 Exemple simple : le puits infini unidimensionnel

Dans cette partie, nous allons vérifier explicitement les formules proposées au paragraphe précédent dans le cas simple du puits infini unidimensionnel. La particule de masse m est bloquée entre les abscisses $x = 0$ et $x = a$. Le potentiel est nul dans le puits et infini à l'extérieur. L'équation de Schrödinger est la suivante

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' = \epsilon \psi \quad (4.23)$$

avec $\psi(0) = \psi(a) = 0$. Les énergies propres s'écrivent alors

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2 = \epsilon_0 n^2 \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.24)$$

Nous cherchons maintenant à exprimer la densité d'états

$$\rho(E) = \sum_{n=1}^{\infty} \delta(E - \epsilon_n) = \sum_{n=1}^{\infty} \delta(E - \epsilon_0 n^2) = \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(E - \epsilon_0 n^2) - \frac{1}{2} \delta(E) \quad (4.25)$$

Nous avons symétrisé la somme pour pouvoir appliquer la formule de Poisson. Il reste néanmoins un terme infini $\delta(E)$ qui est lié aux conditions au bord et que nous allons oublier⁴. La formule de Poisson s'applique de manière générale à toute fonction f assez régulière et se démontre à partir de la formule de Parseval-Plancherel :

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(n) = \sum_{N=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-2i\pi N x} dx \quad (4.26)$$

4. Il est possible de le traiter proprement au prix d'une complication importante.

C'est une sorte de transformée de Fourier. Nous appliquons donc la formule de Poisson à la densité d'états :

$$\rho(E) = \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(E - \epsilon_0 n^2) = \frac{1}{2} \sum_{N=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(E - \epsilon_0 x^2) e^{-2i\pi N x} dx \quad (4.27)$$

Puis nous effectuons le changement de variable $u = \epsilon_0 x^2$ et calculons l'intégrale :

$$\rho(E) = \frac{1}{2} \sum_{N=-\infty}^{\infty} 2 \int_0^{\infty} \delta(E - u) e^{-2i\pi N \sqrt{\frac{u}{\epsilon_0}}} \frac{du}{2\sqrt{\epsilon_0 u}} \quad (4.28)$$

$$= \sum_{N=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\sqrt{\epsilon_0 E}} e^{-2i\pi N \sqrt{\frac{E}{\epsilon_0}}} \quad (4.29)$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{\epsilon_0 E}} + \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{2\sqrt{\epsilon_0 E}} \left(e^{-2i\pi N \sqrt{\frac{E}{\epsilon_0}}} + e^{+2i\pi N \sqrt{\frac{E}{\epsilon_0}}} \right) \quad (4.30)$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{\epsilon_0 E}} + \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{2\sqrt{\epsilon_0 E}} 2 \cos \left(2\pi N \sqrt{\frac{E}{\epsilon_0}} \right) \quad (4.31)$$

Le terme lisse $\frac{1}{2\sqrt{\epsilon_0 E}}$ correspond à $N = 0$. Nous allons retrouver cette expression à partir de la formule *classique* de physique statistique :

$$\bar{\rho}_{stat}(E) = \int \frac{dx dp}{h} \delta(E - \frac{p^2}{2m}) = \frac{a}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dp \delta(E - \frac{p^2}{2m}) \quad (4.32)$$

Le changement de variable $u = \frac{p^2}{2m}$ conduit à

$$\bar{\rho}_{stat}(E) = \frac{a}{h} 2 \int_0^{\infty} \frac{m du}{\sqrt{2mu}} \delta(E - u) = \frac{a}{h} \sqrt{\frac{2m}{E}} = \frac{1}{2\sqrt{\epsilon_0 E}} \quad CQFD \quad (4.33)$$

Nous retrouvons la dépendance familière en $1/\sqrt{E}$ des systèmes uni-dimensionnels.

Occupons-nous maintenant du terme oscillant qui est le deuxième terme de l'expression (4.31) :

$$\tilde{\rho}(E) = \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{2\sqrt{\epsilon_0 E}} 2 \cos \left(2\pi N \sqrt{\frac{E}{\epsilon_0}} \right) = \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 E}} \cos(2aNk) \quad (4.34)$$

Dans le cosinus, il apparaît la longueur d'une orbite périodique $L_N = 2aN$ qui correspond à N allers-retours entre les deux parois du puits. Cette expression est bien similaire à celle attendue par la formule (4.20). Il faut noter que dans cet exemple du puits 1D infini, il n'a pas été nécessaire d'utiliser la limite semi-classique. La densité d'états quantique s'exprime de manière exacte à partir de grandeurs classiques. C'est un cas très particulier.

4.2.3 Terme lisse - Lien avec la physique statistique

Dans cette partie, nous allons montrer que le terme lisse de la densité d'états correspond à la formule utilisée habituellement en physique statistique :

$$\bar{\rho}(E) = \int \delta[E - H(\vec{p}, \vec{q})] \frac{d\vec{p} d\vec{q}}{h^d} \quad (4.35)$$

où $2d$ est la dimension de l'espace des phases. Nous avons déjà constaté ce résultat dans le cas particulier du puits 1D infini du paragraphe précédent. La démonstration générale présente surtout deux intérêts :

- Elle justifie le facteur h^d au dénominateur de (4.35) qui provient simplement du changement de variable de \vec{k} vers \vec{p} dans l'intégrale.
- Elle explicite les approximations effectuées. L'expression (4.35) est en effet le terme dominant d'une série, appelée *formule de Thomas-Fermi*. De nombreux travaux portent sur les termes suivants.

La démonstration de (4.35) pour un système intégrable est assez spécifique et sera traitée à la partie 4.2.5. Pour un système hamiltonien quelconque, la démonstration repose sur la fonction de Green $G(\vec{r}, \vec{r}')$ et l'identité

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E - \epsilon_n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int G(\vec{r}, \vec{r}) d\vec{r} \quad (4.36)$$

L'intégrale de la fonction de Green est prise au même point \vec{r} , ce qui est par définition la trace de la fonction de Green. C'est pourquoi l'expression (4.36) est appelée *formule de trace*. La démonstration de l'égalité (4.36) est détaillée à l'annexe A.3. Elle utilise l'expression limite de la distribution de Dirac $\lim_{\alpha \rightarrow 0} \text{Im} \frac{1}{x+i\alpha} = -\pi\delta(x)$, puis exprime la fonction de Green comme une somme sur les fonctions propres de l'Hamiltonien.

Donc pour obtenir $\rho(E)$, il faut calculer G , définie par

$$(E - \hat{H}) G(\vec{r}, \vec{r}', E) = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (4.37)$$

Terme lisse pour un potentiel nul $V = 0$

Commençons par considérer le cas le plus simple d'un potentiel nul $V = 0$, comme pour les billards par exemple :

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} + E \right) G_{libre}(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (4.38)$$

Ecrire $\Delta_{\vec{r}}$ signifie qu'on considère le laplacien au point \vec{r} et non au point \vec{r}' . En utilisant la transformée de Fourier par rapport à la variable $\vec{r} - \vec{r}'$, on obtient

$$G_{libre}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^d} \int \frac{e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E} d\vec{k} \quad (4.39)$$

On peut vérifier que (4.39) est bien solution de (4.38). On l'injecte alors dans la formule (4.36) avec $\vec{r} = \vec{r}'$:

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int d\vec{r} \left[\frac{1}{(2\pi)^d} \int \frac{e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E} d\vec{k} \right] \quad (4.40)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \frac{1}{(2\pi)^d} \text{Im} \int d\vec{r} \int \frac{1}{-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E} d\vec{k} \quad (4.41)$$

$$= \int \frac{d\vec{r} d\vec{k}}{(2\pi)^d} \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E} \right) \quad (4.42)$$

D'après l'expression (A.24) obtenue en annexe, il faut remplacer E par $E + i\alpha$ et ajouter la limite $\alpha \rightarrow 0$. Ca nous arrange puisqu'on reconstruit ainsi la distribution Dirac :

$$\rho(E) = \int \frac{d\vec{r}d\vec{k}}{(2\pi)^d} \left(-\frac{1}{\pi} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \text{Im} \frac{1}{-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E + i\alpha} \right) \quad (4.43)$$

$$= \int \frac{d\vec{r}d\vec{k}}{(2\pi)^d} \delta(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}) \quad (4.44)$$

En effectuant le changement de variable du vecteur d'onde \vec{k} vers l'impulsion $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, on retrouve exactement le terme de Thomas-Fermi habituel en physique statistique :

$$\rho(E) = \int \frac{d\vec{r}d\vec{p}}{h^d} \delta(E - \frac{p^2}{2m}) \quad (4.45)$$

Ce résultat amène plusieurs remarques :

- Le terme de droite de l'égalité (4.45) ne comprend que le terme lisse de la densité d'états. Or la formule de trace (4.36) est complète et devrait faire apparaître le terme oscillant de la densité d'états. Le problème ne vient pas d'avoir considéré un potentiel nul $V = 0$, car les billards sont bien dans ce cas. Mais dans les billards, il est important de considérer la frontière. La fonction de Green que nous venons d'utiliser ne prend pas en compte les bords. Nous réglerons ce problème pour les systèmes chaotiques à la partie 4.2.4. Pour les systèmes intégrales, la démonstration repose sur une approche très différente et sera traitée à la partie 4.2.5.
- Pour obtenir la formule (4.45), nous n'avons pas utilisé d'approximation. Il s'agit donc du résultat exact pour le terme lisse dans le cas d'un potentiel nul. Dans le paragraphe suivant, nous allons considérer un potentiel non nul. Il faudra alors recourir à une approximation.

Terme lisse pour un potentiel quelconque

Dans le cas d'un potentiel quelconque $V(\vec{r})$, si on arrivait à obtenir

$$G_{essai}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^d} \int \frac{e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - V(\vec{r}) + E} d\vec{k} \quad (4.46)$$

alors la suite du calcul serait similaire aux équations (4.40) du paragraphe précédent et on obtiendrait la formule attendue (4.35). Mais (4.46) n'est pas la bonne fonction de Green ; G_{essai} ne vérifie pas l'équation (4.37) :

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} - V(\vec{r}) + E \right) G_{essai}(\vec{r}, \vec{r}') \neq \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (4.47)$$

En effet le laplacien s'applique au terme en $V(\vec{r})$ qui se trouve au dénominateur. Si on le remplace par $V(\vec{r}')$, on résout ce problème de laplacien, mais l'équation (4.37) n'est pas complètement vérifiée :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} - V(\vec{r}) + E \right) G_{essai}(\vec{r}, \vec{r}') &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} - V(\vec{r}) + E \right) \frac{e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - V(\vec{r}') + E} d\vec{k} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int \frac{-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - V(\vec{r}) + E}{-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - V(\vec{r}') + E} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} d\vec{k} \end{aligned} \quad (4.48)$$

Donc G_{essai} n'est pas la fonction de Green du système. Dans la suite de la démonstration, on voudra faire tendre \vec{r}' vers \vec{r} pour prendre la trace de la fonction de Green. Il se trouve que G_{essai} est une bonne approximation de la fonction de Green dans ce cas. La démonstration est donnée dans le livre de H.-J. Stöckmann *Quantum chaos, an introduction* (2000). Elle utilise le propagateur qui correspond à la transformée de Fourier de la fonction de Green (cf. Annexe A.4). La partie 7.2.1 du livre montre qu'aux temps courts l'opérateur d'évolution se simplifie Eq. (7.2.7). En effet, la durée pour aller de \vec{r}' à \vec{r} est courte lorsque \vec{r}' tend vers \vec{r} . Dans le formalisme d'opérateurs utilisé dans le livre, cette approximation revient à négliger les termes croisés dans les exponentielles des opérateurs. A la partie 7.3.1, la fonction de Green (7.3.4) calculée à partir du propagateur est bien celle de G_{essai} (4.46), ce qui permet d'obtenir le terme lisse attendu :

$$\bar{\rho}(E) = \int \delta [E - H(\vec{p}, \vec{q})] \frac{d\vec{p} d\vec{q}}{h^d} \quad (4.49)$$

Cette démonstration est valable pour tous les systèmes dynamiques hamiltoniens, qu'ils soient intégrables, chaotiques, pseudo-intégrables, mixtes,... Mais il ne s'agit que du terme lisse et non de la densité d'états complète. En effet la fonction de Green ne prend en compte que le chemin direct pour aller de \vec{r}' à \vec{r} , car il faut simplifier le propagateur correctement. Il est plus difficile d'explicitier une fonction de Green qui prenne en compte des trajectoires plus complexes qui vont aussi de \vec{r}' à \vec{r} (par exemple en se réfléchissant sur les bords). Gutzwiller a réussi ce tour de force dans les années 1980 pour les systèmes chaotiques, mais on ne sait pas le faire dans le cas général. Nous verrons le principe de la méthode au paragraphe suivant 4.2.4. Pour les systèmes intégrables, la démonstration a été publiée par Berry et Tabor en 1976 et repose sur des bases très différentes qui sont détaillées à la partie 4.2.5.

4.2.4 Formule de trace pour un système chaotique

L'objectif de cette partie est d'obtenir le terme oscillant de la densité d'états pour un système chaotique. Ici l'aspect chaotique est contenu dans l'hypothèse que toutes les orbites périodiques sont instables.

Le terme lisse de la densité d'états a la même expression (4.49) pour tous les systèmes hamiltoniens, donc elle est valable pour les systèmes chaotiques. Quant à la partie oscillante, appelée *formule de Gutzwiller*, elle ressemble à celle d'un système intégrable, car il s'agit aussi d'une somme sur les orbites périodiques qui apparaissent aussi *via* l'approximation de la phase stationnaire. Pour le reste, la démonstration est assez différente du cas intégrable et repose sur la fonction de Green et l'expression (4.36). Elle a été proposée par Martin Gutzwiller dans une série d'articles, puis rassemblée dans son livre *Chaos in classical and quantum mechanics* (1990). Ici je ne reprends que des éléments de la démonstration qui proviennent du cours d'E. Bogomolny *Quantum and arithmetical chaos*, Les Houches, Arxiv :nlin/0312061v1 (2003).

Nous repartons de la formule (4.36) qui donne la densité d'états à partir de la trace de la fonction de Green :

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E - \epsilon_n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int G(\vec{r}, \vec{r}) d\vec{r} \quad (4.50)$$

Comme nous l'avons vu à la partie 4.2.3, le terme lisse correspond à des trajectoires qui vont directement de \vec{r} à \vec{r}' dans la limite où \vec{r} tend vers \vec{r}' . Le terme oscillant vient de toutes les autres trajectoires qui vont aussi de \vec{r} vers \vec{r}' , mais qui prennent un chemin plus complexe, par exemple en se réfléchissant sur les parois. L'idée est d'écrire la fonction de Green $G(\vec{r}, \vec{r}')$ comme la somme des ondes qui se propagent le long de toutes les trajectoires classiques qui vont de \vec{r} à \vec{r}' :

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{\text{trajectoires-classiques-}j} A_j(\vec{r}, \vec{r}') e^{iS_j(\vec{r}, \vec{r}')/\hbar} \quad (4.51)$$

Pour chaque trajectoire j , les termes A_j et S_j s'obtiennent par la méthode WKB qui prend aussi en compte le potentiel $V(\vec{r})$. Il s'agit donc d'une approximation semi-classique. On peut ensuite vérifier que la fonction de Green (4.51) vérifie bien l'équation de définition (4.37). En effet chacun des termes de la somme la vérifie grâce à WKB et la somme aussi car l'équation (4.37) est linéaire. La densité d'états s'écrit maintenant

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\text{trajectoires-classiques-}j} \int A_j(\vec{r}, \vec{r}) e^{iS_j(\vec{r}, \vec{r})/\hbar} d\vec{r} \quad (4.52)$$

Le fait de prendre la trace de G revient à ne considérer que les trajectoires qui partent de \vec{r} et reviennent au même point \vec{r} . Pour calculer chacune des intégrales, nous allons utiliser la méthode de la phase stationnaire décrite à l'annexe A.2. Pour une trajectoire j fixée, le point selle correspond à la position \vec{r} où S_j est minimale :

$$\left| \frac{\partial S_j(\vec{r}, \vec{r}')}{\partial \vec{r}} + \frac{\partial S_j(\vec{r}, \vec{r}')}{\partial \vec{r}'} \right|_{\vec{r}=\vec{r}'} = 0 \quad (4.53)$$

D'après la méthode WKB, à la limite $\hbar \rightarrow 0$, S correspond à l'action et alors $\frac{\partial S_j(\vec{r}, \vec{r}')}{\partial \vec{r}'} = \vec{p}_f$ l'impulsion finale et $\frac{\partial S_j(\vec{r}, \vec{r}')}{\partial \vec{r}} = -\vec{p}_i$ l'impulsion initiale. Donc les trajectoires qui vérifient $\vec{p}_f = \vec{p}_i$, c'est-à-dire les trajectoires périodiques, sont valorisées dans l'intégrale (4.52). Au contraire, les trajectoires non périodiques vont avoir une intégrale nulle dans la limite $\hbar \rightarrow 0$. On en conclut que dans la limite semi-classique, la densité d'états se réduit à une somme sur les trajectoires périodiques, appelées orbites périodiques.

La fin du calcul consiste à calculer l'intégrale pour chaque orbite périodique avec la méthode de la phase stationnaire. On montre que les dérivées secondes de S_j sont liées aux coefficients de la matrice de monodromie. Au final, la densité d'états à la limite semi-classique pour un système dont toutes les orbites sont instables, appelée *formule de Gutzwiller*, s'écrit

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi \hbar} \sum_{\text{orbites-périodiques}} \frac{1}{\sqrt{|\det(M_{op} - I_d)|}} \cos \left(\frac{S_{op}}{\hbar} + \phi_{op} \right) \quad (4.54)$$

où M_{op} est la matrice de monodromie de l'orbite périodique, S_{op} l'action classique qui lui est associée et ϕ_{op} une phase qui dépend de propriétés de la trajectoire classique.

4.2.5 Formule de trace pour un système intégrable

Pour un système intégrable, la densité d'états peut s'écrire de manière plus directe. Comme nous l'avons vu à la partie 3.4, pour un système intégrable, le hamil-

tonien classique peut s'écrire comme une fonction des seules variables d'action :

$$H = H(I_1, I_2, \dots, I_d) \quad (4.55)$$

pour un espace des phases de dimension $2d$. L'annexe A.1 rappelle que les *variables angles-actions* (I_j, ϕ_j) forment un jeu de variables équivalentes aux variables (q_j, p_j) et qu'une transformation canonique permet de passer d'un jeu à l'autre.

La quantification exacte de ce système n'est pas évidente. Mais il est possible de construire des sortes de fonctions WKB pour chacun des d degrés de liberté, une méthode appelée EBK, de Einstein (1917), Brillouin (1926) et Keller (1958). Dans le cadre de cette approximation semi-classique, les variables d'action sont quantifiées⁵

$$I_j = \hbar \left(n_j + \frac{\mu_j}{4} \right) \quad (4.56)$$

Les nombres quantiques sont les (n_j) , des entiers, et les (μ_j) sont des constantes appelées indices de Maslov. Chaque énergie propre s'exprime alors en fonction des (n_j) :

$$E(n_1, n_2, \dots, n_d) = H \left[\hbar \left(n_1 + \frac{\mu_1}{4} \right), \hbar \left(n_2 + \frac{\mu_2}{4} \right), \dots, \hbar \left(n_d + \frac{\mu_d}{4} \right) \right] \quad (4.57)$$

On peut maintenant écrire la densité d'états comme une somme sur tous les indices (n_j) :

$$\rho(E) = \sum_{(n_j)} \delta [E - H(n_1, n_2, \dots, n_d)] \quad (4.58)$$

On applique ensuite la formule de Poisson :

$$\rho(E) = \sum_{(N_j)} \int e^{2i\pi(\sum_j N_j n_j)} \delta [E - H(n_1, n_2, \dots, n_d)] dn_1 dn_2 \dots dn_d \quad (4.59)$$

La somme s'effectue désormais sur les entiers (N_j) . Le terme lisse qui nous intéresse ici correspond à $N_j = 0$:

$$\bar{\rho}(E) = \int \delta [E - H(n_1, n_2, \dots, n_d)] dn_1 dn_2 \dots dn_d \quad (4.60)$$

Il faut ensuite opérer un changement de variables pour passer d'une intégration sur les n_j à une intégration sur les I_j

$$\bar{\rho}(E) = \frac{1}{\hbar^d} \int \delta [E - H(I_1, I_2, \dots, I_d)] dI_1 dI_2 \dots dI_d \quad (4.61)$$

La dernière étape consiste à revenir au jeu de variables (\vec{p}, \vec{q}) . D'abord on introduit les intégrales sur les variables d'angle qui vérifient la propriété $\int d\phi_j = 2\pi$:

$$\bar{\rho}(E) = \frac{1}{h^d} \int \delta [E - H(\vec{I})] d\vec{I} d\vec{\phi} \quad (4.62)$$

5. Une discussion générale se trouve au paragraphe 5.3 du livre *Quantum signature of chaos* de Fritz Haake. Le cas 1D est traité en détails au paragraphe 7.1.1 du livre *Quantum chaos : an introduction* de HJ Stöckmann.

Puis on effectue le changement de variables, sachant que la transformation canonique vérifie⁶ $d\vec{I} d\vec{\phi} = d\vec{p} d\vec{q}$:

$$\bar{\rho}(E) = \frac{1}{h^d} \int \delta[E - H(\vec{p}, \vec{q})] d\vec{p} d\vec{q} \quad (4.63)$$

On retrouve bien la formule de la densité d'états utilisée en physique statistique qui est en fait le terme dominant d'un développement en \hbar . En effet l'expression des énergies propres (4.57) est une approximation dans la limite semi-classique.

Dans cette partie, nous allons justifier la forme (4.20) du terme oscillant comme une somme sur les orbites périodiques. Il existe deux types de démonstration, l'une pour les systèmes intégrables, l'autre pour les systèmes chaotiques. Ici, nous allons nous concentrer sur les systèmes intégrables en repartant de l'expression (4.59) de la densité d'états⁷. Pour simplifier, nous allons commencer à une dimension :

$$\rho(E) = \sum_N \int e^{2i\pi Nn} \delta[E - H(n)] dn \quad (4.64)$$

L'idée générale est d'exprimer la fonction dirac comme une exponentielle pour appliquer ensuite une méthode de phase stationnaire :

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\alpha x/\hbar} d\alpha \quad (4.65)$$

On introduit l'expression du dirac (4.65) dans celle de la densité d'états (4.64) :

$$\rho(E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_N \int e^{2i\pi Nn} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\alpha[E-H(n)]/\hbar} d\alpha dn \quad (4.66)$$

La méthode de la phase stationnaire est décrite à l'annexe A.2. Pour l'utiliser, on effectue le changement de variable d'intégration $n \rightarrow I$, sachant que $I = \hbar(n + \mu/4)$ d'après (4.56) :

$$\rho(E) = \frac{1}{2\pi\hbar^2} \sum_N e^{-i\pi N\mu/2} \int e^{2i\pi NI/\hbar} \int e^{i\alpha[E-H(I)]/\hbar} d\alpha dI \quad (4.67)$$

Le terme de phase prend alors la forme d'une action effective⁸ :

$$S(I, \alpha) = 2\pi NI + \alpha[E - H(I)] \quad (4.68)$$

La condition de phase stationnaire selon α s'écrit $\frac{\partial S}{\partial \alpha} = 0$ et conduit à $E = H(I_{ps})$, ce qui est raisonnable⁹, n'induit pas de contrainte sur α et fixe la valeur de la variable

6. C'est une condition qui correspond au théorème de Liouville, cf. cours de mécanique analytique.

7. Nous suivons ici la démonstration proposée par E. Bogomolny dans son cours *Quantum and arithmetical chaos* arxiv 0312061 (2003). La démonstration originale se trouve dans l'article de M. V. Berry et M. Tabor *Closed orbits and the regular bound spectrum*, Proc. R. Soc. Lond. A vol. 349, 101 (1976). Des discussions sont apportées au paragraphe 5.7 du livre *Quantum signatures of chaos* de Fritz Haake, ainsi qu'au paragraphe 2.5 du livre *Semiclassical physics* de M. Brack et R. K. Bhaduri.

8. S a bien la dimension d'une action.

9. Ce résultat provient directement de la définition de la fonction dirac par une intégrale (4.65) qu'on a utilisée juste avant.

I à I_{ps} .

Selon I , l'action est stationnaire si

$$\frac{\partial S}{\partial I} = 2\pi N - \alpha \frac{\partial H}{\partial I} = 0 \quad (4.69)$$

Or par définition de la variable d'action I , $\frac{\partial H}{\partial I} = \omega$ est constant, ce qui conduit à

$$\alpha_{ps} = \frac{2\pi}{\omega} N \quad (4.70)$$

Cette expression signifie que pour chaque valeur de N , la valeur de α qui correspond à la phase stationnaire, notée α_{ps} , est N fois la période. Pour ces variables stationnaires, l'action s'écrit $S(I_{ps}, \alpha_{ps}) = 2\pi N I_{ps}$.

Pour appliquer la méthode de la phase stationnaire, ici en dimension 2, il faut calculer la matrice hessienne de S . On obtient

$$M = \begin{pmatrix} 0 & -\omega \\ -\omega & ? \end{pmatrix}$$

dont le déterminant vaut $-\omega^2$. La densité d'états devient alors

$$\rho(E) = \frac{1}{\hbar\omega} \sum_N e^{-i\pi N\mu/2} e^{2i\pi N I_{ps}/\hbar} \quad (4.71)$$

En rassemblant les N positifs et négatifs, on retrouve l'expression :

$$\boxed{\rho(E) = \frac{1}{\hbar\omega} + \frac{2}{\hbar\omega} \sum_{N=1}^{\infty} \cos(2\pi N \frac{I_{ps}}{\hbar} - \pi N \frac{\mu}{2})} \quad (4.72)$$

Application au cas du puits infini

Dans le cas du puits infini de largeur a , le hamiltonien est défini par $H = p^2/2m$.

Du point de vue classique, la vitesse est constante et donnée par $E = mv^2/2$. La période pour faire un aller-retour est donc $T = a\sqrt{\frac{2m}{E}}$ et $\omega = \frac{2\pi}{T} = \frac{\pi}{a}\sqrt{\frac{2E}{m}}$. On propose le changement de variables

$$\phi = \frac{\pi q}{a} \quad I = \frac{ap}{\pi} \quad (4.73)$$

qui vérifie bien $dq dp = d\phi dI$, de même que

$$\frac{1}{2\pi} \oint p dq = \frac{2p}{2\pi} \int_0^a dq = \frac{ap}{\pi} = I \quad (4.74)$$

En effet, le circuit correspond à faire l'aller-retour dans le puits à vitesse constante, donc p est constant et dans le même sens que q . Le hamiltonien s'écrit alors

$$H(I) = \frac{p^2}{2m} = \frac{\pi^2}{2ma^2} I^2 \quad (4.75)$$

Il vérifie bien

$$\frac{\partial H}{\partial \phi} = 0 \quad \frac{\partial H}{\partial I} = \frac{\pi^2}{ma^2} I = \frac{\pi^2}{ma^2} \frac{ap}{\pi} = \frac{\pi}{ma} \sqrt{2mE} = \omega \quad (4.76)$$

Du point de vue quantique, si on suppose que $I = \hbar n$, suivant la formule semi-classique (4.56) avec $\mu = 0$, alors on retrouve la formule exacte pour l'énergie $\epsilon = \epsilon_0 n^2$ vue en (4.24).

Si on compare à la densité d'états calculée exactement et donnée par la formule (4.31), le terme constant correspondant à $N = 0$ s'écrit $1/2\sqrt{\epsilon_0 E}$ et est exactement égal à celui obtenu dans la formule générale ci-dessus (4.72) $1/\hbar\omega$. Pour le terme oscillant, le coefficient de la formule générique (4.72) vaut $2/\hbar\omega$, ce qui est bien égal au coefficient $1/\sqrt{\epsilon_0 E}$ de la formule (4.31). Concernant le terme de phase, comme $\mu = 0$, le terme de phase générique (4.72) s'écrit $2\pi N I_{ps}/\hbar$. Or I_{ps} est tel que $E = H(I_{ps})$. D'après l'expression (4.75) de $H(I)$, on en déduit que $I_{ps} = \sqrt{2mEa^2}/\pi$, ce qui donne :

$$\frac{2\pi N}{\hbar} I_{ps} = \frac{2\pi N}{\hbar} \sqrt{\frac{2ma^2 E}{\pi^2}} = 2Na \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = 2Nak \quad (4.77)$$

qui est bien l'expression de la phase dans la formule (4.31). Donc, dans le cas particulier du puits infini, la densité d'états (4.31) calculée exactement à partir des énergies exactes est égale à la formule de trace (4.72) qui est une approximation semi-classique. En effet, $I = \hbar n$ est exact et non pas une approximation semi-classique.

Le calcul de la densité d'états à deux dimensions fait apparaître des contraintes sur les pulsations ω_j qui sont généralisables en dimension f . Nous allons donc détailler ci-dessous le calcul en dimension 2 pour comprendre ce qui se passe. Pour ce faire, nous reprenons le calcul de la formule de trace en dimension 2 en repartant de l'expression (4.59) puis en introduisant la forme intégrale de la fonction delta :

$$\rho(E) = \sum_{N_1, N_2} \int e^{2i\pi(N_1 n_1 + N_2 n_2)} \delta[E - H(n_1, n_2)] dn_1 dn_2 \quad (4.78)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{N_1, N_2} \int e^{2i\pi(N_1 n_1 + N_2 n_2)} e^{i\alpha(E-H)/\hbar} dn_1 dn_2 d\alpha \quad (4.79)$$

De même que précédemment, on procède au changement de variables $I_j = \hbar(n_j + \mu_j/4)$:

$$\rho(E) = \frac{1}{2\pi\hbar^3} \sum_{N_1, N_2} e^{-i\pi(N_1\mu_1 + N_2\mu_2)/2} \int e^{2i\pi(N_1 I_1 + N_2 I_2)/\hbar} \int e^{i\alpha[E - H(I_1, I_2)]/\hbar} dI_1 dI_2 d\alpha \quad (4.80)$$

Pour utiliser la méthode de la phase stationnaire, on considère l'action effective

$$S(I_1, I_2, \alpha) = 2\pi(N_1 I_1 + N_2 I_2) + \alpha[E - H(I_1, I_2)] \quad (4.81)$$

De même qu'en dimension 1, l'action est stationnaire selon α si les variables d'action conduisent à l'énergie E : $H(I_1^{ps}, I_2^{ps}) = E$. Le fait que l'action soit stationnaire selon I_1 conduit à

$$\frac{\partial S}{\partial I_1} = 2\pi N_1 - \alpha^{ps} \frac{\partial H}{\partial I_1} = 0 \quad (4.82)$$

C'est-à-dire que α^{ps} doit vérifier $\frac{2\pi}{\alpha^{ps}} = \frac{\omega_1}{N_1}$. De même l'équation selon I_2 conduit à $\frac{2\pi}{\alpha^{ps}} = \frac{\omega_2}{N_2}$. On en conclut que la condition de phase stationnaire implique que les pulsations ω_1 et ω_2 sont des multiples d'une pulsation fondamentale $\omega_0 = \frac{2\pi}{\alpha^{ps}}$

$$\omega_1 = N_1 \omega_0 \quad \omega_2 = N_2 \omega_0 \quad (4.83)$$

ce qui correspond à la définition d'une trajectoire périodique du système classique correspondant. **La condition de phase stationnaire sélectionne donc les trajectoires classiques périodiques**, appelées orbites périodiques.

Pour appliquer la formule (A.10), il faut calculer la matrice M :

$$M = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_1 & -\omega_2 \\ -\omega_1 & \alpha \frac{\partial^2 H}{\partial I_1^2} & \alpha \frac{\partial^2 H}{\partial I_1 \partial I_2} \\ -\omega_2 & \alpha \frac{\partial^2 H}{\partial I_1 \partial I_2} & \alpha \frac{\partial^2 H}{\partial I_2^2} \end{pmatrix}$$

puis évaluer son déterminant pour α^{ps} , N_1 et N_2 . La formule finale s'écrit

$$\rho(E) \simeq \frac{(2\pi\hbar)^{3/2}}{2\pi\hbar^3} \sum_{N_1, N_2} \frac{1}{\sqrt{i^3 \det M(\alpha^{ps}, N_1, N_2)}} e^{-i\frac{\pi}{2}(N_1\mu_1 + N_2\mu_2)} e^{i\frac{2\pi}{\hbar}(N_1 I_1^{ps} + N_2 I_2^{ps})} \quad (4.84)$$

Cette formule montre que la densité d'états est une somme sur les trajectoires périodiques du système classique. Cette approximation reste valable tant que les termes suivants restent négligeables dans la méthode de la phase stationnaire.

En rassemblant les termes de mêmes $|N_1|$ et $|N_2|$, on fait apparaître une somme de cosinus, de phase

$$\varphi = \frac{2\pi}{\hbar}(N_1 I_1^{ps} + N_2 I_2^{ps}) - \frac{\pi}{2}(N_1\mu_1 + N_2\mu_2) \quad (4.85)$$

Le deuxième terme en μ_1 et μ_2 est un nombre fixé pour chaque orbite périodique. Le premier terme dépend de \hbar . Pour un billard, c'est-à-dire un système où $V = 0$ et donc $|\vec{p}| = \sqrt{2mE}$, ce premier terme se réécrit

$$\frac{2\pi}{\hbar}(N_1 I_1^{ps} + N_2 I_2^{ps}) = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{N_1}{2\pi} \oint_{C_1} \vec{p} \cdot d\vec{q} + \frac{N_2}{2\pi} \oint_{C_2} \vec{p} \cdot d\vec{q} \right) \quad (4.86)$$

$$= \frac{1}{\hbar} \oint_{N_1 C_1 + N_2 C_2} \vec{p} \cdot d\vec{q} \quad (4.87)$$

$$= \frac{1}{\hbar} \oint_{N_1 C_1 + N_2 C_2} \sqrt{2mE} dl \quad (4.88)$$

$$= k L_{op} \quad (4.89)$$

où L_{op} est la longueur géométrique de l'orbite périodique. En effet \vec{p} est dans la direction de la trajectoire, donc $\vec{p} \cdot d\vec{q} = \sqrt{2mE} dl$. On retrouve la formule (4.20) du terme oscillant de la formule de trace pour les billards.

Conclusion : La formule de trace est un outil central de la physique semi-classique qui exprime le spectre d'un système à partir de quantités classiques. Bien qu'il soit tentant d'extrapoler aux fonctions d'onde, peu de travaux théoriques ont abordé cet aspect. Il faut aussi souligner que la partie oscillante de la formule de trace est en général une somme divergente puisque la densité d'états est une somme de distributions. Les comparaisons expérimentales sont néanmoins nombreuses et en très bon accord avec ses prédictions.

4.3 Matrices aléatoires

La théorie des matrices aléatoires (RMT *Random Matrix Theory*) a été initiée en 1928 par Wishart, mathématicien à l'Université de Cambridge, afin d'étudier les statistiques d'objets non-commutatifs. Elle reste un domaine réservé aux mathématiciens probabilistes jusqu'à son arrivée miraculeuse en physique nucléaire à la fin des années 1960 et de grands noms lui sont associés comme Dyson et Wigner. Depuis la théorie des matrices aléatoires connaît un développement énorme en physique théorique et surtout en mathématiques¹⁰.

4.3.1 Présentation

L'étude des matrices aléatoires en physique résulte d'un changement de perspective. A la fin de la seconde guerre mondiale, la physique nucléaire occupe une place privilégiée. Mais les systèmes étudiés, comme l'Uranium 235 et 238, sont devenus très compliqués avec plus de 200 corps à prendre en compte. Il devient impossible (et vain) de calculer la position de chaque niveau d'énergie du spectre. L'idée consiste à considérer le spectre du point de vue de la statistique des niveaux d'énergie. Wigner propose de s'intéresser en particulier à la distribution de $p(s)$, probabilité que deux niveaux consécutifs soient distants d'une énergie s . Par exemple, les niveaux d'un oscillateur harmonique $\epsilon_n = \hbar\omega (n + \frac{1}{2})$ sont régulièrement espacés de $\hbar\omega$. En général, les systèmes intégrables présentent une distribution $p(s)$ poissonnienne, alors que les systèmes chaotiques affichent une *rigidité spectrale*, c'est-à-dire que les niveaux sont tous plus ou moins espacés de la même énergie.

Concernant les systèmes intégrables, considérons d'abord le cas du billard rectangulaire de côtés a et b dont les énergies vérifient $\epsilon_{n,m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\pi n}{a}\right)^2 + \left(\frac{\pi m}{b}\right)^2 \right]$. Si on choisit a/b irrationnel pour éviter les dégénérescences accidentelles, on obtient un excellent accord entre $p(s)$ et une loi de Poisson de la forme Ke^{-As} . La constante A correspond à la valeur moyenne $\langle s \rangle$, par définition d'une loi de Poisson. C'est un facteur d'échelle qui s'ajuste et peut s'exprimer en fonction de a et b . Mais la forme de la loi de Poisson est fixe. Elle impose en particulier que $p(s)$ est maximale en $s = 0$, ce qui signifie que les niveaux d'énergie consécutifs d'un système intégrable ont le plus de chances d'être proches, voire quasi-dégénérés.

Si on tire des nombres au hasard suivant une distribution uniforme, on retrouve une loi de Poisson. La démonstration est la suivante. On cherche l'expression de $p(s)$ qui est la probabilité que deux nombres consécutifs soient distants de s . Si ces nombres sont tirés au hasard avec une probabilité uniforme entre 0 et L , ça signifie que la probabilité d'en tirer un dans un intervalle de longueur l vaut l/L . On se place autour du nombre x_0 . On souhaite qu'aucun des N autres nombres ne se trouve dans l'intervalle $[x_0 - s, x_0 + s]$ de longueur $2s$. La probabilité qu'un nombre ne se trouve pas dans cet intervalle vaut $(1 - 2s/L)$. Donc pour N nombres, cette probabilité devient

$$p(s) \propto \left(1 - \frac{2s}{L}\right)^N = e^{N \ln(1 - \frac{2s}{L})} \simeq e^{-\frac{2Ns}{L}} \quad (4.90)$$

On retrouve bien une loi en e^{-As} . On en déduit la conjecture de Berry-Tabor : pour un système intégrable quelconque sans symétrie particulière, les valeurs propres se

10. Ce cours doit beaucoup aux notes et documents qu'Oriol Bohigas m'avaient donnés.

répartissent de manière aléatoire, comme lors d'un tirage uniforme. Ce n'est pas le cas pour l'oscillateur harmonique dont les niveaux d'énergie sont régulièrement espacés.

Dans le cas d'un système chaotique, au contraire, les valeurs propres ont tendance à se repousser, c'est-à-dire que $p(s=0) = 0$, il n'y a pas de valeurs propres quasi-dégénérées. Au milieu des années 1950, Wigner compare la distribution $p(s)$ expérimentale issue du spectre de noyaux à celle des valeurs propres de matrices aléatoires et propose une loi de la forme $p(s) \propto s^\beta e^{-As^2}$. Plus tard, il a été montré (par Wigner et d'autres) que $\beta = 1, 2$ ou 4 dépend de la symétrie du système et que l'accord avec les données expérimentales en physique nucléaire est très bon. En 1984, Bohigas, Giannoni et Schmit formulent la conjecture plus générale, dite conjecture BGS, que les fluctuations du spectre d'un système chaotique sont les mêmes que celles du spectre de matrices aléatoires. Cette conjecture a été vérifiée avec une très bonne précision par des expériences et des simulations dans différents domaines de la physique (quantique, acoustique, électromagnétisme, hydrodynamique), mais reste encore non démontrée.

La définition d'une matrice aléatoire est qu'il s'agit d'une matrice dont les coefficients (h_{ij}) sont tirés au hasard selon une loi $\mathcal{P}(h_{ij})$. Pour que ces matrices puissent être utilisées en physique, elles doivent respecter trois règles :

1. Elles doivent respecter la symétrie du système physique. C'est-à-dire être symétriques réelles ou hermitiennes, par exemple pour l'invariance par renversement du temps.
2. La loi de probabilité \mathcal{P} doit être invariante par changement de base. Par exemple si H est symétrique réelle, elle doit vérifier

$$\mathcal{P}(h_{11}, h_{12}, \dots) dh_{11} dh_{12} \dots = \mathcal{P}(h'_{11}, h'_{12}, \dots) dh'_{11} dh'_{12} \dots \quad (4.91)$$

avec $H' = O^{-1}HO$ et $O^tO = Id$. Dans un lemme de 1946, Weyl montre que les seuls invariants sont de la forme

$$tr H^j = \sum_i \lambda_i^j \quad (4.92)$$

où les (λ_i) sont les valeurs propres de H . On en conclut que $\mathcal{P}(H)$ est un polynôme en $tr H^j$: $\mathcal{P}(tr H, tr H^2, tr H^3, \dots)$.

3. On souhaite que les coefficients (h_{ij}) soient statistiquement indépendants. Il n'y a pas de raison physique de l'imposer, mais c'est plus pratique. Alors on peut réduire \mathcal{P} à la forme

$$\mathcal{P}(h_{11}, h_{12}, \dots) = K e^{-A tr H^2} \quad (4.93)$$

où A et K sont des constantes, car si H est hermitienne, alors $tr H^2 = tr H^\dagger H = \sum_{ij} |h_{ij}|^2$. On peut montrer que c'est la distribution qui contient le moins d'information, à variance fixée (par A).

En 1962, Dyson a formulé une classification complète des ensembles de matrices aléatoires :

- L'ensemble GOE Gaussian Orthogonal Ensemble. H est symétrique réelle. C'est un groupe invariant par transformation orthogonale.
- L'ensemble GUE Gaussian Unitary Ensemble. H est hermitienne. C'est un groupe invariant par transformation unitaire.
- L'ensemble GSE Gaussian Symplectic Ensemble. Les coefficients de H sont des quaternions réels.

4.3.2 Rigidité spectrale

La conjecture BGS stipule que le spectre d'un système chaotique présente les mêmes fluctuations statistiques que le spectre de matrices aléatoires. Dans cette partie, nous allons nous intéresser à $p(s)$, probabilité que deux valeurs propres consécutives soient distantes de s , pour des matrices aléatoires. Après une introduction sur l'origine de la rigidité spectrale, nous allons calculer explicitement $p(s)$ dans le cas de matrices 2x2 appartenant à l'ensemble GOE.

On peut montrer que

$$p(s) \propto s^\beta e^{-As^2/2} \quad (4.94)$$

où A est un réel positif et où β vaut 1 pour GOE, 2 pour GUE et 4 pour GSE. Cette loi tend vers 0 en $s = 0$, c'est-à-dire que les niveaux d'énergie ont tendance à se repousser, à rester à distance les uns des autres. On constate aussi que cette loi possède un maximum, donc que la distance entre deux niveaux consécutifs reste proche d'une certaine valeur moyenne, ce qui est appelé *rigidité spectrale*.

Pour comprendre qualitativement l'origine de la répulsion entre niveaux, considérons une matrice 2x2

$$H = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}$$

Le calcul de ses valeurs propres conduit à

$$E_\pm = \frac{a+c}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(a-c)^2 + 4b^2} \quad (4.95)$$

Le premier terme $\frac{a+c}{2}$ correspond au niveau moyen d'énergie. La distance entre les niveaux est donnée par

$$E_+ - E_- = \sqrt{(a-c)^2 + 4b^2} \quad (4.96)$$

Cette distance ne peut jamais être nulle s'il y a un terme non-diagonal b . Ce terme non-diagonal est à l'origine de la répulsion.

Nous souhaitons calculer explicitement $p(s)$ pour l'ensemble GOE. Nous allons le faire dans le cas de matrices 2x2, car le cas NxN est identique et beaucoup plus lourd à écrire. Les matrices sont de la forme

$$H = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{12} & h_{22} \end{pmatrix}$$

et les valeurs propres correspondantes sont notées E_\pm . On cherche l'expression de

$$p(s) = \int \delta(s - |E_+ - E_-|) \mathcal{P}(h_{11}, h_{12}, h_{22}) dh_{11} dh_{12} dh_{22} \quad (4.97)$$

où

$$\mathcal{P} = K e^{-A(h_{11}^2 + 2h_{12}^2 + h_{22}^2)} = K e^{-A(E_+^2 + E_-^2)} \quad (4.98)$$

Le calcul est plus simple si l'intégration s'effectue sur les valeurs propres et non sur les coefficients. Il faut donc introduire le jacobien

$$J = \left| \det \frac{\partial(h_{11}, h_{12}, h_{22})}{\partial(E_+, E_-, \theta)} \right| \quad (4.99)$$

où θ est l'angle de la matrice orthogonale O qui permet de passer dans la base où la matrice est diagonale, notée D . Par définition $H = O^t D O$ et le calcul conduit à

$$H = \begin{pmatrix} E_+ \cos^2 \theta + E_- \sin^2 \theta & -(E_+ - E_-) \sin \theta \cos \theta \\ -(E_+ - E_-) \sin \theta \cos \theta & E_+ \sin^2 \theta + E_- \cos^2 \theta \end{pmatrix}$$

On en déduit le jacobien $J = (E_+ - E_-) f(\theta)$ où f est une fonction qui disparaîtra dans la normalisation de p . On cherche désormais à calculer

$$\begin{aligned} p(s) &= \int \delta(s - |E_+ - E_-|) K e^{-A(E_+^2 + E_-^2)} |E_+ - E_-| f(\theta) dE_+ dE_- d\theta \quad (4.100) \\ &= K' \int \delta(s - |E_+ - E_-|) e^{-A(E_+^2 + E_-^2)} |E_+ - E_-| dE_+ dE_- \quad (4.101) \end{aligned}$$

Ce calcul est assez aisé en effectuant le changement de variables $u = E_+ - E_-$ et $v = E_+ + E_-$, de jacobien $J = 2$.

$$p(s) = K' \int \delta(s - |u|) e^{-A(u^2 + v^2)/2} |u| 2 du dv \quad (4.102)$$

$$= 2K' \sqrt{\frac{2\pi}{A}} \int \delta(s - |u|) e^{-A u^2/2} |u| du \quad (4.103)$$

$$= K'' s e^{-A s^2/2} \quad (4.104)$$

On retrouve bien $p(s) \propto s^\beta e^{-A s^2/2}$ avec $\beta = 1$ dans le cas GOE. La répulsion entre niveaux est due au terme s^1 qui vient directement du jacobien proportionnel à $(E_+ - E_-)$.

4.3.3 Fonction Zeta de Riemann

Dans ce paragraphe, nous allons d'abord décrire la conjecture de Riemann, puis indiquer le lien avec la théorie des matrices aléatoires et la formule de trace. Ce lien, pourtant très clair et quantitatif, n'est toujours pas bien compris.

La fonction zeta de Riemann est définie par

$$\zeta(s) = \sum_n \frac{1}{n^s} \quad (4.105)$$

Il existe une formule générale pour s pair, par exemple $\zeta(2) = \pi^2/6$ et $\zeta(4) = \pi^4/90$. La fonction zeta de Riemann est égale au produit d'Euler qui porte sur l'ensemble des nombres premiers :

$$\zeta(s) = \sum_n \frac{1}{n^s} = \prod_{p \text{ premiers}} \frac{1}{1 - \frac{1}{p^s}} \quad (4.106)$$

Riemann (1826-1866) généralise cette définition. $\zeta(s)$ se prolonge dans le plan complexe¹¹. Elle possède alors

- des zéros dits triviaux en $s = -2, -4, -6, \dots$ qui sont dus au terme $\sin \frac{\pi s}{2}$ du prolongement analytique,
- un pôle simple en $s = 1$. Il s'agit de la formule connue $1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \dots + \frac{1}{n} = \ln n + \gamma$ où γ est la constante d'Euler,
- et un nombre infini de zéros dits non-triviaux pour $s \in [0, 1]$.

La conjecture de Riemann (1859) stipule que tous les zéros non-triviaux (s_n) s'écrivent $s_n = 1/2 + i\gamma_n$ avec $\gamma_n \in \mathbb{R}$. C'est-à-dire que tous les zéros non-triviaux se trouvent sur la droite verticale $s = 1/2$. C'est le numéro 8 des problèmes de Hilbert et le numéro 1 des problèmes de Smale. C'est un sujet important car il contrôle la distribution des nombres premiers. A l'époque, Riemann propose un algorithme très efficace pour trouver ces zéros non-triviaux et calcule les trois premiers à la main. Puis Turing dans les années 1950 va jusqu'à $Im(s) = 1500$. Sur la page internet d'Odlyzko se trouvent des fichiers contenant des tables de zéros, par exemple les 100 000 premiers zéros avec une précision de 10^{-9} ou alors les 100 premiers avec 1000 décimales. Actuellement toute la communauté est convaincue que la conjecture est vraie, mais elle n'a toujours pas été démontrée.

Le lien entre la conjecture de Riemann et les matrices aléatoires est un sujet de recherche intensif depuis les années 1970. Par exemple en 1995, Bogomolny montre que les zéros se comportent asymptotiquement (ie. pour $\gamma_n \rightarrow \infty$) comme le spectre de GUE. La démonstration utilise la conjecture de Riemann et l'accord avec les données numériques est excellent.

Le parallèle avec les systèmes chaotiques est plus frappant encore grâce à l'analogie avec la formule de trace. En effet si on suppose que la conjecture de Riemann est vraie et que les γ_n sont bien réels, alors on peut s'intéresser à la densité de zéros non-triviaux

$$d(E) = \sum_n \delta(E - \gamma_n) = \bar{d}(E) + \tilde{d}(E) \quad (4.107)$$

Un calcul non trivial¹² conduit au terme lisse

$$\bar{d}(E) = \frac{1}{2\pi} \ln \frac{E}{2\pi} + \text{corrections} \quad (4.108)$$

et au terme oscillant

$$\tilde{d}(E) = -\frac{1}{\pi} \sum_p \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\ln p}{p^{m/2}} \cos(E m \ln p) \quad (4.109)$$

où la somme sur p porte sur tous les nombres premiers. Cette expression est très proche de la formule de trace pour un système chaotique : les nombres premiers sont l'équivalent des orbites périodiques et la longueur d'une orbite s'écrit $T = \ln p$. Noter le signe $-$ devant la somme.

11. Le livre de Titmarsh propose 7 méthodes différentes pour prolonger la fonction zeta de Riemann dans le plan complexe.

12. Cf. le cours des Houches de Bogomolny, *Quantum and arithmetical chaos*, ArXiv :nlin/0312061.

Conclusion : Les zéros non-triviaux de la fonction zeta de Riemann se comportent comme les énergies propres d'un système chaotique (ie. leurs fluctuations sont semblables à celles des valeurs propres de matrices aléatoires). On peut aussi écrire une formule de trace, comme pour un système chaotique, où les nombres premiers jouent le rôle des orbites périodes.

Annexe A

Annexe au chapitre 4

Les définitions et démonstrations rassemblées dans cette annexe sont particulièrement utiles pour la compréhension de la partie 4.2 sur la formule de trace.

A.1 Variables angle-action

En général, le hamiltonien d'un système est exprimé en fonction des variables conjuguées \vec{q} et \vec{p} , noté $H(\vec{q}, \vec{p})$. Les transformations canoniques permettent de passer à un autre jeu de variables en conservant les propriétés fondamentales de l'hamiltonien. En conséquences¹, les crochets de poisson ont la même valeur dans les deux jeux de variables et le jacobien correspondant au changement de variables vaut 1. Pour certains hamiltoniens, il est possible de trouver un jeu de variables particulier, appelé *variables angle-action* $(\vec{\phi}, \vec{I})$, tel que

$$\dot{I}_j = -\frac{\partial H}{\partial \phi_j} = 0 \quad \dot{\phi}_j = \frac{\partial H}{\partial I_j} = \omega_j \quad (\text{A.1})$$

ce qui signifie que le hamiltonien ne dépend que des variables d'action I_j et pas des variables de phase ϕ_j : $H = H(\vec{I})$. Les ω_j dépendent éventuellement des variables I_j . L'intégration temporelle du système (A.1) donne directement

$$I_j = I_j^0 = \text{constante} \quad \phi_j = \omega_j t + \phi_j^0 \quad (\text{A.2})$$

Les variables d'action I_j sont des constantes du mouvement, alors que les variables d'angle ϕ_j évoluent linéairement avec le temps. Alors on montre que les variables d'action peuvent s'écrire

$$I_j = \frac{1}{2\pi} \oint_{\mathcal{C}_j} \vec{p} \cdot d\vec{q} \quad (\text{A.3})$$

où le chemin d'intégration \mathcal{C}_j est une trajectoire fermée à énergie constante.

A.2 Méthode de la phase stationnaire

La méthode de la phase stationnaire (en anglais, saddle point approximation) conduit à une approximation efficace de l'intégrale

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} e^{if(x)/\hbar} dx \quad (\text{A.4})$$

1. Voir les démonstrations dans le chapitre 7 du livre de L. Landau et E. Lifchitz, *Physique théorique, tome 1, mécanique*.

où \hbar est un paramètre qui tend vers zero et f est une fonction raisonnablement lisse de la variable x à UNE dimension. L'idée générale est que l'exponentielle oscille très vite quand \hbar tend vers zero, ce qui conduit à une intégrale nulle, sauf au voisinage des valeurs de x où f est stationnaire (ie. à peu près constante). Pour commencer, nous considérons le cas où f admet un seul extremum en x_0 . Le calcul se généralise aisément à plusieurs extrema.

On développe f au voisinage de x_0 :

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2}(x - x_0)^2 + \dots$$

Comme f est extrémale en x_0 , alors $f'(x_0) = 0$. On va supposer que la convergence est rapide et que les termes avec les dérivées d'ordre supérieur à 2 sont négligeables². L'intégrale s'écrit alors :

$$A \simeq e^{if(x_0)/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{f''(x_0)}{2\hbar}(x-x_0)^2} dx \quad (\text{A.5})$$

Cette intégrale, appelée *intégrale de Fresnel*, se calcule comme une intégrale gaussienne

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{\alpha(x-x_0)^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

avec α imaginaire, ce qui conduit à

$$\boxed{A \simeq e^{if(x_0)/\hbar} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{if''(x_0)}}} \quad (\text{A.6})$$

Considérons maintenant le cas d'une intégrale à DEUX variables x et y :

$$B = \iint_{-\infty}^{\infty} e^{if(x,y)/\hbar} dx dy \quad (\text{A.7})$$

On développe f au voisinage de (x_0, y_0) qui est un extremum, c'est-à-dire que $\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial y} = 0$ en ce point :

$$f(x, y) = f(x_0, y_0) + \frac{a}{2}(x - x_0)^2 + \frac{b}{2}(y - y_0)^2 + \frac{c}{2}(x - x_0)(y - y_0) + \dots$$

où $a = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \Big|_{x_0, y_0}$, $b = \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \Big|_{x_0, y_0}$ et $c = \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \Big|_{x_0, y_0}$. De même que précédemment, on s'arrête à l'ordre 2 du développement. La matrice hessienne de f en (x_0, y_0) est notée

$$M = \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix}$$

Elle est symétrique réelle, donc diagonalisable avec valeurs propres réelles λ_u et λ_v . On se place dans cette base diagonale, notée (u, v) . Alors le développement de f s'écrit :

$$f(u, v) = f(x_0, y_0) + \frac{\lambda_u}{2}u^2 + \frac{\lambda_v}{2}v^2 + \dots$$

2. Dans la pratique, il faut vérifier au cas par cas la validité de cette hypothèse sur le calcul de l'intégrale.

En notant J , le jacobien de ce changement de variables, l'intégrale devient alors

$$B \simeq e^{if(x_0, y_0)/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |J| e^{i\frac{\lambda_u}{2\hbar} u^2} e^{i\frac{\lambda_v}{2\hbar} v^2} du dv \quad (\text{A.8})$$

Il faut souligner que la matrice M ne dépend pas des variables x et y . Donc la matrice de changement de bases non plus. Et on peut choisir les nouvelles variables u et v telles que le jacobien vaille 1.

On se retrouve alors avec un produit d'intégrales de Fresnel découplées :

$$\boxed{B \simeq e^{if(x_0, y_0)/\hbar} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{i\lambda_u}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{i\lambda_v}} = e^{if(x_0, y_0)/\hbar} 2\pi\hbar \frac{1}{\sqrt{i^2 \det(M)}}} \quad (\text{A.9})$$

La généralisation en dimension d conduit à

$$\int e^{if(\vec{r})/\hbar} d\vec{r} \simeq e^{if(\vec{r}_0)/\hbar} \left(\sqrt{2\pi\hbar}\right)^d \frac{1}{\sqrt{i^d \det(M)}} \quad (\text{A.10})$$

où M est la matrice hessienne de f calculée au point de phase stationnaire \vec{r}_0 , c'est-à-dire là où les dérivées premières de f s'annulent.

A.3 La fonction de Green

A.3.1 Définition

On s'intéresse à l'équation de Schrödinger

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (\text{A.11})$$

Dans sa version stationnaire, elle devient

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (\text{A.12})$$

Les fonctions propres ϕ_n d'énergie propre ϵ_n forment une base. La fonction de Green est définie par

$$\boxed{(E - \hat{H})G(\vec{r}, \vec{r}', E) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')} \quad (\text{A.13})$$

A.3.2 Expression avec les fonctions propres

De manière formelle, la fonction de Green peut s'écrire à partir des fonctions propres :

$$\boxed{G(\vec{r}, \vec{r}', E) = \sum_n \frac{\phi_n^*(\vec{r}) \phi_n(\vec{r}')}{E - \epsilon_n}} \quad (\text{A.14})$$

Vérifions que cette expression (A.14) est bien solution de l'équation de Schrödinger stationnaire (A.12). Il faut juste préciser que l'opérateur \hat{H} s'applique en \vec{r} et non

en \vec{r}' , ce qu'on note $\hat{H}_{\vec{r}}$.

$$(E - \hat{H}_{\vec{r}}) G(\vec{r}, \vec{r}', E) = (E - \hat{H}_{\vec{r}}) \sum_n \frac{\phi_n^*(\vec{r}) \phi_n(\vec{r}')}{E - \epsilon_n} \quad (\text{A.15})$$

$$= \sum_n \frac{(E - \hat{H}_{\vec{r}}) \phi_n^*(\vec{r}) \phi_n(\vec{r}')}{E - \epsilon_n} \quad (\text{A.16})$$

$$= \sum_n \frac{(E - \epsilon_n) \phi_n^*(\vec{r}) \phi_n(\vec{r}')}{E - \epsilon_n} \quad (\text{A.17})$$

$$= \sum_n \phi_n^*(\vec{r}) \phi_n(\vec{r}') \quad (\text{A.18})$$

$$= \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad CQFD \quad (\text{A.19})$$

A.3.3 Formule de trace

Dans ce paragraphe, nous allons démontrer que la densité d'états s'écrit bien comme la trace de la fonction de Green :

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E - \epsilon_n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int G(\vec{r}, \vec{r}) d\vec{r} \quad (\text{A.20})$$

Tout d'abord la distribution dirac est écrite comme la limite³

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \text{Im} \frac{1}{x + i\alpha} = -\pi \delta(x) \quad (\text{A.21})$$

Cette formule permet d'écrire la densité d'états :

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E - \epsilon_n) = -\frac{1}{\pi} \sum_n \lim_{\alpha \rightarrow 0} \text{Im} \frac{1}{E - \epsilon_n + i\alpha} \quad (\text{A.22})$$

En supposant que la limite, la somme et la partie imaginaire peuvent être permutées, on obtient :

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \text{Im} \sum_n \frac{1}{E - \epsilon_n + i\alpha} \quad (\text{A.23})$$

Comme les fonctions propres sont normalisées, $\int |\phi_n(\vec{r})|^2 d\vec{r} = 1$, on peut remplacer le 1 au numérateur par l'intégrale :

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \text{Im} \sum_n \frac{\int |\phi_n(\vec{r})|^2 d\vec{r}}{E - \epsilon_n + i\alpha} = -\frac{1}{\pi} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \text{Im} \int G(\vec{r}, \vec{r}') d\vec{r} \quad (\text{A.24})$$

où on a permuté les signes somme et intégrale et reconnu l'expression (A.14), ce qui donne bien la formule (A.20) à la limite près. Cette limite ne pose pas de problème particulier pour obtenir la formule de trace de Gutzwiller. Ici la fonction de Green est prise à l'énergie $E + i\alpha$.

3. Formule bien connue en théorie des distributions.

A.4 Le propagateur

Le propagateur $K(\vec{r}_1, t_1, \vec{r}_2, t_2)$ permet d'obtenir la fonction d'onde en (\vec{r}_2, t_2) , si elle est connue en (\vec{r}_1, t_1) :

$$\psi(\vec{r}_2, t_2) = \int d\vec{r}_1 K(\vec{r}_1, t_1, \vec{r}_2, t_2) \psi(\vec{r}_1, t_1) \quad (\text{A.25})$$

L'analogie à la formulation de Huygens en termes d'ondes secondaires utilisée pour la diffraction des ondes lumineuses est très bien argumentée dans le livre de Cohen-Tannoudji ... *Mécanique quantique, tome 1*, chapitre 3, complément J. Cette expression montre que K est la fonction d'onde en \vec{r}_2 à l'instant t_2 quand on a mis un dirac en \vec{r}_1 à l'instant t_1 .

Dans le livre de Cohen-Tannoudji et al., le propagateur est décrit en termes d'opérateurs :

$$K(\vec{r}_1, t_1, \vec{r}_2, t_2) = \langle \vec{r}_2 | \hat{U}(t_2 - t_1) | \vec{r}_1 \rangle \quad (\text{A.26})$$

où $|\vec{r}_1\rangle$ et $|\vec{r}_2\rangle$ sont les opérateurs de position et $\hat{U}(t_2 - t_1)$ est l'opérateur d'évolution. Dans ce cours, nous utilisons plutôt un formalisme à base de fonctions propres. Ainsi on peut décomposer la fonction d'onde sur cette base lorsqu'elle se trouve en \vec{r}_1 à l'instant t_1 :

$$\psi(\vec{r}_1, t_1) = \sum_n c_n \phi_n(\vec{r}_1) \quad (\text{A.27})$$

Chaque coefficient c_n correspond à la projection de la fonction d'onde ψ sur la fonction propre ϕ_n :

$$c_n = \int d\vec{r}_1 \phi_n^*(\vec{r}_1) \psi(\vec{r}_1, t_1) \quad (\text{A.28})$$

Les fonctions propres évoluent dans le temps selon

$$\phi_n(\vec{r}, t_2) = e^{-i\frac{\epsilon_n(t_2-t_1)}{\hbar}} \phi_n(\vec{r}, t_1) \quad (\text{A.29})$$

Donc pour faire évoluer la fonction d'onde ψ dans le temps, il suffit d'ajouter l'évolution temporelle à chaque ϕ_n dans la somme (A.27) :

$$\psi(\vec{r}, t_2) = \sum_n c_n e^{-i\frac{\epsilon_n(t_2-t_1)}{\hbar}} \phi_n(\vec{r}) \quad (\text{A.30})$$

On obtient ainsi l'expression recherchée en injectant la définition de c_n (A.28) :

$$\psi(\vec{r}_2, t_2) = \sum_n \int d\vec{r}_1 \phi_n^*(\vec{r}_1) \psi(\vec{r}_1, t_1) e^{-i\frac{\epsilon_n(t_2-t_1)}{\hbar}} \phi_n(\vec{r}_2) \quad (\text{A.31})$$

$$= \int d\vec{r}_1 \sum_n \phi_n^*(\vec{r}_1) e^{-i\frac{\epsilon_n(t_2-t_1)}{\hbar}} \phi_n(\vec{r}_2) \psi(\vec{r}_1, t_1) \quad (\text{A.32})$$

Si on suppose qu'on peut permuter la somme et l'intégrale entre (A.31) et (A.32), alors on obtient l'expression suivante pour le propagateur :

$$K(\vec{r}_1, t_1, \vec{r}_2, t_2) = \sum_n \phi_n^*(\vec{r}_1) e^{-i\frac{\epsilon_n(t_2-t_1)}{\hbar}} \phi_n(\vec{r}_2) \quad (\text{A.33})$$

Nous allons maintenant montrer que la fonction de Green est plus ou moins la transformée de Fourier temporelle du propagateur. Tout d'abord, il faut se convaincre que nous avons supposé $t = t_2 - t_1 > 0$. On s'intéresse à l'intégrale

$$I = -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt e^{i\frac{Et}{\hbar}} K(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \quad (\text{A.34})$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt e^{i\frac{Et}{\hbar}} \sum_n \phi_n^*(\vec{r}_1) e^{-i\frac{\epsilon_n t}{\hbar}} \phi_n(\vec{r}_2) \quad (\text{A.35})$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \sum_n \phi_n^*(\vec{r}_1) \phi_n(\vec{r}_2) \int_0^\infty dt e^{i\frac{Et}{\hbar}} e^{-i\frac{\epsilon_n t}{\hbar}} \quad (\text{A.36})$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \sum_n \phi_n^*(\vec{r}_1) \phi_n(\vec{r}_2) \frac{i\hbar}{E - \epsilon_n} \quad (\text{A.37})$$

$$= \sum_n \frac{\phi_n^*(\vec{r}_1) \phi_n(\vec{r}_2)}{E - \epsilon_n} \quad (\text{A.38})$$

On retrouve exactement l'expression (A.14) de la fonction de Green qui est donc bien la transformée de Fourier temporelle du propagateur (à un facteur près et en ne considérant que les temps positifs) :

$$\boxed{G(\vec{r}_1, \vec{r}_2, E) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt e^{i\frac{Et}{\hbar}} K(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)} \quad (\text{A.39})$$