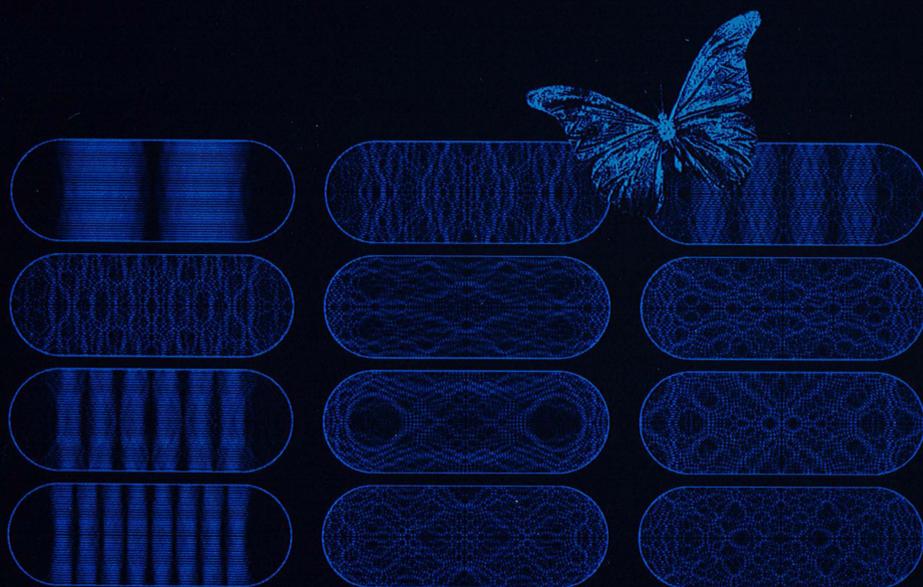


Pascale Harinck, Alain Plagne & Claude Sabbah

Comité éditorial

Chaos en mécanique quantique



Chaos en mécanique quantique





Ce logo a pour objet d'alerter le lecteur sur la menace que représente pour l'avenir de l'écrit, tout particulièrement dans le domaine universitaire, le développement massif du « photocopillage ».

Cette pratique qui s'est généralisée, notamment dans les établissements d'enseignement, provoque une baisse brutale des achats de livres, au point que la possibilité même pour les auteurs de créer des œuvres nouvelles et de les faire éditer correctement est aujourd'hui menacée. Nous rappelons donc que la production et la vente sans autorisation, ainsi que le recel, sont passibles de poursuites.

Les demandes d'autorisation de photocopier doivent être adressées à l'éditeur ou au Centre français d'exploitation du droit de copie :

20, rue des Grands-Augustins, 75006 Paris. Tél. : 01 44 07 47 70.

Déjà parus

Aléatoire. Textes de Sylvie Méléard, Christophe Giraud, Djilil Chafai Année 2013. 130 pages.

ISBN 978-2-7302-1622-7

Henri Cartan & André Weil. Textes de Michèle Audin, Marc Hindry, Jean-Pierre Demailly, Isabelle Broué Année 2012. 188 pages. ISBN 978-2-7302-1610-4

Histoire de mathématiques. Textes de Yves André, Jean-Pierre Kahane, Patrick Popescu-Pampu. Année 2011. 208 pages. ISBN 978-2-7302-1595-4

Facettes mathématiques de la mécanique des fluides. Textes de Jean-Yves Chemin, Isabelle Gallagher, David Gérard-Varet. Année 2010. 118 pages. ISBN 978-2-7302-1578-7

Les représentations linéaires et le grand théorème de Fermat. Textes de Guy Henniart, Martin Andler, Corinne Blondel. Année 2009. 140 pages. ISBN 978-2-7302-1566-4

Géométrie tropicale. Textes de Ilia Itenberg, Erwan Brugallé, Bernard Teissier. Année 2008. 122 pages. ISBN 978-2-7302-1529-9

Sur la dynamique des groupes des matrices et applications numériques. Textes de Françoise Dal'bo, Frédéric Paulin, Gilles Courtois. Année 2007. 158 pages. ISBN 978-2-7302-1418-6

Théorie des jeux. Introduction à la théorie des jeux répétés. Textes de Rida Laraki, Jérôme Renault et Tristan Tomala. Année 2006. 152 pages. ISBN 978-2-7302-1366-0

Théorie algorithmique des nombres et équations diophantiennes. Textes de Henri Cohen, Karim Belabas, Guillaume Hanrot. Année 2005. 200 pages. ISBN 2-7302-1293-0

Graphes. Textes de Bruno Courcelle, Yves Colin de Verdière & Alexander Zvonkin Année 2004. 84 pages. ISBN 2-7302-1182-9

Distributions, dans le sillage de Laurent Schwartz. Textes de Bernard Malgrange, Jean-Michel Bony & Claude Sabbah. Année 2003. 108 pages. ISBN 2-7302-1095-4

La fonction zêta. Textes de Jean-Benoît Bost, Pierre Colmez & Philippe Biane. Année 2002. 204 pages. ISBN 2-7302-1011-3

Pavages. Textes d'Yves Benoist, François Labourie, Jean-René Geoffroy & Richard Kenyon. Année 2001. 112 pages. ISBN 2-7302-0855-0

Groupes finis. Textes d'Anne-Marie Aubert, Michel Broué & Jean Michel. Année 2000. 104 pages. ISBN 2-7302-0751-5

Aspects de la théorie du contrôle. Textes de Philippe Martin & Pierre Rouchon, Jean-Michel Coron, Jean-Pierre Puel. Année 1999. 208 pages. ISBN 978-2-7302-1530-5

Aspects des systèmes dynamiques. Textes de François Laudenbach, Albert Fathi, Patrick Foulon, Pierre Arnoux, Martine Queffelec, Adrien Douady, Patrice Le Calvez, Vladimir I. Arnold. Année 1994-1996. 238 pages. ISBN 978-2-7302-1560-2

TABLE DES MATIÈRES

Préface	v
FRÉDÉRIC FAURE — <i>Introduction au chaos classique et au chaos quantique</i>	1
Introduction.....	1
1. Mécanique classique et mécanique quantique.....	3
2. Chaos en mécanique classique.....	26
3. Chaos quantique.....	39
Références.....	50
Index.....	52
CLOTILDE FERMANIAN KAMMERER — <i>Opérateurs pseudo-différentiels semi-classiques</i>	53
Introduction.....	53
1. Opérateurs pseudo-différentiels semi-classiques sur \mathbb{R}^d	60
2. Action sur $L^2(\mathbb{R}^d)$	64
3. Premières propriétés des opérateurs pseudo-différentiel....	68
4. Calcul symbolique.....	72
5. Opérateurs pseudo-différentiels sur une variété.....	88
6. Opérateurs pseudo-différentiels sur le tore.....	93
Références.....	99
NALINI ANANTHARAMAN — <i>Le théorème d'ergodicité quantique</i> 101	
1. Une version du théorème d'ergodicité quantique pour les tores plats	103
2. Fonctions propres de la sphère ronde	116
3. Ergodicité quantique sur les variétés riemanniennes.....	122
4. La conjecture d'unique ergodicité quantique.....	136
Références.....	145

PRÉFACE

En mécanique classique, les trajectoires issues de lois déterministes mais possédant une forte sensibilité aux conditions initiales semblent imprévisibles : *Frédéric Faure* présente ainsi le chaos déterministe, déjà observé par Henri Poincaré à la fin du XIX^e siècle. Mélange et ergodicité en sont deux propriétés essentielles.

Le formalisme de la mécanique quantique découvert au début du XX^e siècle décrit la matière par des ondes qui évoluent selon l'équation de Schrödinger, et les paquets d'ondes sont assimilable à des particules. Cette nouvelle description de la physique apparaît à première vue comme une rupture. Mais *Clotilde Fermanian Kammerer* explicite le passage de la mécanique classique à la mécanique quantique avec les formules de quantification et l'utilisation du calcul symbolique pour les opérateurs, aboutissant à une correspondance entre les évolutions dynamiques des ondes et des particules.

Le chaos quantique concerne la dynamique des ondes quantiques dans un système dont les particules suivent une dynamique classique chaotique. *Nalini Anantharaman* interprète ce chaos quantique comme une délocalisation complète des fonctions d'ondes stationnaires : c'est le théorème d'ergodicité quantique, qu'elle met en relation avec des travaux qui ont valu la médaille Fields à E. Lindenstrauss en 2010.

Nous tenons à remercier la direction de l'École polytechnique, la Direction des Services de l'Enseignement et le Centre Poly-Média, pour l'aide matérielle importante qu'ils ont apportée à la préparation

de ces journées et à la publication de ce volume. Nous remercions aussi le secrétariat du Centre de Mathématiques Laurent Schwartz, notamment Carole Juppín et Marine Amier, qui assure chaque année le bon déroulement des journées.

Pascale Harinck, Alain Plagne et Claude Sabbah

INTRODUCTION AU CHAOS CLASSIQUE ET AU CHAOS QUANTIQUE

par

Frédéric Faure

Introduction

La théorie de la mécanique quantique a été découverte par Heisenberg, Schrödinger et d'autres au début du xx^e siècle. Elle décrit la matière par des *ondes de matière* qui évoluent selon l'*équation de Schrödinger*. Ces ondes ont une signification probabiliste en physique. Auparavant, les constituants de la matière étaient décrits par les équations de la *mécanique classique* (Newton 1686, Hamilton 1833) qui sont des lois déterministes pour les trajectoires des particules. Dans la partie 1 nous proposons une brève introduction aux idées et au formalisme de la *mécanique classique* et de la *mécanique quantique*. Nous expliquerons le passage entre les descriptions classique et quantique en terme de paquet d'onde, assimilable à une particule et avec le *principe de correspondance* qui se formalise avec le théorème d'Egorov. Nous présenterons des exemples simples de dynamique qui serviront dans les textes suivants de ce volume, que sont la particule libre sur le cercle, sur le tore T^2 , dans un billard et sur une surface à courbure négative. Dans tous ces cas, l'opérateur de Schrödinger est le laplacien.

Dans la partie 2, nous présentons la problématique du chaos déterministe et l'approche mathématique pour l'aborder. Depuis les travaux d'Henri Poincaré (1892) et ensuite Birkhoff, puis Anosov (1967), Ruelle, etc., il est apparu que les trajectoires issues de lois déterministes mais possédant une *forte sensibilité aux conditions initiales*

semblent imprévisibles et qu'il y a des propriétés aléatoires émergentes. On parle de *chaos déterministe en mécanique classique*. Nous présenterons un modèle assez concret de dynamique chaotique que sont les *billards dispersifs*. Nous établirons les propriétés mathématiques du chaos (mélange et ergodicité) sur un modèle similaire mais plus simple, appelé *application du chat d'Arnold*.

Finalement la partie 3 porte sur la problématique du chaos quantique, qui est d'étudier la dynamique des ondes quantiques dans un système dont la dynamique classique associée est chaotique comme décrit précédemment. Plus précisément on souhaite comprendre l'évolution des ondes mais aussi la structure et la répartition spatiale des ondes stationnaires. Nous poserons ces questions en montrant quelques exemples numériques intrigants qui serviront à introduire les textes suivants de ce volume. Par exemple le *théorème d'ergodicité quantique* (1974) établit que, lorsque la dynamique classique est ergodique, presque toutes les ondes quantiques stationnaires sont équi-réparties sur l'espace. De façon conjecturale mais très utile en physique, la *conjecture des matrices aléatoires* stipule que les valeurs propres de l'opérateur de Schrödinger (c'est-à-dire les niveaux d'énergie) sont disposés à petite échelle comme aléatoirement et satisfont aux mêmes statistiques que les valeurs propres d'une matrice symétrique aléatoire.

Quelques articles de présentation du sujet

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

1. Mécanique classique et mécanique quantique

1.1. Mécanique classique

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

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

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

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

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

Définition 1.1 (loi de Newton 1687). La trajectoire d'une particule de masse $m > 0$ et soumise à une *force* $F(x, t) \in \mathbb{R}^d$ est déterminée par l'équation différentielle ordinaire :

$$(1) \quad m \frac{d^2x}{dt^2} = F(x, t),$$

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

Remarque 1.2. D'après le théorème de Cauchy-Lipschitz [Tay11a], il existe une solution unique à (1) si F est une fonction lipschitzienne.

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

Définition 1.3. On supposera dans tout cet exposé que $F(x, t)$ est une *force potentielle* c'est-à-dire qu'elle peut s'écrire sous la forme particulière⁽¹⁾ :

$$(2) \quad F = -\left(\frac{\partial V}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial V}{\partial x_d}\right) =: -\frac{\partial V}{\partial x},$$

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

$$(3) \quad \xi := m \frac{dx}{dt} \in \mathbb{R}^d$$

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

$$(4) \quad H(x, \xi, t) := \frac{1}{2m} |\xi|^2 + V(x, t) \in \mathbb{R}$$

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

Proposition 1.4 (équations de Hamilton, 1833). Les équations de Newton (1) peuvent s'écrire sous la forme⁽²⁾ :

$$(5) \quad \frac{dx(t)}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \xi}, \quad \frac{d\xi(t)}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x},$$

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

Démonstration. On calcule :

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial \xi} &\stackrel{(4)}{=} \frac{1}{m} \xi \stackrel{(3)}{=} \frac{dx}{dt}, \\ -\frac{\partial H}{\partial x} &\stackrel{(4)}{=} -\frac{\partial V}{\partial x} \stackrel{(2)}{=} F \stackrel{(1)}{=} m \frac{d^2 x}{dt^2} \stackrel{(3)}{=} \frac{d\xi}{dt}. \quad \square \end{aligned}$$

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

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

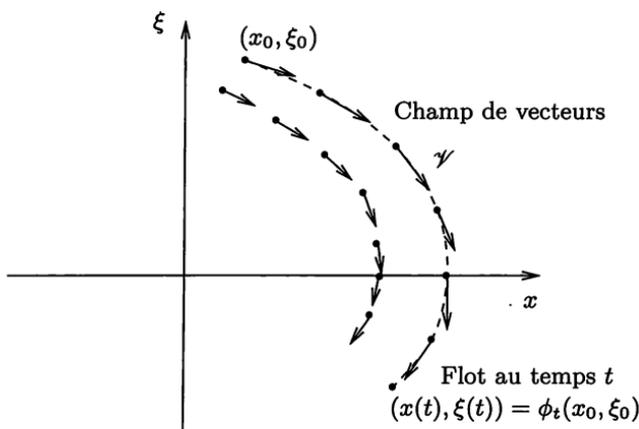


FIGURE 1. Champ de vecteurs de Hamilton \mathcal{V} et flot hamiltonien ϕ_t dans l'espace des phases.

Remarque 1.5. Nous ferons un commentaire dans la remarque 1.17 sur l'aspect antisymétrique assez particulier des équations de Hamilton (5) qui, d'une certaine façon, laisse déjà entrevoir la mécanique quantique ondulatoire. En 1833 Hamilton a utilisé au départ ces équations pour exprimer l'optique géométrique des rayons, qui n'est qu'une approximation de l'optique ondulatoire [GS77]. Nous verrons de façon analogue que la mécanique classique est une approximation de la mécanique quantique ondulatoire.

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

Exemple 1.6 (le problème à deux corps). C'est un système intégrable d'importance historique car c'est par lui que Newton a écrit l'équation (1) en 1687. À l'échelle du système solaire, on peut considérer la Terre comme un point de masse $m = 6 \cdot 10^{24}$ kg à la position $x \in \mathbb{R}^3$

soumise à la force d'attraction gravitationnelle de la part du Soleil (situé en $x = 0$) :

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

avec $u = x/|x|$ vecteur unitaire et $C = \mathcal{G} \cdot m \cdot m_S$ avec la masse du Soleil $m_S = 2 \cdot 10^{30}$ kg et la constante de gravitation universelle $\mathcal{G} = 6,67 \cdot 10^{-11}$ N.m².kg⁻². Cette force dérive de l'énergie potentielle

$$(6) \quad V(x) = -C \frac{1}{|x|}.$$

L'équation du mouvement obtenue est

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{1}{m} F(x) = -\mathcal{G} \cdot m_S \frac{u}{|x|^2}.$$

Remarquer que curieusement la masse de la Terre n'y intervient pas. Cela signifie que par exemple une poussière (ayant une autre masse) qui serait à la place de la Terre (même position et même vitesse) aurait la même trajectoire autour du Soleil. Cette remarque, appelée *principe d'équivalence*, a conduit Einstein à la théorie de la relativité où la gravitation n'est plus une force mais découle de la géométrie de l'espace temps.

De façon analogue mais à une toute autre échelle, dans un atome d'hydrogène, un électron de masse $m = 9,31 \cdot 10^{-31}$ kg est soumis à la *force de Coulomb* de la part du proton

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

avec $C' = k_C q \cdot q$ où $q = 1,6 \cdot 10^{-19}$ C est la charge élémentaire de l'électron et du proton et $k_C = 9 \cdot 10^9$ N.m²C⁻² est la constante de Coulomb.

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

Exemple 1.7 (puits de potentiel, oscillateur harmonique)

À une dimension $d = 1$ on s'intéresse à une particule près d'un minimum local de l'énergie potentielle $V(x)$ que l'on suppose en $x = 0$

avec $V(0) = 0$. Par développement de Taylor, on écrit :

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

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

$$(7) \quad H(x, \xi) = \frac{1}{2m}\xi^2 + \frac{1}{2}kx^2$$

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

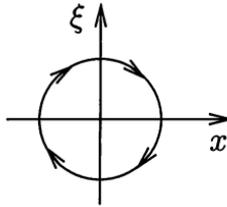


FIGURE 2. Une trajectoire de l'oscillateur harmonique dans l'espace des phases. La position $x(t)$ et la vitesse $v(t) = \frac{1}{m}\xi(t)$ oscillent en quadrature.

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

La position d'une particule sur le cercle est $x \in S^1 := \mathbb{R}/\mathbb{Z}$ (c'est-à-dire définie modulo les entiers). L'espace des phases $(x, \xi) \in S^1 \times \mathbb{R}$ est un cylindre. On dit qu'une particule est *libre* si $V = 0$, car il n'y a pas de force. Ainsi (en prenant $m = 1$) on a le hamiltonien $H(x, \xi) = \frac{1}{2}|\xi|^2$. Les équations de Hamilton (5) donnent

$$(8) \quad \frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \xi} = \xi, \quad \frac{d\xi}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} = 0.$$

La solution est

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

Ainsi la particule se déplace sur le cercle S^1 à vitesse constante ξ_0 qui dépend de la condition initiale.

⁽³⁾Avec le changement de variables $X := \sqrt{(k/2)}x$, $Y := \xi/\sqrt{2m}$ et posant $\omega := \sqrt{k/m}$, $Z = X + iY$, (5) se traduit par $dZ/dt = -i\omega Z$, qui donne le mouvement de rotation $Z(t) = Z(0)e^{-i\omega t}$.

Le tore $\mathbb{T}^d = S^1 \times \cdots \times S^1 = \mathbb{R}^d / \mathbb{Z}^d$ est un produit de d cercles, avec des coordonnées $(x_1, \dots, x_d) \in \mathbb{R}^d / \mathbb{Z}^d$. On obtient de même le mouvement à vitesse constante $x(t) = \xi_0 \cdot t + x_0$ avec $\xi_0 \in \mathbb{R}^d$. Voir figure 3. En dimension $d = 1$, il est clair que si $\xi_0 \neq 0$, la trajectoire recouvre tout le cercle S^1 de façon uniforme. En dimension $d \geq 2$ on peut se demander quelle partie de l'espace \mathbb{T}^d occupe une trajectoire. Voici un résultat. Avant cela, on dit que $\xi_0 \in \mathbb{R}^d$ est un *vecteur irrationnel* si, pour $k \in \mathbb{Z}^d$, $\xi_0 \cdot k = 0 \Rightarrow k = 0$. En dimension $d = 2$, cela signifie que $\frac{(\xi_0)_1}{(\xi_0)_0} \notin \mathbb{Q}$ (pente irrationnelle). En dimension quelconque cela signifie que l'hyperplan $\xi_0^\perp := \{k \in \mathbb{Z}^d \mid \xi_0 \cdot k = 0\}$ n'intersecte le réseau \mathbb{Z}^d qu'en $k = 0$.

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

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

$$(9) \quad \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T a(\xi_0 \cdot t + x_0) dt = \int_{\mathbb{T}^d} a(x) dx,$$

c'est-à-dire la moyenne temporelle de a sur une trajectoire très longue devient égale à sa moyenne spatiale.

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

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

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

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

Voici une application de l'unique ergodicité.

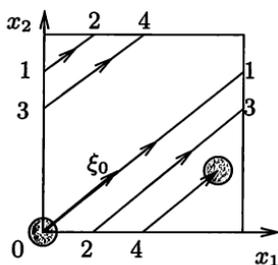


FIGURE 3. Une trajectoire sur le tore $\mathbb{T}^2 = \mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2$ illustrant le théorème 1.9. Les numéros successifs représentent les points identifiés par les conditions périodiques. Si la pente de ξ_0 est irrationnelle alors la trajectoire est dense et même ergodique, sinon la trajectoire est périodique. Cependant un nuage de points (ici un disque) garde sa forme en se traduisant : la dynamique n'est pas mélangeante.

Corollaire 1.10 (loi de Benford). Soit $k_n \in \{1, 2, \dots, 9\}$ le premier chiffre de $u_n = 2^n$ en base 10. On a $u_n = 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64, 128, 256, \dots$ donc

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

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

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

Démonstration. Dans un premier temps, comme dans le théorème 1.9, on montre que si $\alpha \notin \mathbb{Q}$ et $x_0 \in \mathbb{R}$ alors la suite $x_n = n\alpha + x_0 \pmod{1} \in [0, 1[$, $n \in \mathbb{N}$, est *uniquement ergodique* c'est-à-dire que pour toute fonction $a \in C^0([0, 1[)$,

$$(10) \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N a(x_n) = \int a(x) dx.$$

En considérant un intervalle $I \subset [0, 1]$ de longueur $|I|$, et la *fonction caractéristique* $a(x) = 1$ si $x \in I$, $a(x) = 0$ sinon (en fait on considère une suite de fonctions continues qui approchent a), on a

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

donc (10) s'écrit simplement $\text{proba}(I) := \frac{1}{N} \text{card} \{n \leq N \mid x_n \in I\} = |I|$.

Dans un deuxième temps, on considère la suite $u_n = 2^n = 2 \times u_{n-1}$ avec $u_0 = 1$. Par définition de k_n , on a $k_n 10^r \leq u_n < (k_n + 1)10^r$ avec $r \in \mathbb{N}$. Soit $x_n := \frac{\log u_n}{\log 10} \bmod 1$. Alors $x_{n+1} = x_n + \alpha \bmod 1$ avec⁽⁴⁾

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

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

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

Exemple 1.11 (particule libre sur une surface, géodésiques)

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

$$(11) \quad P_x \frac{dv}{dt} = 0$$

avec la vitesse $v = dx/dt \in \mathbb{R}^3$ et $P_x : \mathbb{R}^3 \rightarrow T_x \mathcal{S}$ le projecteur orthogonal sur le plan tangent à la surface au point x . Voir figure 4(a). En terme géométriques on note $Dv/dt = 0$, et $D := Pd$ s'appelle la *dérivée covariante* ou *connexion de Levi-Civita*. L'absence de force tangentielle fait que la particule va « le plus droit possible » en restant sur la surface. Par définition, on dit que sa trajectoire est une *géodésique*⁽⁵⁾. Par exemple sur la sphère $S^2 \subset \mathbb{R}^3$ les géodésiques sont les grands cercles. Sur une surface plate (ou dans l'espace euclidien \mathbb{R}^d), les géodésiques sont des droites. On peut montrer [Tay11a, Tay11b] que

• [Tay11a, p. 52] L'équation (11) a une unique solution $x(t) \in \mathcal{S}$ qui de plus est solution des équations de Hamilton (5) avec le hamiltonien $H(x, \xi) = \frac{1}{2} \|\xi\|_{T_x^* \mathcal{S}}^2$ d'une particule libre, qui fait apparaître la norme du vecteur cotangent $\xi \in T_x^* \mathcal{S}$. Comme cette formulation est intrinsèque et géométrique (c'est-à-dire invariante par changement de coordonnées) elle s'adapte au cas des variétés riemanniennes, pour

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

⁽⁵⁾Essayer de se convaincre et de démontrer que si l'on colle sans pli un ruban de scotch (étroit) sur une surface alors il suit une géodésique.

lesquelles chaque espace (co-)tangent est muni d'un produit scalaire. L'espace des phases est ici le fibré cotangent $T^*\mathcal{S}$, qui est une variété de dimension $2 \dim \mathcal{S} = 4$.

• [Tay11a, p.47] Si $A = x(0)$ et $B = x(t)$ sont deux points de la même géodésique, alors parmi tous les chemins paramétrés $\gamma : t \mapsto x(t)$ qui joignent A et B au temps t , la géodésique est un extremum local pour la *fonctionnelle énergie* $\mathcal{E}(\gamma) := \int_0^t \frac{1}{2} \left\| \frac{dx}{dt} \right\|^2 dt$ et pour la *fonctionnelle longueur* $l(\gamma) := \int_0^t \left\| \frac{dx}{dt} \right\| dt$ (noter que $l(\gamma)$ est indépendant du paramétrage).

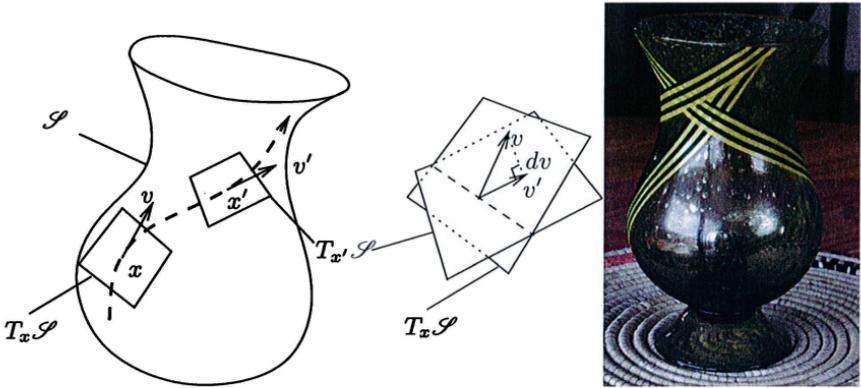


FIGURE 4. (a) Géodésique sur une surface \mathcal{S} : le vecteur vitesse $v(t) = \frac{dx}{dt}$ est solution de $P_x \frac{dv}{dt} = 0$ où P_x est le projecteur orthogonal sur le plan tangent $T_x \mathcal{S}$ au point x . (b) En pratique une géodésique est obtenue en collant un ruban de scotch « de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

1.1.c. Flot hamiltonien et crochets de Poisson. Nous précisons quelques aspects de la dynamique hamiltonienne qui seront utiles plus tard. Pour simplifier l'exposé, nous supposons que pour toutes conditions initiales données $(x(0), \xi(0)) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ la solution $(x(t), \xi(t)) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ de (5) existe et est unique pour tout $t \in \mathbb{R}$ (le théorème de Cauchy-Lipschitz garantit cela localement en temps si V est lipschitzienne).

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

$$(12) \quad \phi_t : \begin{cases} \mathbb{R}^{2d} & \longrightarrow \mathbb{R}^{2d} \\ (x(0), \xi(0)) & \longmapsto (x(t), \xi(t)) \end{cases}$$

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

Théorème 1.13 (de Liouville). *Le flot hamiltonien ϕ_t préserve le volume $dx d\xi$ dans l'espace des phases \mathbb{R}^{2d} .*

Démonstration. Autrement dit, il faut montrer que le champ de vecteur $\mathcal{V} = (\frac{\partial H}{\partial \xi}, -\frac{\partial H}{\partial x})$ défini en (5) est de divergence nulle :

$$\operatorname{div}(\mathcal{V}) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial H}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(-\frac{\partial H}{\partial x} \right) \stackrel{(5)}{=} 0. \quad \square$$

Proposition 1.14 (conservation de l'énergie). *Si la fonction H est indépendante de t (c'est-à-dire H est seulement fonction de (x, ξ)) alors la valeur $E = H(x(t), \xi(t))$ appelée énergie est constante le long d'une trajectoire.*

Démonstration. On écrit :

$$\frac{dH(x(t), \xi(t))}{dt} = \left(\frac{\partial H}{\partial x} \right) \frac{dx}{dt} + \left(\frac{\partial H}{\partial \xi} \right) \frac{d\xi}{dt} \stackrel{(5)}{=} \left(-\frac{d\xi}{dt} \right) \frac{dx}{dt} + \left(\frac{dx}{dt} \right) \frac{d\xi}{dt} = 0.$$

\square

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

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

$$(13) \quad \mathcal{L}_t : \begin{cases} C^\infty(\mathbb{R}^{2d}) & \longrightarrow C^\infty(\mathbb{R}^{2d}) \\ f & \longmapsto \mathcal{L}_t f := f \circ \phi_{-t}. \end{cases}$$

Remarquons qu'en utilisant le théorème de Liouville 1.13, la probabilité totale est conservée :

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

Proposition 1.16. *Pour toute fonction $f \in C^\infty(\mathbb{R}^{2d})$, l'évolution infinitésimale est donnée par*

$$(14) \quad \frac{d(\mathcal{L}_t f)}{dt} = \{H, f\},$$

où

$$(15) \quad \{H, f\} := \frac{\partial H}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial \xi} - \frac{\partial H}{\partial \xi} \frac{\partial f}{\partial x},$$

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

Démonstration. On calcule :

$$\begin{aligned} \frac{d(\mathcal{L}_t f)}{dt} &\stackrel{(13)}{=} \frac{d(f \circ \phi_{-t})}{dt} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{d(\phi_{-t})_x}{dt} + \frac{\partial f}{\partial \xi} \frac{d(\phi_{-t})_\xi}{dt} \\ &\stackrel{(12)}{=} \frac{\partial f}{\partial x} \left(-\frac{dx}{dt} \right) + \frac{\partial f}{\partial \xi} \left(-\frac{d\xi}{dt} \right) \\ &\stackrel{(5)}{=} \frac{\partial f}{\partial x} \left(-\frac{\partial H}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial f}{\partial \xi} \left(-\left(-\frac{\partial H}{\partial x} \right) \right) = \{H, f\}. \quad \square \end{aligned}$$

Remarque 1.17. Le formalisme de la mécanique classique hamiltonienne qui vient d'être esquissé possède une formulation en géométrie différentielle très intéressante et très utile appelée *géométrie symplectique*. Nous renvoyons à [Arn76] [Tay11a, Sec1.14] pour une introduction proche de la physique et [Can01, MS98, GS90, GS77] pour plus d'approfondissements. Le point de départ de cette approche est que les équations de Hamilton (5) sur \mathbb{R}^{2d} peuvent s'exprimer de façon géométrique, c'est-à-dire indépendamment du système de coordonnées, de la façon suivante. On introduit la 2-forme $\omega := \sum_{j=1}^d dx^j \wedge d\xi^j$ sur \mathbb{R}^{2d} appelée *forme symplectique*. Alors le champ de vecteur de Hamilton \mathcal{V} est déterminé par l'équation

$$(16) \quad \omega(\mathcal{V}, \bullet) = dH,$$

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

Démonstration. En coordonnées on note

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

Alors d'une part

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

et d'autre part

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

L'identité (16)) donne bien $\mathcal{V}_{x,j} = \partial H / \partial \xi^j$ et $-\mathcal{V}_{\xi,j} = \partial H / \partial x^j$ qui sont les équations de Hamilton (5). \square

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

1.2. Mécanique quantique

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

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

$$(17) \quad i\hbar \frac{\partial \psi_t}{\partial t} = \text{Op}_\hbar(H)\psi_t$$

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

$$(18) \quad \text{Op}_\hbar(H) := \frac{1}{2m} |\text{Op}_\hbar(\xi)|^2 + V(x),$$

avec

$$(19) \quad \text{Op}_\hbar(\xi) = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_d} \right) =: -i\hbar \frac{\partial}{\partial x},$$

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

Dans (18), on a utilisé la notation de *produit scalaire d'opérateurs vectoriels* :

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

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

$$(20) \quad (\text{Op}_\hbar(H)\psi)(x) = \frac{1}{2m} (-\hbar^2 \Delta \psi)(x) + V(x)\psi(x), \quad \Delta \psi := \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i^2}.$$

Noter que $\text{Op}_\hbar(H)$ se déduit du hamiltonien classique H défini par l'équation (4) en substituant la variable impulsion ξ par l'opérateur impulsion $\text{Op}_\hbar(\xi)$. Cela s'appelle le *principe de correspondance* que l'on discutera par la suite.

Remarque 1.19. L'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$ est muni du produit scalaire L^2 défini pour $\psi, \varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ par :

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

donnant la norme (carré)

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

Pour la suite, il sera important de remarquer que (pour certaines fonctions V) sur cet espace fonctionnel $L^2(\mathbb{R}^3)$, l'opérateur $\text{Op}_\hbar(H)$

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

⁽⁷⁾ Dans les ouvrages de physique il est habituel de noter $\hat{H} = \text{Op}_\hbar(H)$.

est essentiellement auto-adjoint [RS78, HS96] et que l'équation de Schrödinger (17) admet une solution que l'on peut écrire⁽⁸⁾ :

$$(21) \quad \psi_t = U(t)\psi_0, \quad U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\text{Op}_{\hbar}(H)\right).$$

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

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

Présenté ainsi, le principe de correspondance paraît être un « jeu d'écriture » et on ne comprends pas quel rapport il peut y avoir entre la mécanique classique et la mécanique quantique à part ce « jeu d'écriture ». Pour justifier plus cela, nous montrerons plus loin avec la quantification de Weyl et le théorème d'Egorov que les ondes quantiques régies par l'équation de Schrödinger se déplacent approximativement comme des particules régies par les équations de Hamilton classiques. Cette approximation est d'autant plus valable que l'on observe les ondes à grande échelle (par rapport aux échelles atomiques où $\hbar \simeq 1$). En physique, la petite valeur de \hbar à l'échelle humaine explique qu'il ait fallu attendre le XX^e siècle pour découvrir les effets subtils de la mécanique quantique qui se manifestent à l'échelle des atomes. En mathématique cette correspondance classique-quantique s'appelle l'*analyse semi-classique* ou *analyse micro-locale* [Zwo12, Tay11b, chap. 7]. Voir la page web [Fau] pour des animations commentées d'ondes quantiques.

1.2.b. Signification physique et probabiliste de la fonction d'onde $\psi(x)$ [BJ89]. En physique, la fonction d'onde $\psi(x)$ a une signification probabiliste : si une même expérience est répétée un grand nombre de fois et produit une particule toujours dans le même état décrit par la fonction $\psi(x)$ alors cela signifie que la probabilité de détecter expérimentalement la particule dans le domaine $U \subset \mathbb{R}^3$ de l'espace est :

$$(22) \quad P(U) = \frac{1}{\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}} \int_U |\psi(x)|^2 dx,$$

⁽⁸⁾En effet en dérivant (21) par rapport à t , on retrouve (17).

avec la constante de normalisation $\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} := (\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 dx)^{1/2}$. Autrement dit la densité de probabilité est $\frac{1}{\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}} |\psi(x)|^2 dx$. Noter que grâce au préfacteur $1/\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}$, et comme attendu, la probabilité sur tout l'espace est $P(\mathbb{R}^3) = 1$. Notons aussi que le résultat $P(U)$ est inchangé si on modifie $\psi \rightarrow \lambda\psi$ avec $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$. Cette invariance est aussi vraie pour l'équation d'évolution (17) qui est linéaire. Donc il est plus pratique de supposer que les fonctions d'ondes sont normalisées, c'est-à-dire $\|\psi\|_{L^2}^2 = \langle \psi | \psi \rangle = 1$, ce que l'on fera dans la suite.

Ce résultat étonnant (22) (appelé *principe de la mesure*) montre que pour une unique expérience, la théorie quantique ne prédit rien. Elle ne peut prédire que des moyennes sur des grands nombres. En physique, on parle de *hasard quantique intrinsèque*. Par exemple la position moyenne de la particule $\langle x \rangle \in \mathbb{R}^3$ est donnée par

$$(23) \quad \langle x \rangle := \int x |\psi(x)|^2 dx = \langle \psi | x \psi \rangle.$$

Dans ce principe de la mesure il est aussi postulé qu'après une mesure où la particule a été détectée dans un domaine $U \subset \mathbb{R}^3$, alors la nouvelle fonction d'onde est supportée sur U . Cela s'appelle le *collapse de la fonction d'onde* ou *réduction du paquet d'onde*.

La relation (23) est en fait plus générale. Par exemple, pour une mesure de l'énergie, la *valeur moyenne* prédite est donnée par

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

et il est postulé en physique que cela est valable pour toutes les *observables* de la forme $\text{Op}_{\hbar}(a)$ (voir (32)). Ce postulat de la mesure est en accord remarquable avec toutes les expériences de physique menées jusqu'à ce jour.

1.2.c. L'expérience des doubles fentes de Young. Voir figure 5. Il s'agit d'une des expériences les plus intrigantes de mécanique quantique mettant en valeur la *dualité onde-corpuscule*, très simple en principe mais suscitant des questions d'interprétation qui n'ont pas vraiment de réponse. En rapport avec cette expérience qu'il commente dans son chapitre 1, Richard Feynman [Fey63] (physicien notoire dans l'élaboration de la mécanique quantique) a écrit « Personne ne comprends la mécanique quantique ».

1.2.d. Équation de Schrödinger stationnaire. Comme l'opérateur hamiltonien $\text{Op}_{\hbar}(H)$ défini par (20) est linéaire, il est naturel, dans

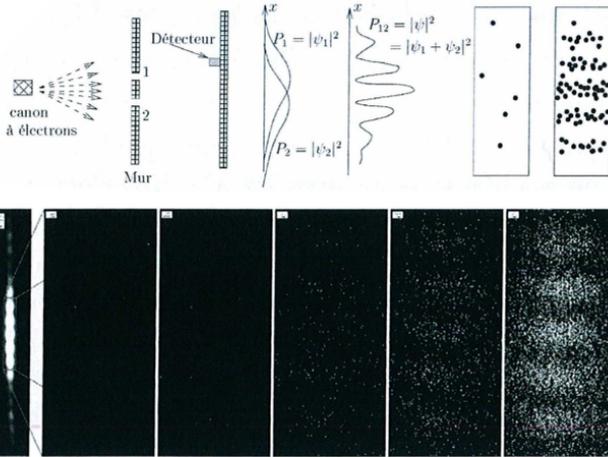


FIGURE 5. Expérience faite en 2012 [BPLB13], interférences et détection de l'onde quantique d'un électron après le passage dans une double fente. Après un petit nombre de détections les résultats semblent aléatoires, mais après un grand nombre d'expériences identiques on observe la densité de probabilité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

le cas où il est indépendant du temps t , de considérer ses vecteurs propres. Pour cela on met en œuvre la *théorie spectrale des opérateurs*, et il faut préciser un espace fonctionnel [Dav07], [Dav95], [RS72], [HS96], [GS11]. Dans le cas présent il est naturel de considérer l'espace de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^3)$ dans lequel $\text{Op}_{\hbar}(H)$ est auto-adjoint (moyennant des hypothèses sur le potentiel V). Supposons que $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}^3)$ soit vecteur propre de $\text{Op}_{\hbar}(H)$ avec la valeur propre E :

$$(24) \quad \text{Op}_{\hbar}(H)\psi_0 = E\psi_0, \quad E \in \mathbb{R}.$$

On appelle E l'énergie de l'état ψ_0 . Il est facile de résoudre l'équation d'évolution (17) partant de l'état $\psi_0(x)$ et cela donne

$$(25) \quad \psi_t(x) = e^{-iEt/\hbar}\psi_0(x).$$

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

Dans le cas d'un électron gravitant autour d'un proton (atome d'hydrogène), on peut calculer les valeurs propres de $\text{Op}_{\hbar}(H)$, qui

sont négatives et prennent des valeurs discrètes [BJ89] :

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

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

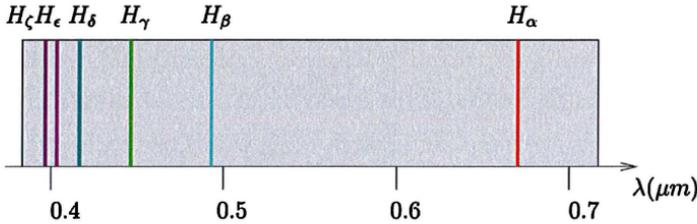


FIGURE 6. On éclaire un gaz d'hydrogène avec un laser pour lui fournir de l'énergie. Les électrons des atomes réémettent l'énergie $h\nu$ sous forme lumineuse (appelée fluorescence) après une transition entre des niveaux $E_n \rightarrow E_m$, avec $E_m < E_n$. Par exemple les raies de Balmer (1885)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

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

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

et (24) s'écrit $\psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$ avec les conditions $\psi(0) = \psi(L) = 0$. Les ondes stationnaires sont donc $\psi_n(x) = \sin(n\pi x/L)$, $n \geq 1$ et les niveaux d'énergie sont $E_n = \frac{1}{2m}(n\pi\hbar/L)^2$.

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

$$(26) \quad H(x, \xi) = v \cdot \xi + w \cdot (-x),$$

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

où $\mathcal{V} = (v, w) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d = \mathbb{R}^{2d}$ est un vecteur (constant) fixé. Les équations de Hamilton (5) donnent alors

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

qui signifient que le point $(x(t), \xi(t))$ se déplace à vitesse constante $\mathcal{V} = (v, w)$ sur l'espace des phases. Voir figure 7.

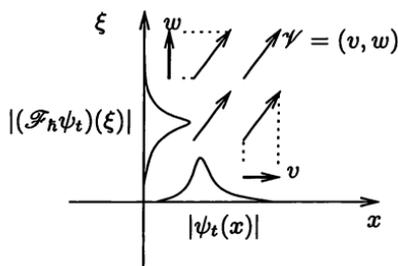


FIGURE 7. Champ de vecteurs de Hamilton $\mathcal{V} = (v, w)$ du modèle simple (26)). On montre qu'avec l'équation de Schrödinger, une onde (respectivement sa transformée de Fourier) se déplace aussi à la vitesse v en x (respectivement w en ξ).

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

$$(27) \quad \text{Op}_{\hbar}(H) = v \cdot \text{Op}_{\hbar}(\xi) + w \cdot (-x),$$

où $\text{Op}_{\hbar}(\xi)$ est défini par (19), et l'équation de Schrödinger (17) peut se résoudre pour donner explicitement pour toute fonction $\psi_0 \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)^{(10)}$:

$$(28) \quad \psi_t(x) = (e^{-it\text{Op}_{\hbar}(H)/\hbar}\psi_0)(x) = e^{iw(xt - \frac{1}{2}vt^2)/\hbar}\psi_0(x - vt).$$

Ainsi la fonction $|\psi_t|(x) = |\psi_0(x - vt)|$ se déplace à la vitesse v selon x , comme en mécanique classique. Voir figure 7. Ensuite, pour

⁽¹⁰⁾En effet

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

car

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

comprendre l'effet de w , considérons la \hbar -transformée de Fourier⁽¹¹⁾ de ψ_t :

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

L'équation (28) donne :

$$(29) \quad (\mathcal{F}_\hbar \psi_t)(\xi) = e^{-iv(\xi t - \frac{1}{2}wt^2)/\hbar} (\mathcal{F}_\hbar \psi_0)(\xi - wt)$$

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

Ce petit modèle justifie à posteriori le principe de correspondance car avec le hamiltonien (26), l'onde se déplace comme une particule avec la vitesse $\mathcal{V} = (v, w)$ sur l'espace des phases (en fait vitesse v en x et vitesse w en ξ après transformée de Fourier). De plus il montre la signification de l'impulsion ξ : elle intervient dans l'expression $e^{-i\xi x/\hbar} = e^{-i\omega_x x}$ et on peut donc dire que $\omega_x = \frac{1}{\hbar}\xi$ est une fréquence spatiale⁽¹²⁾. Pour un hamiltonien quelconque $H(x, \xi)$, le champ de vecteur \mathcal{V} n'est pas uniforme mais l'idée du calcul semi-classique est de montrer qu'à la limite $\hbar \rightarrow 0$, on peut considérer que \mathcal{V} est *localement constant* dans l'espace des phases (x, ξ) (on dit *micro-localement*) ; on se ramène à ce modèle simple où le principe de correspondance est valide. Dans le calcul semi-classique, on calcule les corrections à cette approximation sous la forme d'un développement en \hbar .

1.2.f. Paquet d'onde gaussien et principe d'incertitude. Les équations (28) et (29) montrent dans un modèle simple que les ondes se déplacent comme une particule. Cependant une particule classique est localisée en espace x et en vitesse (c'est-à-dire que sa vitesse a une valeur précise) alors que l'onde $\psi_t(x)$ décrite ci-dessus est arbitraire et peut être « très délocalisée ». Un paquet d'onde gaussien est une forme d'onde la plus localisée possible en x et en ξ . Soit $(x_0, \xi_0) \in \mathbb{R}^{2d}$ point de l'espace des phases et $\sigma > 0$. On considère le *paquet d'onde gaussien*

$$(30) \quad \psi_{x_0, \xi_0}(x) := a e^{i\xi_0 \cdot x/\hbar} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}|x-x_0|^2}$$

⁽¹¹⁾Inversement

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

⁽¹²⁾en langage de la géométrie différentielle, l'impulsion ξ est un vecteur cotangent.

avec $a := 1/(2\pi)^{d/2}(\pi\sigma^2)^{d/4}$ de sorte que $\|\psi_{x_0, \xi_0}\|_{L^2} = 1$. On a $|\psi_{x_0, \xi_0}|^2(x) := a^2 e^{-\frac{1}{2\sigma^2}|x-x_0|^2}$ qui est une gaussienne de largeur $\Delta x = \sigma$ et centrée en x_0 . Sa transformée de Fourier est⁽¹³⁾

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

donnant $|\mathcal{F}_{\hbar}\varphi_{x_0, \xi_0}|^2(\xi) = a^2\sigma^{2d}\hbar^{-d} e^{-|\xi-\xi_0|^2/(\hbar/\sigma)^2}$ qui est une gaussienne de largeur $\Delta\xi = \hbar/\sigma$ et centrée en ξ_0 . On observe que le produit des largeurs est⁽¹⁴⁾

$$(31) \quad \Delta x \cdot \Delta\xi = \hbar$$

indépendant de σ .

Interprétation physique : ainsi diminuer Δx augmente $\Delta\xi$ et réciproquement. Rappelons que dans le cas d'une particule libre (8) on a $\xi = mv = m\frac{dx}{dt}$ qui est la vitesse. L'équation (31) donne $\Delta x \cdot \Delta v = \hbar/m$ qui s'appelle le *principe d'incertitude*. Par exemple pour un électron, $m = 9 \cdot 10^{-31}\text{kg}$ donc $\hbar/m = 10^2\text{cm}^2/\text{s}$ est assez important et les effets ondulatoires sont perceptibles à l'échelle humaine sauf que la *décohérence* perturbe cela (pour la Lune $m = 7 \cdot 10^{22}\text{kg}$ donnant $\hbar/m = 10^{-56}\text{m}^2/\text{s}$, qui est imperceptible). Voir aussi remarque 2.1.e.

Interprétation mathématique : le principe d'incertitude montre que dans l'espace des phases, $\Delta x \cdot \Delta\xi = \hbar$ est comme une surface élémentaire appelée *quantum d'action*. On peut considérer les variables (x, ξ) de l'espace des phases comme *indépendantes* sur des échelles de surface $S \gg \hbar$. C'est cette idée qui est formulée et exploitée rigoureusement dans les théorèmes de l'analyse semi-classique comme les théorèmes de composition et commutateur d'observables (35) et (41).

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

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

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

$$(32) \quad \text{Op}_\hbar(a) := \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^{2d}} \int (\mathcal{F}a)(\omega_x, \omega_\xi) e^{i(\omega_x x + \omega_\xi \text{Op}_\hbar(\xi))} d\omega_x d\omega_\xi,$$

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

$$(33) \quad (\mathcal{F}a)(\omega_x, \omega_\xi) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^{2d}} \int a(z, \xi) e^{-i(\omega_x z + \omega_\xi \xi)} dz d\xi,$$

de sorte que, par transformation de Fourier inverse,

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

et où (32) fait apparaître des opérateurs que l'on a vus dans (28) :

$$(34) \quad (e^{i(\omega_x x + \omega_\xi \text{Op}_\hbar(\xi))} \psi)(x) = e^{i\omega_x x + \frac{1}{2}\hbar\omega_\xi \omega_x} \psi(x + \hbar\omega_\xi).$$

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

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

⁽¹⁵⁾ $\mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d}) \subset C^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ désigne l'espace de Schwartz formé par les fonctions lisses qui décroissent très vite (et de même pour leurs dérivées). Il n'a pas une grande importance pour la compréhension de cet exposé

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

⁽¹⁷⁾ On utilise la transformée de Fourier (33), on fait le changement de variable $\omega_\xi \mapsto y = x + \hbar\omega_\xi$ et $\int_{\mathbb{R}^d} d\omega_x e^{i\omega_x(\frac{1}{2}(x+y)-z)} = (2\pi)^d \delta(\frac{1}{2}(x+y)-z)$,

$$\begin{aligned} & (\text{Op}_\hbar(a)\psi)(x) \\ & \stackrel{(32)}{=} \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int \left(\int a(z, \xi) e^{-i(\omega_x z + \omega_\xi \xi)} dz d\xi \right) (e^{i(\omega_x x + \omega_\xi \text{Op}_\hbar(\xi))} \psi)(x) d\omega_x d\omega_\xi \\ & \stackrel{(34)}{=} \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int \left(\int a(z, \xi) e^{-i(\omega_x z + \omega_\xi \xi)} dz d\xi \right) e^{i\omega_x x + \frac{1}{2}\hbar\omega_\xi \omega_x} \psi(x + \hbar\omega_\xi) d\omega_x d\omega_\xi \\ & = \frac{\hbar^{-d}}{(2\pi)^d} \int \left(\int a\left(\frac{1}{2}(x+y), \xi\right) e^{-i((y-x)\xi/\hbar)} d\xi \right) \psi(y) dy \end{aligned}$$

Remarque 1.20. Vérifions que la règle de quantification (32) donne bien (18) : en effet pour une fonction $V(x)$ (fonction de x seulement) on vérifie que $\text{Op}_{\hbar}(V(x)) = V(x)$, opérateur multiplication par V (on a $(\mathcal{F}V)(\omega_x, \omega_\xi) = (\mathcal{F}V(\omega_x)) \cdot \delta(\omega_\xi)$, d'où $\text{Op}_{\hbar}(V(x)) = V(x)$). De même $\text{Op}_{\hbar}(V(\xi)) = V(\text{Op}_{\hbar}(\xi))$ donc $\text{Op}_{\hbar}(\xi^2) = (\text{Op}_{\hbar}(\xi))^2 = -\hbar^2 \Delta$. On déduit (17). A partir de (32)) on vérifie aussi que $\text{Op}_{\hbar}(\bar{a}) = (\text{Op}_{\hbar}(a))^*$ (adjoint).

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

Proposition 1.21 ([Zwo12]).

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

$$(35) \quad \text{Op}_{\hbar}(a) \circ \text{Op}_{\hbar}(b) = \text{Op}_{\hbar}(a \cdot b) + O(\hbar).$$

• Commutateurs d'opérateurs et crochets de Poisson de symboles (15) :

$$(36) \quad \left[\left(-\frac{i}{\hbar}\right) \text{Op}_{\hbar}(a), \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \text{Op}_{\hbar}(b) \right] = \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \text{Op}_{\hbar}(\{a, b\}) (1 + O(\hbar)).$$

• Trace d'opérateurs :

$$(37) \quad \text{Tr}(\text{Op}_{\hbar}(a)) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x, \xi) dx d\xi.$$

Comme exemple très simple mais important de (36), on calcule que $x(-i\hbar \frac{d}{dx})\psi - (-i\hbar \frac{d}{dx})(x\psi) = i\hbar\psi$ et par ailleurs $\{x, \xi\} = 1$. Cela s'écrit : $\left[\left(-\frac{i}{\hbar}\right) \text{Op}_{\hbar}(x), \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \text{Op}_{\hbar}(\xi) \right] = \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \text{Op}_{\hbar}(\{x, \xi\})$.

1.2.h. Théorème d'Egorov, voir le texte de Clotilde Fermanian Kammerer (ce volume). Nous allons voir maintenant avec le théorème d'Egorov, l'intérêt de la quantification de Weyl : à la limite semi-classique $\hbar \rightarrow 0$, pour un hamiltonien $H(x, \xi)$ assez général et pour un intervalle de temps t borné, les ondes quantiques régies par l'équation de Schrödinger se déplacent approximativement comme des particules régies par les équations de Hamilton classiques. Cette approximation est d'autant plus valable que $\hbar \ll 1$, c'est-à-dire que $\omega_x = \xi/\hbar \gg 1$. En physique, la petite valeur de \hbar à l'échelle humaine explique qu'il ait fallu attendre le XX^e siècle pour découvrir les effets subtils de la mécanique quantique car se manifestant à l'échelle des atomes.

Afin de motiver le résultat d'Egorov qui va suivre, considérons en mécanique classique une fonction $a(x, \xi)$ sur l'espace des phases, considérée comme *observable*. On note $\mathcal{M}_a : f(x, \xi) \mapsto a(x, \xi)f(x, \xi)$ l'opérateur de multiplication associé. Utilisant l'opérateur d'évolution de Liouville (13) défini par $\mathcal{L}_t f = f \circ \phi_{-t}$, on a la relation simple suivante⁽¹⁸⁾ :

$$(38) \quad \mathcal{L}_t \circ \mathcal{M}_a \circ \mathcal{L}_{-t} = \mathcal{M}_{\mathcal{L}_t a}.$$

On comprend (38) comme une *équation d'évolution classique des observables*. Rappelons que l'équation d'évolution infinitésimale correspondante (14) est $d(\mathcal{L}_t a)/dt = \{H, a\}$.

Le théorème d'Egorov suivant montre qu'en mécanique quantique (analyse semi-classique) on a une relation analogue mais approximative (avec une erreur $O(\hbar)$ avec $\hbar \ll 1$). L'opérateur d'évolution classique \mathcal{L}_t est remplacé par l'opérateur unitaire $U(t)$ défini par (21), et l'opérateur \mathcal{M}_a est remplacé par $\text{Op}_{\hbar}(a)$. Plus important à remarquer, l'espace fonctionnel classique $L^2(\mathbb{R}_{x,\xi}^{2n})$ classique est remplacé par l'espace quantique $L^2(\mathbb{R}_x^n)$.

Théorème 1.22 (d'Egorov, [Zwo12, Th. 11.1]). *Pour tout $a \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d})$, tout $t \in \mathbb{R}$, on a la relation*

$$(39) \quad U(t) \circ \text{Op}_{\hbar}(a) \circ U(-t) = \text{Op}_{\hbar}(a_t)$$

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

$$(40) \quad a_t = \mathcal{L}_t a + O_t(\hbar).$$

Au niveau infinitésimal cette relation s'écrit :

$$(41) \quad i\hbar \frac{d\text{Op}_{\hbar}(a_t)}{dt} = [\text{Op}_{\hbar}(H), \text{Op}_{\hbar}(a_t)] = i\hbar \text{Op}_{\hbar}(\{H, a_t\}) + O(\hbar^2).$$

Remarque 1.23. On comprend (39) comme une *équation d'évolution quantique des observables*. La notation $O_t(\hbar)$ dans (40) signifie que les constantes peuvent dépendre de t . Ici ce reste est donc négligeable à t fixé et $\hbar \rightarrow 0$. On peut améliorer cela et avoir un reste négligeable pour $|t| \leq \varepsilon \log(1/\hbar)$ et $\hbar \rightarrow 0$ à condition que ε soit assez petit. On

⁽¹⁸⁾Pour $f \in C^\infty(\mathbb{R}^{2d})$,

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

appelle cette limite $t_{\max} = \varepsilon \log(1/\hbar)$ le *temps d'Ehrenfest*. On verra qu'il joue un rôle important en chaos quantique.

Idee de preuve du théorème d'Egorov. La relation (41) se déduit de (36). Ensuite (39) se déduit par intégration. En effet se rappelant $U(t) = \exp(-it\text{Op}_\hbar(H)/\hbar)$ en (21) et $d(\mathcal{L}_t a)/dt = \{H, a\}$ en (14) on obtient en dérivant (39) et faisant $t = 0$ que :

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

2. Chaos en mécanique classique

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

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

Commençons par l'exemple simple à expliquer (mais un peu difficile à étudier) que sont les billards dispersifs. Nous verrons ensuite qu'en régularisant les rebonds sur les bords on obtient un modèle mieux compris qui est le flot géodésique sur une variété à courbure négative. Pour mettre en évidence les techniques qui permettent de démontrer les propriétés de chaos, nous étudierons finalement l'*application du chat d'Arnold* ou *cat map*, qui est un modèle jouet particulier mais où les propriétés de chaos sont vraiment plus simples à démontrer. L'étude des systèmes dynamiques est plus générale que celle des dynamiques hamiltonienne (c'est-à-dire de la forme particulière (5)). On peut ainsi parler de dynamique chaotique pour des flots engendrés par des champs de vecteurs quelconques, pour des automates cellulaires etc.

2.1. Billard dispersif de Sinaï et instabilité d'Anosov

Le billard de Sinaï est un carré avec conditions périodiques au bord (c'est donc un tore \mathbb{T}^2) et contenant des disques. Une bille évolue en

ligne droite à vitesse constante et rebondit parfaitement sur le bord des disques. Voir figure 8. Elle a donc un comportement déterministe. Mais on observe que le comportement est imprévisible, *chaotique*. Pourquoi ?

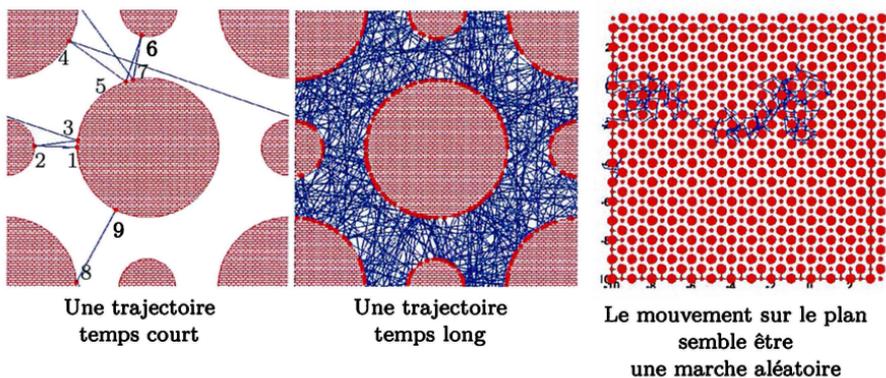


FIGURE 8. (a) Premiers rebonds d'une trajectoire dans le billard de Sinaï. (b) Une trajectoire avec de nombreux rebonds. (c) Cette même trajectoire représentée sur \mathbb{R}^2 qui est le recouvrement de \mathbb{T}^2 (c'est-à-dire conditions de périodicité enlevées).

L'explication heuristique est que les bords du billard sont convexes, ce qui implique une *dispersion des trajectoires* après chaque rebond (on caractérisera cela par la sensibilité aux conditions initiales d'Anosov). Voir figure 9(a).

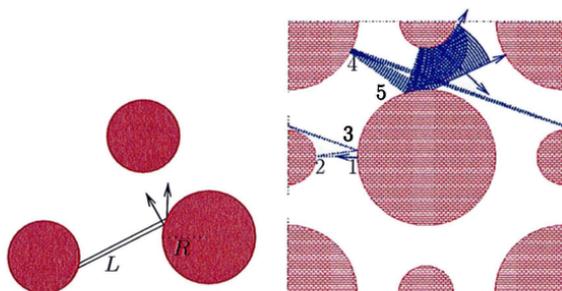


FIGURE 9. (a) Billard dispersif. (b) Nuage de billes indépendantes avec une incertitude initiale en position de $\Delta y = 10^{-4}$. Dans cet exemple, les différentes trajectoires deviennent *totalelement décorrélées* après le 6^e rebond.

Après quelques rebonds seulement, deux trajectoires initialement très proches peuvent avoir des évolutions très différentes (décorrélées). Sur la figure 9(b), on observe une bille (ou nuage de billes indépendantes) avec une incertitude initiale en position de $\Delta y = 10^{-4}$. Cette incertitude croît exponentiellement et le comportement peut différer notablement après un temps très court (ici 6 rebonds).

La dynamique déterministe engendre donc du hasard. Cela est à l'origine du *chaos déterministe* et de la complexité dans les systèmes dynamiques, et plus généralement de la complexité en physique et dans la nature. Voir [Rue91] [Rue95] et les vidéos de É. Ghys et al. sur le chaos [LGA].

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

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

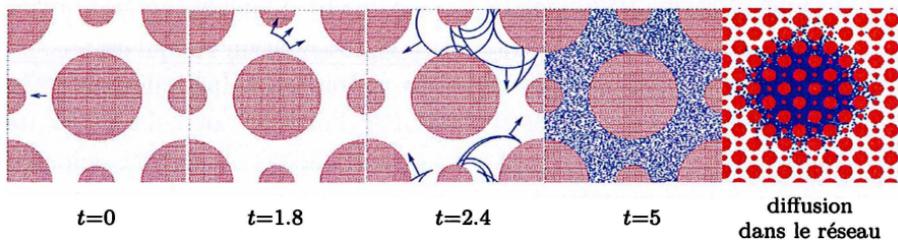


FIGURE 10. Évolution d'un ensemble très localisé de conditions initiales ($\Delta y = 10^{-4}$). La distribution s'équidistribue sur le billard. Dans le réseau, elle diffuse (le rayon croît comme $r(t) \simeq C \cdot \sqrt{t}$).

Sur la figure 10 observons $N = 10^4$ billes indépendantes avec des conditions initiales très proches $\Delta y = 10^{-4}$. La distribution des billes peut s'interpréter comme une distribution de probabilité d'une bille initiale. Cette distribution converge vers l'équilibre et diffuse sur le réseau (le billard périodisé sur le plan). Pour cette distribution, on observe un comportement *prédictible* mais *irréversible*. Il y a donc une *évolution effective prédictible*⁽¹⁹⁾ pour la distribution de probabilité. On introduit la notion d'*entropie* pour caractériser cette perte d'information sur la position de la particule au cours du temps.

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

Remarque 2.1.

(1) Plus généralement, un *billard dispersif* est un ensemble d'obstacles lisses et convexes sur \mathbb{T}^d placés de sorte que les trajectoires ont uniformément un horizon fini.

(2) La dynamique en ligne droite dans un billard dispersif peut être considérée comme la dynamique des trajectoires géodésiques sur une surface à courbure négative (cela signifie que les courbures principales sont opposées). Voir la figure 11.

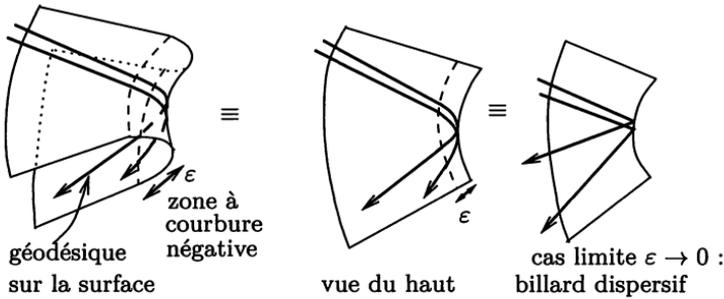


FIGURE 11. Le flot dans un billard dispersif est un cas limite de flot sur une surface à courbure négative concentrée sur la ligne de rebond.

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

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

Cas du flot géodésique sur une surface lisse. Nous avons vu dans l'exemple 1.11 que le flot géodésique sur une surface \mathcal{S} est un flot hamiltonien. L'espace des phases est $(x, \xi) \in T^*\mathcal{S}$, c'est-à-dire qu'en chaque point $x \in \mathcal{S}$ il faut aussi considérer la variable impulsion $\xi \in T_x^*\mathcal{S} \cong \mathbb{R}^2$. On a $\dim T^*\mathcal{S} = 4$. L'énergie $H(x, \xi) = \frac{1}{2} \|\xi\|_x^2$ est conservée. Par conséquent la particule évolue dans une sous-variété (selon son énergie de départ $E > 0$) qui est définie par

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

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

Cas d'un billard dispersif. Le domaine est aussi noté \mathcal{S} . L'énergie $E = H(x, \xi) = \frac{1}{2} |\xi|^2$ est indépendante de x . On déduit que $v = dx/dt = \partial H / \partial \xi = \xi$ et $E = \frac{1}{2} |v|^2$, en particulier la norme de la vitesse est conservée. Un point de la couche d'énergie Σ_E est donc caractérisé par $x \in \mathcal{S}$ et la direction de la vitesse v . La difficulté cependant dans un billard dispersif est que la variété Σ_E et le flot ϕ_t sur Σ_E ne sont pas C^∞ partout. Sur une sous-variété de Σ_E correspondant aux *rebonds rasants* ils sont seulement continus et cela rend leur étude mathématique plus difficile [CM06]. (On observe en effet des singularités dans la figure 10 à $t = 2.4$).

2.1.c. Instabilité hyperbolique d'Anosov. La définition suivante due à Anosov caractérise précisément la propriété de *sensibilité aux conditions initiales*. Cette définition est très utile car elle montre une *manifestation de chaos* appelée *mélange* (voir paragraphe 2.2) et d'autre part cette propriété se vérifie dans certains modèles comme le flot géodésique sur une variété compacte à courbure strictement négative ou les billards dispersifs (à ceci près que le flot du billard n'est pas C^∞).

Pour appliquer la définition suivante au cas du flot géodésique discuté plus haut, penser que $M = \Sigma_E$ est la couche d'énergie de dimension 3 et que $\mathbf{x} = (x, \xi)$.

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

$$(42) \quad T_{\mathbf{x}}M = E_0(\mathbf{x}) \oplus E_u(\mathbf{x}) \oplus E_s(\mathbf{x})$$

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

$$(43) \quad \begin{aligned} \forall w \in E_u(\mathbf{x}), \forall t \geq 0, \quad & \|(D\phi_t)w\| \geq C\lambda^t \|w\|, \\ \forall w \in E_s(\mathbf{x}), \forall t \geq 0, \quad & \|(D\phi_t)w\| \leq C\lambda^{-t} \|w\|. \end{aligned}$$

Autrement dit, E_0 est la direction du flot appelée *direction neutre*, E_u est la direction vers des trajectoires voisines qui divergent dans le futur, appelée *direction instable* et E_s est la direction vers des trajectoires voisines qui convergent dans le futur (donc divergent dans le passé), *direction stable*. Voir figure 12. Alors (43) signifie en gros

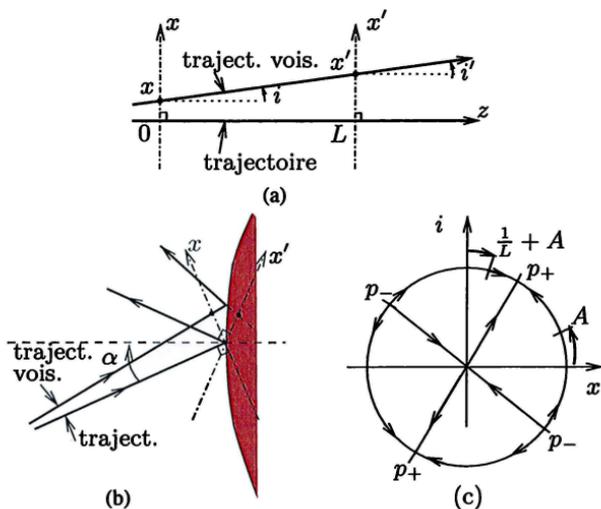


FIGURE 13. (a) Section de Poincaré pour une propagation et (b) pour un rebond sur une paroi de rayon R . Une trajectoire voisine est repérée par la position x transverse et l'angle i . (c) dynamique hyperbolique de $p' = [M_{R,\alpha,L}](p)$ sur les directions $p = i/x \in \mathbb{P}(\mathbb{R}^2)$.

les nouvelles valeurs (x', i') sont

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

On considère maintenant la réflexion avec un angle d'incidence α sur une paroi ayant un rayon de courbure R au point de réflexion, voir figure 13(b). Avec les mêmes définitions de (x, i) que précédemment, au point de réflexion, au premier ordre, on trouve que $\begin{pmatrix} x' \\ i' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ A & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ i \end{pmatrix}$ avec $A := 2/R \cos \alpha$. Par composition des deux résultats, pour une propagation de longueur L suivie d'une réflexion (comme sur la figure 9), on déduit que la matrice de passage est le produit

$$(45) \quad M_{R,\alpha,L} := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ A & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & L \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & L \\ A & LA + 1 \end{pmatrix}.$$

Lors de l'évolution on a un produit de telles matrices mais avec des paramètres R, α, L qui changent : on a des intervalles de variations possibles $L_{\min} \leq L \leq L_{\max}$, $R_{\min} \leq R \leq R_{\max}$, $\alpha \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ donc $A_{\min} = 2/R_{\max} \leq A \leq A_{\max} = \infty$. On a

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

Par conséquent⁽²⁰⁾, $M_{R,\alpha,L}$ a deux valeurs propres réelles l, l^{-1} avec $l > 1$ appelé *coefficient d'instabilité de Lyapounov*. On dit que $M_{R,\alpha,L}$ est une *matrice hyperbolique*.

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

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

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

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

$$(46) \quad E_u(\mathbf{x}_0) = \lim_{N \rightarrow +\infty} (M_{R,\alpha,L})(\mathbf{x}_{-1}) \cdot (M_{R,\alpha,L})(\mathbf{x}_{-2}) \cdots (M_{R,\alpha,L})(\mathbf{x}_{-N})p_0,$$

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

$$(47) \quad E_s(\mathbf{x}_0) = \lim_{N \rightarrow +\infty} (M_{R,\alpha,L}^{-1})(\mathbf{x}_1) \cdot (M_{R,\alpha,L}^{-1})(\mathbf{x}_2) \cdots (M_{R,\alpha,L}^{-1})(\mathbf{x}_N)p_0$$

partant d'une direction initiale $p_0 \in (-\infty, 0)$ quelconque. De plus on a l'estimation

$$\lambda^L \geq \frac{1}{2}L_{\min} \geq 1 + \frac{1}{2}L_{\min}A_{\min},$$

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

On a ainsi identifié les directions stables et instables E_s, E_u qui entrent dans la décomposition (42).

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

Remarque 2.4.

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

• Dans le cas du flot géodésique sur une variété lisse à courbure négative, il n'y a pas cette singularité ($A_{\max} < \infty$) et des expressions (46) et (47) on peut déduire que $x_0 \rightarrow E_{u,s}(x_0)$ sont des fonctions Hölder continues (mais C^2 en aucun point), tout comme la fonction de Weierstrass [Fal03, chap. 11].

2.1.e. Principe d'incertitude quantique et instabilités. Reprenons la discussion qualitative (et physique) liée au principe d'incertitude (31). Considérons un *objet quantique* dans un billard dispersif (par exemple une boule de loto qui rebondit dans la machine). Si $m \simeq 10\text{g}$, alors $\Delta x \cdot \Delta v = \hbar/m \simeq 10^{-36}\text{m}^2/\text{s}$ est très petit. Un compromis pour minimiser chaque terme du produit est $\Delta x \simeq 10^{-18}\text{m}$ et $\Delta v \simeq 10^{-18}\text{m/s}$. Pour simplifier la discussion, supposons une amplification exponentielle des incertitudes avec le temps, comme (44), par le facteur $\Delta x(t) \simeq 10^{t/\tau} \Delta x(0)$ avec un temps caractéristique $\tau \sim 1\text{s}$. Alors la taille de l'incertitude quantique devient $\Delta x(t) \simeq 1\text{m}$ après $t \simeq 1\text{s}$ seulement ! Cela montre que pour les phénomènes chaotiques, le *hasard quantique* bien que d'origine microscopique, a une influence à notre échelle macroscopique⁽²¹⁾.

2.2. Un flot géodésique Anosov est mélangeant (et ergodique)

On a vu l'instabilité des trajectoires qui s'exprime par des matrices hyperboliques comme (45). Il faut aussi noter que la couche d'énergie Σ_E est compacte. La dynamique a donc pour effet d'« étirer » et « replier » les données initiales. Cette succession de processus est le plus efficace pour mélanger les données initiales comme le ferait un boulanger pour mélanger le beurre dans une pâte feuilletée. Avec ce mélange, tout ensemble de données initiales (suffisamment lisse) va s'équidistribuer et converger (au sens des distributions) vers une mesure d'équilibre. C'est cette propriété appelée *mélange* qui exprime le

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

mieux les propriétés chaotiques de la dynamique comme le montre le théorème suivant et la figure 14.

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

$$(48) \quad \left| \int_M v \cdot (u \circ \phi_{-t}) dx - \int_M v dx \cdot \int_M u dx \right| \rightarrow 0.$$

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

$$(49) \quad \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \left(\int_M v \cdot (u \circ \phi_{-t}) dx \right) dt = \int_M v dx \cdot \int_M u dx.$$

La preuve du mélange est ancienne (Anosov 1967 [Ano69]). Sinai l'a montré pour les billards dispersifs. La preuve du mélange à taux exponentiel est récente [Dol98, Liv04, Tsu10]. En prenant la moyenne temporelle de la propriété de mélange (48) on déduit l'ergodicité (49) (avec le théorème de Cesàro).

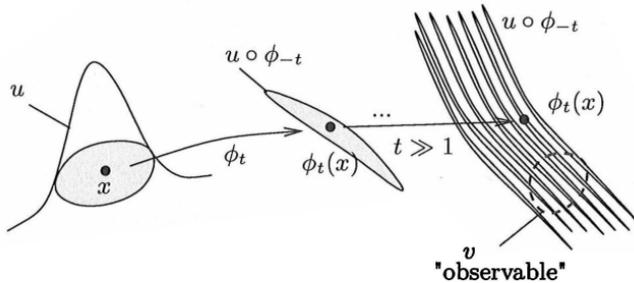


FIGURE 14. Fonction de corrélation

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

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

Remarque 2.6.

- Le terme

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

dans (48) s'appelle *fonction de corrélation*. C'est simplement un *élément de matrice* de l'opérateur d'évolution \mathcal{L}^t qui correspond à la fonction u évoluée par le flot : $\mathcal{L}^t u = u \circ \phi_{-t}$ et testée sur une autre

fonction (observable) v . (Dans certains ouvrages, on appelle fonction de corrélation toute l'expression $\int_M v \cdot (u \circ \phi_{-t}) dx - \int v dx \cdot \int u dx$.)

- La propriété de *mélange* (48) signifie *perte d'information* car pour $t \rightarrow \infty$, $u \circ \phi_{-t}$ normalisé par $(\int u dx)^{-1}$ converge (au sens des distributions) vers la mesure dx . L'ergodicité signifie que la *moyenne temporelle* de u , i.e. $\frac{1}{T} \int_0^T u \circ \phi_{-t} dt$ normalisée par $(\int u dx)^{-1}$ converge (au sens des distributions) vers la mesure dx . On dit que dx est la *mesure d'équilibre*.

- Comparer la définition d'*ergodique* (49) à *uniquement ergodique* (9) : dans (9) on peut fixer n'importe quelle condition initiale x_0 (cela revient à prendre une distribution de Dirac $v = \delta_{x_0}$ dans (49)). L'unique ergodicité implique l'ergodicité.

mélange \implies ergodique \iff uniquement ergodique

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\text{Flot ergodique} \underset{(49)}{\iff} P = \langle \cdot, 1 \rangle \langle 1, \cdot \rangle \iff \text{Inv} = \{u = \text{cste}\}. \quad \square$$

2.3. Modèle simple du *cat map* qui est mélangeant (et ergodique)

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

$$(50) \quad M = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix},$$

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

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

Les directions propres associées sont E_u, E_s introduites en (42).

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

$$(51) \quad f : \begin{cases} \mathbb{T}^2 := \mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2 & \longrightarrow \mathbb{T}^2 \\ x & \longmapsto Mx \text{ mod } \mathbb{Z}^2. \end{cases}$$

Voir figure 15.

Le théorème suivant montre que la dynamique du *cat map* (51) est très chaotique :

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

$$(52) \quad \left| \int_{\mathbb{T}^2} v \cdot (u \circ f^{-n}) dx - \int v dx \int u dx \right| \leq C e^{-\alpha n}.$$

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

$$(53) \quad \begin{aligned} \int_{\mathbb{T}^2} \bar{\varphi}_l \cdot (\varphi_k \circ f^{-n}) dx &= \int \exp(i2\pi(k \cdot M^{-n}x - l \cdot x)) dx \\ &= \int \exp(i2\pi({}^t M^{-n}k - l) \cdot x) dx = \delta_{{}^t M^{-n}k=l}. \end{aligned}$$

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

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

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

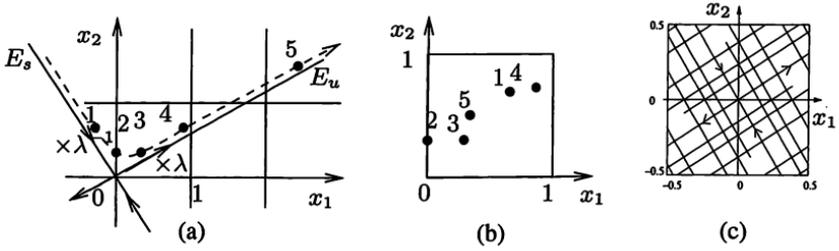


FIGURE 15. (a) Trajectoire du point initial $(-0.3, 0.6)$ sous l'application f du *cat map*, sur \mathbb{R}^2 (la trajectoire est sur une hyperbole). (b) Après la restriction modulo 1 sur \mathbb{T}^2 , presque toute trajectoire semble imprévisible, *chaotique*. (c) Les pentes des directions stables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

Si $k \neq 0$ alors $|{}^t M^{-n} k| \rightarrow \infty$ lorsque $n \rightarrow +\infty$ car M est hyperbolique. Donc (53) devient nul pour n assez grand. Finalement une fonction lisse $u \in C^\infty(\mathbb{T}^2)$ a des coefficients de Fourier $(u_k)_k$ qui décroissent très vite : si $u = \sum_k u_k \varphi_k$ alors

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

De même pour $v \in C^\infty(\mathbb{T}^2)$. En utilisant (53) on a

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

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

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

pour tout N . On déduit (52). Le terme constant $\int v dx \int u dx = v_0 u_0$ provient des composantes $k = l = 0$ qui ne fuient pas à l'infini. \square

Remarque 2.9. La preuve ci-dessus (son idée) s'adapte bien au cas des flots Anosov mais en utilisant une décomposition de Fourier locale sur la variété. Pour cela on utilise l'analyse semi-classique [FRS08, FS11, Tsu12].

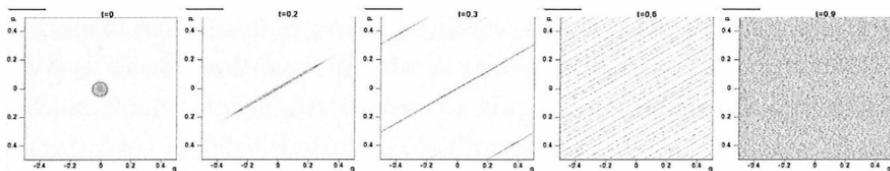


FIGURE 16. *Mélange, chaos* dans le modèle du cat map classique : une distribution de points initialement concentrée près du point fixe instable $(0, 0)$ se disperse selon la direction instable E_u et converge vers la *distribution d'équilibre*.

3. Chaos quantique

De façon un peu imprécise, un *modèle de chaos quantique* est une dynamique quantique définie par l'équation de Schrödinger (17) avec un hamiltonien H tel que le flot classique ϕ_t (défini par les équation de mouvement de Hamilton (5)) est *chaotique* sur la couche d'énergie Σ_E (au sens défini en Section 2, c'est-à-dire flot ergodique ou même mélangeant).

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

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

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

Remarque 3.1.

- Dans le cas du flot géodésique sur une variété riemannienne (\mathcal{M}, g) , le laplacien est celui de Hodge : $\Delta := -d^*d$ (où d est la *dérivée extérieure*) [Tay11a, Sec.2.4]. L'espace de Hilbert est $L^2(\mathcal{M}; \mathbb{C})$.

- Dans le cas d'un billard la condition de réflexion sur le bord des obstacles se traduit par exemple par la condition que $\psi(x) = 0$ pour tout point x sur le bord, appelée *condition de Dirichlet*.

Un autre modèle aussi très étudié en chaos quantique est le modèle de *quantum cat map* c'est-à-dire la version quantique de (51). Voir [BDB96] [FNDB03].

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

3.1. Représentation d'un état quantique sur l'espace des phases

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

Pour détecter la présence d'un état quantique ψ au point $(x_0, \xi_0) \in \mathbb{R}^{2d}$ de l'espace des phases, « le plus précis » est de considérer le paquet d'onde gaussien ψ_{x_0, ξ_0} défini en (30) et d'associer l'opérateur $\hat{a}_{x_0, \xi_0} := |\psi_{x_0, \xi_0}\rangle \langle \psi_{x_0, \xi_0}|$ qui est le projecteur orthogonal de rang 1 sur cet état. Alors

$$(54) \quad \text{Hus}_{\psi}(x_0, \xi_0) := \langle \psi | \hat{a}_{x_0, \xi_0} \psi \rangle = |\langle \psi_{x_0, \xi_0} | \psi \rangle|^2$$

est une distribution positive de probabilité⁽²³⁾ sur l'espace des phases associée à l'état ψ appelée *distribution de Husimi* de l'état ψ . Le problème mathématique est que l'opérateur \hat{a}_{x_0, ξ_0} ainsi défini n'est pas un opérateur pseudo-différentiel (c'est-à-dire que \hat{a}_{x_0, ξ_0} ne peut pas s'écrire sous la forme $\text{Op}_{\hbar}(a)$ avec un symbole a acceptable car

⁽²³⁾ Il existe une formule de reconstruction d'un vecteur ψ quelconque comme superposition de paquets d'ondes ψ_{x_0, ξ_0} :

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

Ainsi une valeur importante de $\text{Hus}_{\psi}(x_0, \xi_0) = |\langle \psi_{x_0, \xi_0} | \psi \rangle|^2$ signifie que l'état ψ a une forte composante sur le paquet d'onde ψ_{x_0, ξ_0} .

ce serait une distribution de Dirac $a = \delta_{(x_0, \xi_0)}$ en (x_0, ξ_0) , trop singulière), par conséquent les théorèmes d'Egorov etc. ne sont pas valables. Néanmoins la distribution de Husimi renseigne précisément sur l'état ψ et on l'utilisera dans les illustrations. On retrouve la transformée de Husimi en théorie du signal sous le nom *transformée par ondelettes*. Cependant pour pouvoir énoncer les résultats de l'analyse semi-classique dans la suite, on va considérer des valeurs moyennes $\langle \psi_j | \text{Op}_{\hbar}(a) \psi_j \rangle$ où a est un symbole acceptable, c'est-à-dire qui varie lentement à l'échelle $\sqrt{\hbar}$ du paquet d'onde. Cela masquera justement les fluctuations à l'échelle $\sqrt{\hbar}$ que l'on peut observer sur la figure 17.

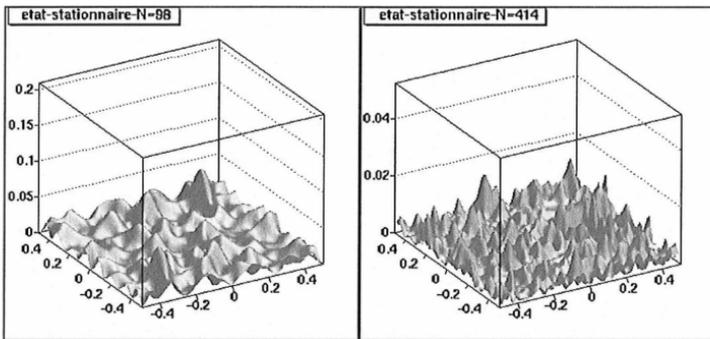


FIGURE 17. Distribution de Husimi (54) d'états stationnaires du *quantum cat map*. On observe qu'ils semblent s'équidistribuer (au sens des distributions) pour $\hbar = 1/(2\pi N) \rightarrow 0$. C'est cela qui est exprimé dans le *théorème d'ergodicité quantique*.

3.2. Deux questions mathématiques de base en chaos quantique

(1) *Question d'évolution.* Étant donné un état initial ψ_0 , décrire son évolution ψ_t au temps t , solution de l'équation de Schrödinger (17). En particulier si ψ_0 est un paquet d'onde *localisé* en (x_0, ξ_0) est-ce que ψ_t se délocalise et s'équidistribue comme le ferait une distribution classique de probabilité d'après la propriété de mélange (48) ? Voir figure 18(b).

(2) *Question sur les états stationnaires.* On considère l'équation aux valeurs propres (24) :

$$(55) \quad \text{Op}_{\hbar}(H)\psi_j = E_j\psi_j.$$

Décrire la répartition des valeurs propres⁽²⁴⁾ $E_j \in \mathbb{R}$. Est ce que les fonctions propres $|\psi_j|^2$ sont équidistribuées? On s'y attend en effet car on a vu après (25) que ce sont des distributions stationnaires et, en mécanique classique, une distribution L^2 stationnaire est forcément la mesure d'équilibre d'après la propriété d'ergodicité (2.7). Voir figure 17.

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

Remarque 3.2. Concernant les modèles de *dynamique intégrable* [Arn76] c'est-à-dire non chaotique et même très réguliers, il existe des techniques qui répondent assez bien à ces questions. Par exemple dans le cas du problème de Kepler (6) (c'est-à-dire atome d'hydrogène) ou de l'oscillateur harmonique (7), des techniques algébriques basées sur la théorie des groupes permettent de trouver exactement les valeurs propres E_j et les états propres ψ_j (cela est dû aux symétries particulières du problème).

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

3.3. Équidistribution des ondes stationnaires. Ergodicité quantique

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

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

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

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

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

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

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

$$(56) \quad d\mu_E dE = dx d\xi$$

et $\text{Vol}(\Sigma_E) := \int_{\Sigma_E} d\mu_E$. Bien sûr, d'après la correspondance semi-classique on s'attend à un tel résultat seulement à la limite $\hbar \rightarrow 0$. Un tel résultat n'est cependant pas connu (sauf dans des modèles très particuliers). Ce qui s'en approche est le théorème suivant qui porte sur une moyenne d'états stationnaires sur un petit intervalle d'énergie $[E; E + \hbar^\alpha]$ avec $0 < \alpha < 1$.

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

Considérons une énergie E fixée et supposons que le flot hamiltonien de H est ergodique sur la couche d'énergie Σ_E . Pour toute observable $a(x, \xi)$, pour tout $0 < \alpha < 1$, on a

$$(57) \quad \frac{1}{\mathcal{N}_{\hbar}} \sum_j \left| \langle \psi_j | \text{Op}_{\hbar}(a) \psi_j \rangle - \frac{1}{\text{Vol}(\Sigma_E)} \int_{\Sigma_E} a(x, \xi) d\mu_E \right|^2 \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} 0$$

$E_j \in [E; E + \hbar^\alpha]$

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

Remarque 3.4.

- On peut interpréter le terme de gauche de (57) comme une *variance quantique*. C'est une moyenne de \mathcal{N}_{\hbar} termes positifs qui tend vers zéro pour $\hbar \rightarrow 0$, par conséquent la plupart des termes de la somme tendent vers 0 et on formule souvent le théorème d'ergodicité quantique (Q.E.) par *la plupart des états stationnaires sont équidistribués à la limite semi-classique*.

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

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

pour $\hbar \rightarrow 0$ et pour toute suite d'états ψ_j telle que $E_j \rightarrow E$. On appelle cette propriété l'*unique ergodicité quantique* Q.U.E.. Elle a été démontrée récemment par E. Lindenstrauss dans des cas particuliers du flot géodésique sur des surfaces arithmétiques à courbure négative et pour le spectre conjoint de $\text{Op}_{\hbar}(H)$ avec un opérateur arithmétique de Hecke (voir le texte de N. Anantharaman (ce volume) pour plus de détails). Cette question de Q.U.E. est à l'heure actuelle considérée comme une question très ouverte en chaos quantique.

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

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

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

• Dans le cas de dynamique Anosov, l'existence de scars a été démontrée seulement dans le modèle particulier du *quantum cat map* [FNDB03]. C'est bien un contre-exemple à la conjecture Q.U.E. Il a été montré que les états stationnaires ne peuvent pas se concentrer totalement sur un nombre fini d'orbites périodiques [FN04]. Voir [Ana08, AN07] pour des résultats de portée générale en terme d'entropie. L'auteur de ce texte est plutôt sceptique concernant la conjecture Q.U.E., au vu de ce contre-exemple (bien que particulier). Se pourrait-il que de tels contre-exemples soient de mesure nulle parmi les modèles de systèmes dynamique mélangeants mais cependant dense ?

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

La fonction $\tilde{a} = a - \int_{\Sigma_E} a(x, \xi) d\mu_E$ vérifie $\int_{\Sigma_E} \tilde{a}(x, \xi) d\mu_E = 0$ et on la notera a pour simplifier. On veut montrer que la *variance quantique*

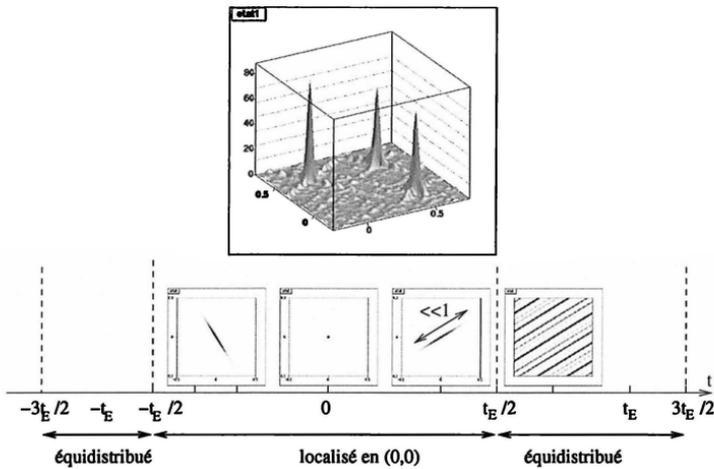


FIGURE 18. Ce sont des phénomènes très particuliers, et « contre-intuitifs ». (a) *Scars* dans le modèle du *quantum cat map* en représentation de Husimi. C'est un état stationnaire localisé sur une orbite périodique (ici de période 3). (b) En représentation de Husimi, un paquet d'onde initial à $t = 0$, évolue, s'étire selon la direction E_u et s'équidistribue (et de même dans le passé). Mais curieusement dans cet exemple, il y a une période exacte $T = 2t_E$ après laquelle il redevient identique à lui même, avec $t_E \simeq \log(1/\hbar)/\log \lambda$ appelé *temps d'Ehrenfest*. Cette période explique en fait l'existence du *scars* [FNDB03, FN04].

tend vers 0 :

$$(58) \quad S_2(a) := \frac{1}{\mathcal{N}_\hbar} \sum_j |\langle \psi_j | \text{Op}_\hbar(a) \psi_j \rangle|^2 \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} 0.$$

$E_j \in [E; E + \hbar^\alpha]$

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

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

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

$$\begin{aligned} \text{Op}_\hbar(\langle a \rangle_T) &= \frac{1}{T} \int_0^T \text{Op}_\hbar(a \circ \phi_{-t}) dt \\ &\stackrel{(39)}{=} \frac{1}{T} \int_0^T U(t) \text{Op}_\hbar(a) U(-t) dt + O(\hbar). \end{aligned}$$

Or $\text{Op}_\hbar(H)\psi_j = E_j\psi_j$ donc $U(-t)\psi_j = e^{itE_j/\hbar}\psi_j$ et

$$|\langle \psi_j | \text{Op}_\hbar(a)\psi_j \rangle| = |\langle \psi_j | U(t)\text{Op}_\hbar(a)U(-t)\psi_j \rangle|.$$

Ainsi on peut écrire

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

Ensuite, par Cauchy-Schwartz,

$$\begin{aligned} |\langle \psi_j | \text{Op}_\hbar(\langle a \rangle_T)\psi_j \rangle|^2 &\leq \| \text{Op}_\hbar(\langle a \rangle_T)\psi_j \|^2 \\ &= \left\langle \psi_j | (\text{Op}_\hbar(\langle a \rangle_T))^2 \psi_j \right\rangle \\ &\stackrel{(35)}{=} \left\langle \psi_j | (\text{Op}_\hbar(\langle a \rangle_T^2)) \psi_j \right\rangle + O(\hbar), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{et} \quad S_2(a) &\leq \frac{1}{\mathcal{N}_\hbar} \sum_j \left\langle \psi_j | (\text{Op}_\hbar(\langle a \rangle_T^2)) \psi_j \right\rangle + O(\hbar) \\ &= \frac{1}{\mathcal{N}_\hbar} \text{Tr}(\chi(\text{Op}_\hbar(H))(\text{Op}_\hbar(\langle a \rangle_T^2))) + O(\hbar) \\ &\stackrel{(59),(37)}{=} \frac{1}{\text{Vol}(\Sigma_E)} \int_{\Sigma_E} \langle a \rangle_T^2(x, \xi) d\mu_E + O(\hbar) \end{aligned}$$

avec une fonction χ caractéristique de l'intervalle $[E; E + \hbar^\alpha]$ (en fait une suite de fonctions C^∞ qui l'approche). Finalement on montre que l'ergodicité (prop. 2.7) implique que $\int_{\Sigma_E} \langle a \rangle_T^2(x, \xi) d\mu_E \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 0$. Cela permet de déduire (58) en prenant T assez grand puis $\hbar \rightarrow 0$. \square

3.4. Distribution des valeurs propres

On s'intéresse maintenant aux valeurs propres $(E_j)_j$ de (55) des opérateurs $\text{Op}_\hbar(H)$ à la limite $\hbar \rightarrow 0$. Les résultats suivants décrivent ces spectres à des échelles ΔE de plus en plus fines par rapport à \hbar . Pour atteindre ces échelles ΔE plus fines, il faut comprendre la dynamique quantique sur des échelles de temps Δt de plus en plus longues, d'après la relation $\Delta E \cdot \Delta t \simeq \hbar$ (en effet E, t sont des variables conjuguées de Fourier comme l'atteste $e^{-iEt/\hbar}$ dans (25)). Voir figure 19.

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

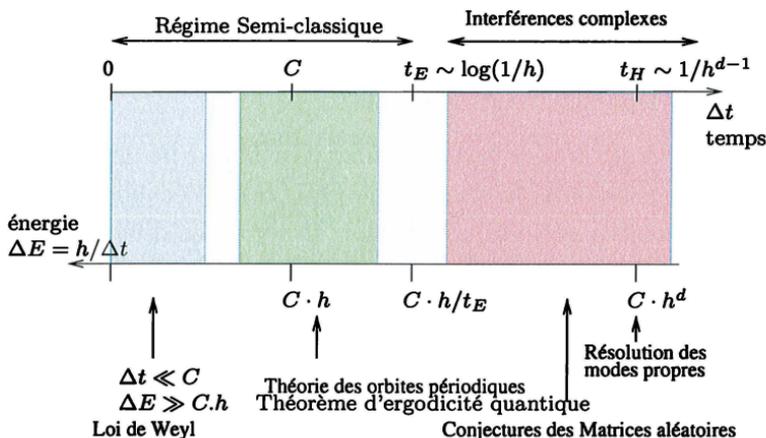


FIGURE 19. Échelles de temps-énergie typiques en chaos quantique, à la limite $\hbar \rightarrow 0$ et d'après la relation $\Delta E \cdot \Delta t \simeq \hbar$. Ici C désigne une constante arbitraire mais indépendante de \hbar et $t_E \simeq \log(1/\hbar)/\log \lambda$ est le temps d'Ehrenfest. $t_H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

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

$$(59) \quad \#\{j \mid E_j \in [E; E + \hbar^\alpha]\} = \frac{\hbar^\alpha}{(2\pi\hbar)^d} (\text{Vol}(\Sigma_E) + o(1)).$$

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

$$\text{Tr}(\chi_\varepsilon(\text{Op}_\hbar(H))) \stackrel{(37)}{=} \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int \chi_\varepsilon(H(x, \xi)) dx d\xi \stackrel{(56)}{=} \frac{\hbar^\alpha}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\Sigma_E} d\mu_E,$$

et cela donne (59) à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$. \square

L'idée heuristique de la loi de Weyl est que, d'après le principe d'incertitude, un état quantique occupe le volume $(\Delta x \Delta \xi)^d \simeq (2\pi\hbar)^d$ (un quantum). Ainsi (59) compte le nombre de quanta dans la zone d'espace des phases $H^{-1}([E; E + \hbar^\alpha])$ dont le volume est $\hbar^\alpha \text{Vol}(\Sigma_E)$. Autrement dit la densité de valeurs propres (c'est-à-dire le nombre par intervalle d'énergie) est $\rho \sim \text{Vol}(\Sigma_E)/(2\pi\hbar)^d$.

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

3.4.b. Formule des traces de Gutzwiller [Gut90]. Elle décrit les fluctuations de densité dans le spectre de $\text{Op}_\hbar(H)$ à l'échelle $\Delta E \simeq C\hbar$ en terme des orbites périodiques du flot. Il n'y a pas d'hypothèse que la dynamique classique soit chaotique ou pas.

3.4.c. Conjecture des matrices aléatoires. On suppose maintenant un système générique⁽²⁷⁾ dont la dynamique classique est chaotique (mélangeante). Cette conjecture décrit le spectre de $\text{Op}_\hbar(H)$ à l'échelle $\Delta E \ll \hbar/\log(1/\hbar)$ ou la dynamique des états pour $t \gg t_E$. La loi de Weyl (59) nous dit que la densité de valeurs propres (c'est-à-dire le nombre par intervalle d'énergie) est $\rho := \text{Vol}(\Sigma_E)/(2\pi\hbar)^d$. On considère les valeurs propres recentrées et renormalisées $\tilde{E}_j := \rho \cdot (E_j - E)$ d'un modèle de chaos quantique.

Pour énoncer la conjecture, il nous faut définir :

Définition 3.6. L'ensemble de matrices aléatoires $G.O.E$ est l'ensemble des matrices symétriques réelles $M = (M_{i,j})_{i,j=1 \rightarrow N}$ avec la loi de probabilité gaussienne invariante par changement de bases orthogonales

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

avec

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

et Z constante de normalisation.

Comme exemple de propriété statistique, considérons l'écart $s \geq 0$ entre deux valeurs propres consécutives de M . On note $P(s)ds$ la densité de probabilité induite sur la variable s par la loi $dP(M)$.

⁽²⁶⁾Le calcul est simple. Par exemple dans $5 \cdot 10^9$ d'années, le Soleil se contractera en *naine blanche* composée d'un plasma de carbone et d'oxygène se refroidissant vers une *naine noire*. La formule de Weyl prédit un rayon de l'ordre de $R \simeq 3000\text{km}$ (celui de la Terre).

⁽²⁷⁾On connaît des modèles de chaos quantique très particuliers qui ne vérifient pas cette conjecture : le flot géodésique sur une surface arithmétique, ou le *cat map* dans le cas de période courtes [FNDB03].

Pour des matrices de grande taille $N \gg 1$ Wigner a montré que

$$(60) \quad P(s) \simeq \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4} s^2\right).$$

Le facteur s qui apparaît dans (60) exprime une *répulsion des niveaux*⁽²⁸⁾ car un petit écart $s \ll 1$ est peu probable. Les calculs numériques montrent que la distribution des écarts $s_j = \tilde{E}_{j+1} - \tilde{E}_j$ d'un système de chaos quantique vérifie aussi cette loi, voir figure 20. Voici une conjecture célèbre en chaos quantique basée sur cette observation et sur des considérations heuristiques.

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

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

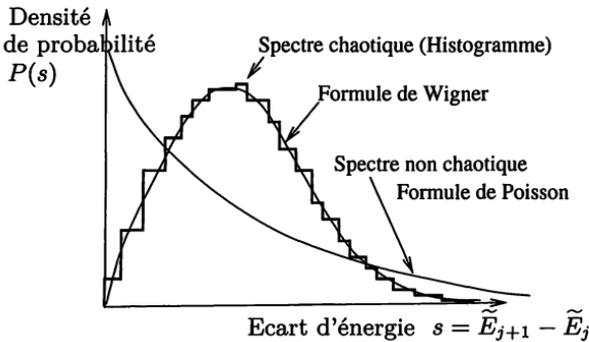


FIGURE 20. Distributions des écarts de valeurs propres $s_j = (\tilde{E}_{j+1} - \tilde{E}_j)_j$ et formule de Wigner des matrices aléatoires.

3.5. Conclusion

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

⁽²⁸⁾Explication heuristique de la répulsion de niveaux : pour une matrice 2×2 , $H = \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix}$, l'écart des valeurs propres est $s = \sqrt{(a-b)^2 + c^2}$ donc $s = 0$ est « peu probable » car nécessite les conditions $a = b$ et $c = 0$. Plus précisément, si $x = a - b$, $y = c$ alors la mesure $dx dy$ induit la mesure $s ds$. Pour des matrices hermitiennes on obtiendrait $s^2 ds$.

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

Les problématiques du *chaos quantique* sont très présentes en physique où il y a des phénomènes ondulatoires (l'étude a commencé en physique nucléaire) et en mathématique : cela concerne tous les modèles mathématiques issus de la physique ondulatoire, mais aussi la théorie des représentation des groupes et même l'arithmétique, où une manifestation encore très conjecturale et fascinante serait les statistiques de matrices aléatoires dans la répartition des nombres premiers et l'Hypothèse de Riemann (voir [Gra03]).

Références

- [Ana08] N. ANANTHARAMAN – « Entropy and the localization of eigenfunctions », *Ann. of Math. (2)* **168** (2008), no. 2, p. 435–475.
- [AN07] N. ANANTHARAMAN & S. NONNENMACHER – « Half-delocalization of eigenfunctions for the Laplacian on an Anosov manifold », *Ann. Inst. Fourier (Grenoble)* **57** (2007), no. 7, p. 2465–2523.
- [Ano69] D. V. ANOSOV – *Geodesic flows on closed Riemann manifolds with negative curvature.*, Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics, vol. 90, American Mathematical Society, Providence, R.I., 1969.
- [Arn76] V. I. ARNOLD – *Méthodes mathématiques de la mécanique classique*, Éditions Mir, Moscou, 1976.
- [BPLB13] R. BACH, D. POPE, S. H. LIU & H. BATELAAN – « Controlled double-slit electron diffraction », *New Journal of Physics* **15** (2013), no. 3, 033018.
- [Bal00] V. BALADI – *Positive transfer operators and decay of correlations*, Advanced Series in Nonlinear Dynamics, vol. 16, World Scientific Publishing Co., Inc., River Edge, NJ, 2000.
- [BGS84] O. BOHIGAS, M.-J. GIANNONI & C. SCHMIT – « Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws », *Phys. Rev. Lett.* **52** (1984), no. 1, p. 1–4.
- [BDB96] A. BOUZOUINA & S. DE BIÈVRE – « Equipartition of the eigenfunctions of quantized ergodic maps on the torus », *Comm. Math. Phys.* **178** (1996), no. 1, p. 83–105.

- [BJ89] B. H. BRANSDEN & C. J. JOACHAIN – *Introduction to quantum mechanics*, Longman, 1989.
- [BS02] M. BRIN & G. STUCK – *Introduction to dynamical systems*, Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
- [Can01] A. CANNAS DA SILVA – *Lectures on symplectic geometry*, Lecture Notes in Mathematics, vol. 1764, Springer-Verlag, Berlin, 2001.
- [CM06] N. CHERNOV & R. MARKARIAN – *Chaotic billiards*, Mathematical Surveys and Monographs, vol. 127, American Mathematical Society, Providence, RI, 2006.
- [Cou12] Y. COUDÈNE – *Théorie ergodique et systèmes dynamiques*, Savoirs Actuels, EDP Sciences, Les Ulis ; CNRS Éditions, Paris, 2012.
- [Dav95] E. B. DAVIES – *Spectral theory and differential operators*, Cambridge Studies in Advanced Mathematics, vol. 42, Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [Dav07] ———, *Linear operators and their spectra*, Cambridge Studies in Advanced Mathematics, vol. 106, Cambridge University Press, Cambridge, 2007.
- [Dol98] D. DOLGOPYAT – « On decay of correlations in Anosov flows », *Ann. of Math. (2)* **147** (1998), no. 2, p. 357–390.
- [Fal03] K. FALCONER – *Fractal geometry. Mathematical foundations and applications*, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, 2003.
- [Fau] F. FAURE – « Films d'animations d'ondes quantiques », <http://bit.ly/1zuyexa>.
- [FN04] F. FAURE & S. NONNENMACHER – « On the maximal scarring for quantum cat map eigenstates », *Comm. Math. Phys.* **245** (2004), no. 1, p. 201–214.
- [FNDB03] F. FAURE, S. NONNENMACHER & S. DE BIÈVRE – « Scarred eigenstates for quantum cat maps of minimal periods », *Comm. Math. Phys.* **239** (2003), no. 3, p. 449–492.
- [FRS08] F. FAURE, N. ROY & J. SJÖSTRAND – « A semiclassical approach for Anosov diffeomorphisms and Ruelle resonances », *Open Math. Journal* **1** (2008), p. 35–81, arXiv:0802.1780.
- [FS11] F. FAURE & J. SJÖSTRAND – « Upper bound on the density of Ruelle resonances for Anosov flows », *Comm. Math. Phys.* **308** (2011), no. 2, p. 325–364.
- [Fey63] R. FEYNMAN – *Le cours de physique de Feynman, Mécanique quantique*, 1963.
- [GVZJ91] M.-J. GIANNONI, A. VOROS & J. ZINN-JUSTIN (éds.) – *Chaos et physique quantique*, North-Holland Publishing Co., Amsterdam, 1991.
- [Gra03] A. GRANVILLE – « Nombres premiers et chaos quantique », *Gazette des Mathématiciens, Soc. Math. France* (2003), no. 97, p. 29–44.
- [GS94] A. GRIGIS & J. SJÖSTRAND – *Microlocal analysis for differential operators. An introduction*, London Mathematical Society Lecture Note Series, vol. 196, Cambridge University Press, Cambridge, 1994.
- [GS77] V. GUILLEMIN & S. STERNBERG – *Geometric asymptotics*, Mathematical Surveys, vol. 14, American Mathematical Society, Providence, R.I., 1977.
- [GS90] ———, *Symplectic techniques in physics*, 2^e éd., Cambridge University Press, Cambridge, 1990.
- [GS11] S. J. GUSTAFSON & I. M. SIGAL – *Mathematical concepts of quantum mechanics*, 2^e éd., Universitext, Springer, Heidelberg, 2011.
- [Gut90] M. C. GUTZWILLER – *Chaos in classical and quantum mechanics*, Interdisciplinary Applied Mathematics, vol. 1, Springer-Verlag, New York, 1990.
- [HS96] P. D. HISLOP & I. M. SIGAL – *Introduction to spectral theory, with applications to schrödinger operators*, Applied Mathematical Sciences, vol. 113, Springer-Verlag, New York, 1996.

- [KH95] A. KATOK & B. HASSELBLATT – *Introduction to the modern theory of dynamical systems*, Encyclopedia of Mathematics and its Applications, vol. 54, Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [LGA] J. LEYS, É. GHYS & A. ALVAREZ – « Chaos », Videos, <http://www.chaos-math.org/fr>.
- [Liv04] C. LIVERANI – « On contact Anosov flows », *Ann. of Math. (2)* **159** (2004), no. 3, p. 1275–1312.
- [Mar02] A. MARTINEZ – *An introduction to semiclassical and microlocal analysis*, Universitext, Springer-Verlag, New York, 2002.
- [MS98] D. MCDUFF & D. SALAMON – *Introduction to symplectic topology*, 2^e éd., Oxford Mathematical Monographs, The Clarendon Press, Oxford University Press, New York, 1998.
- [Non08] S. NONNENMACHER – « Some open questions in ‘wave chaos’ », *Nonlinearity* **21** (2008), no. 8, p. T113–T121.
- [RS72] M. REED & B. SIMON – *Methods of modern mathematical physics. I. Functional analysis*, Academic Press, New York-London, 1972.
- [RS78] ———, *Methods of modern mathematical physics. IV. Analysis of operators*, Academic Press, New York-London, 1978.
- [Rue91] D. RUELLE – *Hasard et chaos*, Odile Jacob, 1991.
- [Rue95] ———, *Turbulence, strange attractors, and chaos*, World Scientific Series on Nonlinear Science. Series A : Monographs and Treatises, vol. 16, World Scientific Publishing Co., Inc., River Edge, NJ, 1995.
- [Šni74] A. I. ŠNIREL'MAN – « Ergodic properties of eigenfunctions », *Uspehi Mat. Nauk* **29** (1974), no. 6(180), p. 181–182.
- [Tay11a] M. E. TAYLOR – *Partial differential equations I. Basic theory*, 2^e éd., Applied Mathematical Sciences, vol. 115, Springer, New York, 2011.
- [Tay11b] ———, *Partial differential equations II. Qualitative studies of linear equations*, 2^e éd., Applied Mathematical Sciences, vol. 116, Springer, New York, 2011.
- [Tsu10] M. TSUJII – « Quasi-compactness of transfer operators for contact Anosov flows », *Nonlinearity* **23** (2010), no. 7, p. 1495–1545.
- [Tsu12] ———, « Contact Anosov flows and the Fourier-Bros-Iagolnitzer transform », *Ergodic Theory Dynam. Systems* **32** (2012), no. 6, p. 2083–2118.
- [CdV85] Y. COLIN DE VERDIÈRE – « Ergodicité et fonctions propres du laplacien », *Comm. Math. Phys.* **102** (1985), no. 3, p. 497–502.
- [Woo92] N. M. J. WOODHOUSE – *Geometric quantization*, 2^e éd., Oxford Mathematical Monographs, The Clarendon Press, Oxford University Press, New York, 1992, Oxford Science Publications.
- [Zel87] S. ZELDITCH – « Uniform distribution of eigenfunctions on compact hyperbolic surfaces », *Duke Math. J.* **55** (1987), no. 4, p. 919–941.
- [Zwo12] M. ZWORSKI – *Semiclassical analysis*, Graduate Studies in Mathematics, vol. 138, American Mathematical Society, Providence, RI, 2012.

Index

- | | |
|----------------------------|--|
| analyse micro-locale, 16 | chaos quantique, 39 |
| analyse semi-classique, 16 | coefficient d'instabilité de Lyapounov, 33 |
| Anosov, 30 | collapse de la fonction d'onde, 17 |
| cat map, 37 | connexion de Levi-Civita, 10 |

- constante de Planck, 15
- couche d'énergie, 29
- crochet de Poisson, 13
- dérivée covariante, 10
- direction instable, 30
- direction neutre, 30
- direction stable, 30
- distribution de Husimi, 40
- dualité onde-corpuscule, 17
- dynamique intégrable, 42
- énergie, 12, 18
- énergie cinétique, 4
- énergie potentielle, 4
- entropie, 28
- équation de Schrödinger, 14
- équations de Hamilton, 4
- ergodicité, 35
- ergodicité quantique, 43
- ergodique, 36
- espace de Hilbert, 15
- espace de Schwartz, 23
- espace des phases, 4
- évolution effective, 28
- flot géodésique, 10
- fonction d'onde, 14
- force, 3
- force potentielle, 4
- forme symplectique, 13
- géodésique, 10
- géométrie symplectique, 13
- hamiltonien, 4
- impulsion, 4
- limite semi-classique, 24
- loi de Benford, 9
- loi de Newton, 3
- loi de Weyl, 46
- matrice hyperbolique, 33
- mécanique classique, 3
- mécanique quantique, 14
- mélangeant, 35
- mélangeant à taux super-exponentiel, 37
- mesure d'équilibre, 36
- mode de Fourier, 8, 37
- observables, 17
- opérateur de Liouville, 12
- opérateur hamiltonien, 15
- opérateur impulsion, 15
- opérateur pseudo-différentiel, 23
- oscillateur harmonique, 7
- paquet d'onde gaussien, 21
- position d'une particule, 3
- principe d'équivalence, 6
- principe d'incertitude, 22
- principe de correspondance, 15
- principe de la mesure, 17
- problème à deux corps, 5
- quantum cat map, 40
- quantum d'action, 22
- réduction du paquet d'onde, 17
- relativité générale, 3
- relativité restreinte, 3
- répulsion des niveaux, 49
- scars, 44
- symbole, 23
- systèmes intégrables, 5
- temps d'Ehrenfest, 26, 45
- temps d'Heisenberg, 47
- théorème d'Egorov, 24
- théorème d'équidistribution de Kronecker-Weyl, 8
- trajectoire de la particule, 3
- transformée de Fourier, 21
- transformée par ondelettes, 41
- unique ergodicité quantique, 44
- uniquement ergodique, 8
- valeur moyenne, 17

OPÉRATEURS PSEUDO-DIFFÉRENTIELS SEMI-CLASSIQUES

par

Clotilde Fermanian Kammerer

Introduction

Le but de ce texte est de reprendre et de développer les outils évoqués dans celui de Frédéric Faure de cet ouvrage, lesquels seront utilisés dans celui écrit par Nalini Anantharaman. Il s'agit tout particulièrement d'étudier les opérateurs pseudo-différentiels semi-classiques et ce sera aussi l'occasion de parler de quelques développements de cette théorie. En particulier, nous verrons comment l'approche semi-classique permet de faire le lien entre mécanique classique et mécanique quantique.

Les opérateurs pseudo-différentiels semi-classiques sont les outils de base de l'analyse semi-classique dont le développement est intimement lié à celui de l'analyse micro-locale. L'analyse micro-locale (qui utilise le calcul pseudo-différentiel général, c'est-à-dire sans le petit paramètre appelé paramètre semi-classique que nous introduirons plus loin) s'est développée en France dans les années 1970, en particulier autour du séminaire Goulaouic-Schwartz qui avait lieu à l'École polytechnique. L'idée fondatrice de l'analyse micro-locale est d'étudier une fonction simultanément dans la variable d'espace, aussi appelé variable de position, et dans la variable de Fourier ou variable d'impulsion. En effet, de nombreux phénomènes nécessitent ces deux approches pour être bien compris, comme nous le verrons dans la suite. Avec un tel point de vue, il est crucial de disposer d'opérateurs de localisation en variables de position et d'impulsion, c'est le rôle

des opérateurs pseudo-différentiels introduits par Shubin [Shu87] et systématiquement étudiés par Hörmander [Hör79].

On peut voir l'analyse semi-classique comme étant issue de l'intérêt d'une communauté imbibée de techniques micro-locales pour des questions de physique théorique. Il s'agit alors d'utiliser des techniques micro-locales en présence d'un petit paramètre \hbar et d'analyser les propriétés micro-locales des objets à la limite $\hbar \rightarrow 0$. Dans sa « bibliographie commentée » [Hel] dont nous nous inspirons ici, Bernard Helffer situe les débuts de l'analyse semi-classique autour de 1977, prenant comme repère la date de la thèse d'André Voros [Vor77] où l'on voit apparaître dans un cadre semi-classique une utilisation du calcul pseudo-différentiel. Le paramètre \hbar est très souvent lié à la constante de Planck mais il peut aussi résulter d'une analyse fine de l'ordre de grandeur des quantités physiques mises en jeu et d'un processus d'adimensionnement. C'est le cas par exemple en chimie quantique où l'analyse de la dynamique moléculaire dans le cadre de l'approximation de Born-Oppenheimer s'est développée avec une approche semi-classique. Le petit paramètre est alors lié au quotient de la masse de l'électron et de la masse moyenne du noyau de la molécule étudiée (voir [BO27] par exemple).

C'est dans le cadre semi-classique que nous nous placerons ici et nous ne considérerons pas la théorie générale des opérateurs pseudo-différentiels. Le lecteur intéressé pourra se reporter aux nombreux excellents ouvrages qui existent sur ce sujet. Nous pensons en particulier aux livres [AG91, DS99, Ler10, Zwo12]. Il faut noter que des classes d'opérateurs pseudo-différentiels peuvent aussi être définies sur des groupes qui ne sont pas commutatifs (à la différence de l'espace euclidien ou du tore), que ce soit sur des groupes de Lie compacts (voir [RT07]) ou des groupes de Lie non compacts comme dans l'article [BFGK12] pour le groupe de Heisenberg, ou dans le livre récent [FR12] pour le cas général des groupes de Lie stratifiés ; cette théorie est donc encore en plein essor.

Nous nous intéresserons plus particulièrement à ce que peut apporter le calcul pseudo-différentiel semi-classique à la mécanique quantique. Nous avons vu dans le texte de Frédéric Faure (ce volume) que la mécanique quantique est basée sur la notion de probabilité

de présence et de fonction d'onde. Si cette dernière trouve une interprétation physique dans le cadre de la mécanique bohémienne, initiée par les physiciens Bohm et De Broglie, ce n'est pas le cas dans le cadre classique de l'école de Copenhague où, à la suite de Bohr et de Heisenberg, par exemple, on considère que la fonction d'onde n'a pas réellement de signification physique. C'est son module au carré qui s'interprète en terme de densité de probabilité de présence.

Dans un espace de configuration M , la fonction d'onde ψ^{\hbar} est un élément de norme 1 dans l'espace $L^2(M)$ des fonctions de carré intégrable. Cette fonction dépend d'un paramètre $\hbar \in \mathbb{R}_+^*$ qui dépend des constantes de la physique, en particulier de la constante de Planck et que nous supposons petit. En particulier, nous nous intéresserons à la limite $\hbar \rightarrow 0$. La densité

$$n^{\hbar}(x)dx = |\psi^{\hbar}(x)|^2 dx$$

est une densité de probabilité sur M et c'est cette densité n^{\hbar} qui permet de calculer les probabilités de la mécanique quantique. La variable $x \in M$ décrit une configuration particulière de la particule étudiée et si A est une partie mesurable de M , la quantité

$$P(A) = \int_A n^{\hbar}(x) dx$$

donne la probabilité de trouver la particule quantique dans une configuration décrite par un point de la partie A . Dans ce texte, M sera en général l'espace euclidien de dimension d , \mathbb{R}^d ; mais nous considérerons aussi le cas du tore \mathbb{T}^d de dimension d , ou bien le cas d'une sous-variété de \mathbb{R}^d .

Les espaces fonctionnels de la mécanique quantique sont donc construits sur l'espace de Lebesgue $L^2(M)$ des fonctions mesurables et de carré intégrable sur M . Cet espace muni de la norme

$$\|f\|_{L^2} = \left(\int_M |f(x)|^2 dx \right)^{1/2}$$

est un espace de Hilbert dont nous écrirons le produit scalaire

$$\langle f, g \rangle = \int_M \bar{f}(x)g(x)dx.$$

Rappelons en particulier l'inégalité de Cauchy-Schwartz dont nous ferons usage :

$$\forall f, g \in L^2(M), \quad |\langle f, g \rangle| \leq \|f\|_{L^2} \|g\|_{L^2}.$$

Dans le cas où $M = \mathbb{R}^d$, nous allons voir que l'espace vectoriel $L^2(\mathbb{R}^d)$ est muni d'un automorphisme donné par la *transformée de Fourier*. Pour définir la transformée de Fourier, nous allons utiliser l'espace $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ des fonctions à décroissance rapide sur \mathbb{R}^d , c'est-à-dire des fonctions $f \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$ telles que

$$(1) \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{N}^d, \quad \exists C_{\alpha, \beta} > 0, \quad \sup_{x \in \mathbb{R}^d} \left| x^\alpha \partial_x^\beta f(x) \right| \leq C_{\alpha, \beta},$$

où pour $\gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_d) \in \mathbb{N}^d$, on pose

$$x^\gamma = x_1^{\gamma_1} \dots x_d^{\gamma_d} \quad \text{et} \quad \partial_x^\gamma = \partial_{x_1}^{\gamma_1} \dots \partial_{x_d}^{\gamma_d}.$$

On définit alors une application linéaire \mathcal{F} sur $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ en posant $\mathcal{F}(f) = \widehat{f}$ où

$$\forall f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d), \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^d, \quad \widehat{f}(\xi) = \int_{\mathbb{R}^d} e^{-ix \cdot \xi} f(x) dx.$$

Du fait des propriétés :

$$(2) \quad \forall j \in \{1, \dots, d\}, \quad \widehat{\partial_{x_j} f}(\xi) = i\xi_j \widehat{f}(\xi), \quad \partial_{\xi_j} \widehat{f}(\xi) = i\widehat{x_j f}(\xi),$$

l'application \mathcal{F} envoie $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ dans lui-même. On peut alors démontrer la formule d'inversion de Fourier

$$\forall f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d), \quad f(x) = (2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{ix \cdot \xi} \widehat{f}(\xi) d\xi,$$

qui nous dit que \mathcal{F} est un isomorphisme de $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ dans lui-même, de bijection réciproque \mathcal{F}^{-1} définie par

$$\forall g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d), \quad \forall x \in \mathbb{R}^d, \quad \mathcal{F}^{-1}(g)(x) = (2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{ix \cdot \xi} g(\xi) d\xi.$$

On peut alors utiliser la densité de $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ dans $L^2(\mathbb{R}^d)$ pour étendre \mathcal{F} en un automorphisme de l'espace vectoriel $L^2(\mathbb{R}^d)$. On démontre alors le *théorème de Plancherel*, à savoir

$$(3) \quad \forall f, g \in L^2(\mathbb{R}^d), \quad \langle \widehat{f}, \widehat{g} \rangle = (2\pi)^d \langle f, g \rangle,$$

ce qui implique que l'application $(2\pi)^{-d/2} \mathcal{F}$ est une transformation unitaire de $L^2(\mathbb{R}^d)$.

Comme nous l'avons dit plus haut, certains phénomènes se comprennent mieux si on les étudie aussi dans les variables de Fourier. Pensons par exemple aux obstructions à la convergence forte (ou convergence en norme) vers 0 dans $L^2(\mathbb{R}^d)$ des familles

$$(4) \quad u_\hbar(x) = \hbar^{-d/2} \Phi((x - x_0)/\hbar) \quad \text{et} \quad v_\hbar(x) = \Phi(x) e^{ix \cdot \xi_0/\hbar}$$

où $x_0, \xi_0 \in \mathbb{R}^d$ et $\Phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ ($C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ désigne l'espace des fonctions C^∞ à support compact sur \mathbb{R}^d). En effet, pour ces deux familles nous avons

$$\|v_\hbar\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \|u_\hbar\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \|\Phi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \neq 0.$$

Mais, si l'on multiplie u_\hbar par une fonction φ , régulière, bornée, et s'annulant en x_0 , alors la norme de φu_\hbar tend vers 0 lorsque \hbar tend vers 0. Le point x_0 (qui est un point de concentration de la famille (u_\hbar)) est un point d'obstruction à la convergence forte de (u_\hbar) vers 0 dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. On se convaincra rapidement qu'il n'est pas possible de faire la même chose avec la famille (v_\hbar) en travaillant dans les variables x . Néanmoins, cela devient possible en se plaçant dans les variables de Fourier. En effet, dans ces variables, les oscillations de (v_\hbar) s'interprètent comme une concentration sur ξ_0 puisque l'on a

$$\hbar^{-d/2} \widehat{v_\hbar}(\xi/\hbar) = \hbar^{-d/2} \widehat{\Phi}((\xi - \xi_0)/\hbar).$$

En Fourier, on voit que c'est le vecteur ξ_0 qui constitue l'obstruction à la convergence forte de la famille (v_\hbar) . Pour l'éliminer, il suffit de multiplier $\widehat{v_\hbar}$ par une fonction ϕ , régulière et bornée, et s'annulant près de ξ_0 , après avoir fait une mise à l'échelle convenable. Pour expliquer ce point, il est commode d'avoir quelques notations. On associe à la fonction ϕ un opérateur sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ noté $\phi(\hbar D)$ en posant

$$(5) \quad \forall f \in L^2(\mathbb{R}^d), \quad \mathcal{F}(\phi(\hbar D)f)(\xi) = \phi(\hbar\xi)\mathcal{F}(f)(\xi).$$

Un tel opérateur est appelé multiplicateur de Fourier car c'est tout simplement un opérateur de multiplication dans les variables de Fourier. La fonction de la variable ξ

$$\mathcal{F}(\phi(\hbar D)v_\hbar)(\xi) = \phi(\hbar\xi)\mathcal{F}(v_\hbar)(\xi),$$

tend vers 0 en norme L^2 , et, par le théorème de Plancherel (3) il en est de même pour $\phi(\hbar D)v_\hbar$. L'action de l'opérateur $\phi(\hbar D)$ a permis d'éliminer l'obstruction à la convergence forte que constituait le vecteur ξ_0 . Pour des familles possédant simultanément des phénomènes de concentration et d'oscillation, on a besoin de disposer d'opérateurs permettant de jouer simultanément sur les variables usuelles et les variables de Fourier, c'est le rôle des opérateurs pseudo-différentiels.

Dans l'exemple ci-dessus, on a vu apparaître la \hbar -transformée de Fourier, que nous noterons \mathcal{F}_\hbar et que l'on définit par

$$\forall f \in L^2(\mathbb{R}^d), \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^d, \quad \mathcal{F}_\hbar(f)(\xi) = \frac{1}{\hbar^{d/2}} \widehat{f}\left(\frac{\xi}{\hbar}\right).$$

Rappelons que le paramètre \hbar appartient à \mathbb{R}_+^* ; les quantités introduites ci-dessus sont donc bien définies. L'application $(2\pi)^{-d/2} \mathcal{F}_\hbar$ est un automorphisme unitaire de $L^2(\mathbb{R}^d)$. Avec cette transformée de Fourier, on peut étudier la fonction f en variable de Fourier à l'échelle $1/\hbar$. Traditionnellement, et à cause des relations (2), on interprète la variable de Fourier ξ comme la variable d'impulsion et on définit la densité en impulsion par

$$\widetilde{n}^\hbar(\xi) d\xi = (2\pi\hbar)^{-d} \left| \mathcal{F}_\hbar(\psi^\hbar(\xi)) \right|^2 d\xi.$$

L'espace des positions-impulsions (x, ξ) est appelé l'espace des phases et c'est dans cet espace que l'on veut travailler. Nous avons déjà vu dans la section 1 du texte de Frédéric Faure (ce volume), et nous reverrons plus loin, comment cet espace s'interprète comme l'espace cotangent à \mathbb{R}^d et comment on peut généraliser ces notions dans le cas d'une variété M .

Pour étudier les densités en impulsion et en position, on les teste contre des fonctions de $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$. On peut représenter ces deux tests comme l'action d'un opérateur sur la fonction d'onde :

$$\begin{aligned} \forall \varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d), \quad \int_{\mathbb{R}^d} \varphi(x) n^\hbar(x) dx &= \langle \psi^\hbar, \varphi(x) \psi^\hbar \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)}, \\ \forall \phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d), \quad \int_{\mathbb{R}^d} \phi(\xi) \widetilde{n}^\hbar(\xi) d\xi &= \langle \psi^\hbar, \phi(\hbar D) \psi^\hbar \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)}, \end{aligned}$$

où l'opérateur $\varphi(x)$ est l'opérateur de multiplication par $\varphi(x)$ et l'opérateur $\phi(\hbar D)$ est le multiplicateur de Fourier défini sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ par la relation (5). On appelle *observables* les fonctions $\varphi(x)$ et $\phi(\xi)$, on leur a associé des opérateurs dont l'action sur les fonctions d'onde renseigne sur la valeur moyenne des observables $\varphi(x)$ et $\phi(\xi)$ pour le système étudié. Comme nous l'avons déjà dit, l'intérêt des opérateurs pseudo-différentiels est de concilier les points de vue position et impulsion en permettant de considérer des observables qui soient des fonctions des deux variables x et ξ . Il s'agit donc de construire une algèbre d'opérateurs contenant les opérateurs de multiplication en variable de position ainsi que les multiplicateurs de Fourier, c'est-à-dire

de trouver un processus de quantification associant à une fonction $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ un opérateur $\text{Op}_\hbar(a)$ défini sur $L^2(\mathbb{R}^d)$. On demandera à ce processus de quantification que dans le cas où a ne dépend que de x , l'opérateur obtenu est l'opérateur de multiplication par $a(x)$ tandis que si a ne dépend que de ξ , on retrouve l'opérateur $a(\hbar D)$.

Un point de vue équivalent consiste à dire que l'on va remplacer les densités $n^\hbar(x)$ et $\tilde{n}^\hbar(\xi)$ par une densité généralisée $w^\hbar(x, \xi)$ dont les densités $n^\hbar(x)$ et $\tilde{n}^\hbar(\xi)$ seront les marginales en ξ et en x respectivement, c'est-à-dire qu'on les retrouvera en projetant $w^\hbar(x, \xi)$ sur l'espace des x ou l'espace des ξ respectivement. Plus précisément, pour toute fonction $\phi, \varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$, on aura

$$\int_{\mathbb{R}^d} \varphi(x) n^\hbar(x) dx = \int_{\mathbb{R}^{2d}} \varphi(x) w^\hbar(x, \xi) dx d\xi,$$

$$\int_{\mathbb{R}^d} \phi(\xi) \tilde{n}^\hbar(\xi) d\xi = \int_{\mathbb{R}^{2d}} \phi(\xi) w^\hbar(x, \xi) dx d\xi.$$

Cette idée remonte aux travaux du physicien théoricien Eugène Paul Wigner [Wig32]. Celui-ci partagea avec deux autres physiciens le prix Nobel de physique 1963 pour ses contributions à la théorie du noyau atomique [Wig59]. L'utilisation de la transformée de Wigner permet de profiter d'un cadre de travail très confortable même si cela se fait au prix d'une légère perte de structure car la fonction w^\hbar , que l'on appelle alors *transformée de Wigner de la famille ψ^\hbar* , n'est pas une densité, tout simplement parce que ce n'est pas une fonction positive. Cette fonction w^\hbar est dans $L^2(\mathbb{R}^{2d})$ et son action contre des observables $a(x, \xi) \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ prend son sens le plus achevé dans le cadre de la théorie des distributions de Laurent Schwartz, personnalité marquante de l'École polytechnique.

Le processus de quantification que nous allons utiliser permet de transcrire l'action de w^\hbar sur une fonction test a en terme d'action de l'opérateur $\text{Op}_\hbar(a)$ sur la fonction d'onde ψ^\hbar

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x, \xi) w^\hbar(x, \xi) dx d\xi = \langle \psi^\hbar, \text{Op}_\hbar(a) \psi^\hbar \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)}.$$

Nous verrons que la positivité « perdue » de la transformée de Wigner se retrouve en passant à la limite $\hbar \rightarrow 0$; on peut alors montrer que toute limite faible (au sens des distributions) de w^\hbar est une mesure positive. C'est la théorie des mesures semi-classiques ou mesures de

Wigner dont l'utilisation a permis par exemple de démontrer d'importants résultats sur les fonctions propres du laplacien sur une sous-variété (voir [GL93] et [AM14] par exemple) ainsi que dans d'autres domaines.

Nous commencerons par donner la définition et les premières propriétés des opérateurs pseudo-différentiels sur \mathbb{R}^d . En particulier, nous nous attacherons à étudier l'action de ces opérateurs sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ et décrirons quelques résultats de calcul symbolique pseudo-différentiel (formules de composition, inégalité de Gårding, calcul fonctionnel, théorème d'Egorov). Puis, nous nous intéresserons aux propriétés des opérateurs pseudo-différentiels liées à des aspects géométriques. Cette analyse nous permettra d'étudier la structure géométrique de l'espace des phases et ouvrira la voie à la généralisation du calcul pseudo-différentiel sur des variétés. Dans un dernier chapitre, nous nous intéresserons au cas des opérateurs pseudo-différentiels sur le tore.

1. Opérateurs pseudo-différentiels semi-classiques sur \mathbb{R}^d

1.1. Définitions

Opérateur pseudo-différentiel. Soit $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ et $\hbar \in]0, 1]$ un petit paramètre. On définit l'opérateur pseudo-différentiel semi-classique de symbole a par son action sur les fonctions à décroissance rapide. Rappelons que de telles fonctions sont indéfiniment dérivables et vérifient (1). On pose alors

$$(6) \quad \forall f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d), \\ \text{Op}_\hbar(a)f(x) = (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} a\left(\frac{1}{2}(x+y), \xi\right) e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x-y)} f(y) dy d\xi.$$

Comme on l'a fait remarquer précédemment, si $a = a(x)$, $\text{Op}_\hbar(a)$ est l'opérateur de multiplication par $a(x)$. Et si $a = a(\xi)$, alors $\text{Op}_\hbar(a)$ est le multiplicateur de Fourier $a(\hbar D)$ défini en (5).

Transformée de Wigner. Soit $(\psi^\hbar)_{\hbar>0}$ une famille bornée de $L^2(\mathbb{R}^d)$. La transformée de Wigner de $(\psi^\hbar)_{\hbar>0}$ est définie par

$$w^\hbar(x, \xi) = (2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{iv \cdot \xi} \psi^\hbar(x + \hbar v/2) \overline{\psi^\hbar}(x - \hbar v/2) dv.$$

On remarquera que la fonction w^{\hbar} est une fonction de $L^2(\mathbb{R}^{2d})$ avec

$$\|w^{\hbar}\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}^2 = (2\pi\hbar)^{-d} \|\psi^{\hbar}\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^4.$$

Ce contrôle en norme L^2 de w^{\hbar} n'est pas uniforme en \hbar . Néanmoins il nous permet de définir la quantité $\int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x, \xi) w^{\hbar}(x, \xi) dx d\xi$ comme l'intégrale d'une fonction $L^1(\mathbb{R}^{2d})$. L'analyse de l'opérateur $\text{Op}_{\hbar}(a)$ sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ nous permettra d'établir des contrôles uniformes en \hbar .

Le lien entre opérateur pseudo-différentiel et transformée de Wigner est alors donné par la relation

$$\forall a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d}), \quad \int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x, \xi) w^{\hbar}(x, \xi) dx d\xi = \langle \text{Op}_{\hbar}(a) \psi^{\hbar}, \psi^{\hbar} \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)}.$$

1.2. Action sur la classe de Schwartz

Dans cette section, nous allons étudier l'action des opérateurs pseudo-différentiels dans l'ensemble $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ des fonctions à décroissance rapide. Nous allons démontrer la proposition suivante.

Proposition 1.1. *L'opérateur $\text{Op}_{\hbar}(a)$ envoie $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ sur lui-même.*

Démonstration. Il faut d'abord remarquer que si $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, l'intégrale (6) est convergente à cause de la décroissance rapide de f et parce que a est à support compact. Le fait que $\text{Op}_{\hbar}(a)f$ est dans $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ vient ensuite de deux observations qui sont à la base de l'analyse des opérateurs pseudo-différentiels. Il s'agit de deux intégrations par parties extrêmement simples. Pour $j \in \{1, \dots, d\}$, on remarque tout d'abord que l'on a

$$\begin{aligned} \partial_{x_j} [(\text{Op}_{\hbar}(a)f)](x) &= \frac{1}{2} (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \partial_{x_j} a\left(\frac{1}{2}(x+y), \xi\right) e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x-y)} f(y) dy \\ &\quad - (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} a\left(\frac{1}{2}(x+y), \xi\right) \partial_{y_j} \left(e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x-y)}\right) f(y) dy d\xi. \end{aligned}$$

Une intégration par parties permet de transformer le deuxième terme du membre de droite, on écrit

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^{2d}} a\left(\frac{1}{2}(x+y), \xi\right) \partial_{y_j} \left(e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x-y)}\right) f(y) dy d\xi \\ = -\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \partial_{x_j} a\left(\frac{1}{2}(x+y), \xi\right) e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x-y)} f(y) dy d\xi \\ \quad - \int_{\mathbb{R}^{2d}} a\left(\frac{1}{2}(x+y), \xi\right) e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x-y)} \partial_{x_j} f(y) dy d\xi. \end{aligned}$$

On en déduit

$$\begin{aligned}
& \partial_{x_j} [(\text{Op}_{\hbar}(a)f)](x) \\
&= (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \partial_{x_j} a\left(\frac{1}{2}(x+y), \xi\right) e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x-y)} f(y) dy d\xi \\
&\quad + (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} a\left(\frac{1}{2}(x+y), \xi\right) e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x-y)} \partial_{x_j} f(y) dy d\xi \\
&= \text{Op}_{\hbar}(a)(\partial_{x_j} f)(x) + \text{Op}_{\hbar}(\partial_{x_j} a)f(x)
\end{aligned}$$

et ces intégrales sont bien définies puisque $\partial_{x_j} a$ est à support compact et $\partial_{x_j} f(x)$ à décroissance rapide. Par ailleurs

$$\begin{aligned}
& x_j \text{Op}_{\hbar}(a)f(x) \\
&= (2\pi\hbar)^{-d} \frac{\hbar}{i} \int_{\mathbb{R}^{2d}} a\left(\frac{1}{2}(x+y), \xi\right) \partial_{\xi_j} (e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x-y)}) f(y) dy d\xi \\
&\quad + (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} a\left(\frac{1}{2}(x+y), \xi\right) e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x-y)} y_j f(y) dy d\xi.
\end{aligned}$$

Une intégration par parties dans le premier terme du membre de droite donne

$$\begin{aligned}
& \int_{\mathbb{R}^{2d}} a\left(\frac{1}{2}(x+y), \xi\right) \partial_{\xi_j} (e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x-y)}) f(y) dy d\xi \\
&\quad - \int_{\mathbb{R}^{2d}} \partial_{\xi_j} a\left(\frac{1}{2}(x+y), \xi\right) e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x-y)} f(y) dy d\xi.
\end{aligned}$$

On obtient alors

$$\begin{aligned}
& x_j \text{Op}_{\hbar}(a)f(x) \\
&= i\hbar(2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \partial_{\xi_j} a\left(\frac{1}{2}(x+y), \xi\right) e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x-y)} f(y) dy d\xi \\
&\quad + (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} a\left(\frac{1}{2}(x+y), \xi\right) e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x-y)} y_j f(y) dy d\xi \\
&= \text{Op}_{\hbar}(a)(x_j f)(x) + i\hbar \text{Op}_{\hbar}(\partial_{\xi_j} a)f(x)
\end{aligned}$$

et ces intégrales sont bien définies puisque $\partial_{\xi_j} a$ est à support compact et $x_j f(x)$ à décroissance rapide. \square

On remarquera en passant que l'on a montré des formules de commutation. En effet, si A et B sont deux opérateurs, notons $[A, B]$ leur commutateur défini par

$$[A, B] = AB - BA.$$

Alors le calcul ci-dessus nous donne

$$[\partial_{x_j}, \text{Op}_{\hbar}(a)] = \text{Op}_{\hbar}(\partial_{x_j} a) \quad \text{et} \quad [x_j, \text{Op}_{\hbar}(a)] = i\hbar \text{Op}_{\hbar}(\partial_{x_j} a).$$

Nous verrons au paragraphe 3 que l'on peut généraliser ces formules de commutation.

1.3. Autres choix de quantification

On doit au mathématicien (et physicien théoricien) Hermann Weyl les premiers travaux visant à associer à une observable $a(x, \xi)$ un opérateur, c'est-à-dire à « quantifier » l'observable $a(x, \xi)$. C'est pour cette raison que l'on appelle *quantification de Weyl* le procédé donné par l'équation (6) pour associer à la fonction a l'opérateur $\text{Op}_\hbar(a)$, procédé qu'il a proposé dans [Wey27]. D'autres choix de quantification sont possibles et utilisés : on parle de la *quantification classique* ou *quantification gauche* avec l'opérateur $a(x, \hbar D)$ défini par

$$\forall f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d), \quad a(x, \hbar D)f(x) = (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x, \xi) e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x-y)} f(y) dy d\xi.$$

On peut voir la quantification de Weyl et la quantification classique comme des cas particuliers de la *t-quantification* définie par

$$\forall f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d),$$

$$\text{Op}_\hbar^t(a)f(x) = (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} a(tx + (1-t)y, \xi) e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x-y)} f(y) dy d\xi.$$

Le choix de $t = 1/2$ correspond à la quantification de Weyl tandis que le choix $t = 1$ donne la quantification classique. On peut montrer (et on le verra dans le paragraphe suivant) que les opérateurs associés au même symbole a par ces différentes quantifications diffèrent d'un $O(\hbar)$, en tant qu'opérateurs agissant sur $L^2(\mathbb{R}^d)$. L'avantage de la quantification de Weyl réside dans le fait que l'opérateur ainsi défini est auto-adjoint dès que a est à valeurs réelles, comme nous le verrons dans la suite. Remarquons aussi que pour des fonctions ne dépendant que de la variable x ou bien de la variable ξ , ces quantifications sont équivalentes.

Remarque. Nous terminons par une remarque mettant en lumière le lien entre la définition que nous avons donnée ici et celle donnée dans la section 1.2 du texte de Frédéric Faure dans ce volume (voir l'équation (32)). Soit \tilde{a} la fonction définie via la transformation de Fourier par

$$a(x, \xi) = (2\pi)^{-d} \int \tilde{a}(\omega_x, \omega_\xi) e^{i(\omega_x \cdot x + \omega_\xi \cdot \xi)} d\omega_x d\omega_\xi,$$

nous obtenons

$$\begin{aligned} \text{Op}_{\hbar}(a)f(y) &= (2\pi)^{-d} \int_{(\omega_x, \omega_\xi) \in \mathbb{R}^{2d}} \tilde{a}(\omega_x, \omega_\xi) e^{i\omega_x \cdot x} \\ &\quad \times \left[(2\pi\hbar)^{-d} \int_{(y, \xi) \in \mathbb{R}^{2d}} e^{i\omega_\xi \cdot \xi} e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x-y)} f(y) dy d\xi \right] d\omega_x d\omega_\xi \\ &= (2\pi)^{-d} \int_{(\omega_x, \omega_\xi) \in \mathbb{R}^{2d}} \tilde{a}(\omega_x, \omega_\xi) e^{i\omega_x \cdot x} e^{i\omega_\xi \cdot (\hbar D)} f(x) d\omega_x d\omega_\xi, \end{aligned}$$

d'où la formule

$$\text{Op}_{\hbar}(a) = (2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \tilde{a}(\omega_x, \omega_\xi) e^{i(\omega_x \cdot x + \omega_\xi \cdot (\hbar D))} d\omega_x d\omega_\xi.$$

2. Action sur $L^2(\mathbb{R}^d)$

L'analyse de l'action des opérateurs pseudo-différentiels sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ se fait aisément une fois que l'on a remarqué que $\text{Op}_{\hbar}(a)$ est un opérateur à noyau. Rappelons que l'on dit qu'un opérateur P défini sur un espace fonctionnel adéquat admet comme noyau la fonction k définie sur \mathbb{R}^{2d} si l'image par P d'une fonction f du domaine de P est donnée par la formule

$$Pf(x) = \int_{\mathbb{R}^d} k(x, y) f(y) dy.$$

Dans le cas de l'opérateur $\text{Op}_{\hbar}(a)$, son noyau est la fonction

$$\begin{aligned} (7) \quad k_{\hbar}(x, y) &= (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x-y)} a\left(\frac{1}{2}(x+y), \xi\right) d\xi \\ &= \hbar^{-d} K_a\left(\frac{1}{2}(x+y), \frac{1}{\hbar}(x-y)\right) \end{aligned}$$

où

$$K_a(X, v) = (2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot v} a(X, \xi) d\xi.$$

La fonction K_a est donc la transformée de Fourier inverse de la fonction $\xi \mapsto a(X, \xi)$. Nous noterons $\mathcal{F}_{\xi}^{-1}a(X, \cdot)$ cette transformée de Fourier inverse, afin de rappeler que la variable X est fixée et que l'aspect Fourier concerne la variable ξ . On a donc

$$(8) \quad K_a(X, v) = (2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot v} a(X, \xi) d\xi =: \mathcal{F}_{\xi}^{-1}a(X, v).$$

Notons qu'on peut retrouver le symbole à partir du noyau grâce à la formule

$$(9) \quad a(x, \xi) = \int_{\mathbb{R}^d} e^{-i\xi \cdot v} K_a(x, v) dv.$$

Pour estimer la norme d'un opérateur à noyau sur $L^2(\mathbb{R}^d)$, nous allons utiliser le lemme de Schur auquel nous consacrons le paragraphe suivant.

2.1. Lemme de Schur

Le lemme de Schur permet d'étudier la norme d'opérateurs à noyau définis sur $L^2(\mathbb{R}^d)$. Nous notons $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$ l'ensemble des endomorphismes continus de $L^2(\mathbb{R}^d)$ et posons

$$\forall P \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d)), \quad \|P\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} = \sup_{\|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}=1} \|Pf\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}.$$

Lemme 2.1. Soit P un opérateur sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ de noyau $k(x, y)$:

$$Pf(x) = \int_{\mathbb{R}^d} k(x, y)f(y)dy.$$

S'il existe $C > 0$ tel que

$$\sup_{y \in \mathbb{R}^d} \int |k(x, y)| dx \leq C \quad \text{et} \quad \sup_{x \in \mathbb{R}^d} \int |k(x, y)| dy \leq C,$$

alors P est un opérateur borné de $L^2(\mathbb{R}^d)$ dans $L^2(\mathbb{R}^d)$ et

$$\|P\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} \leq C.$$

Démonstration. Soit $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$. On écrit

$$\begin{aligned} \|Pf\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 &= \int |Pf(x)|^2 dx \\ &= \int k(x, y)\overline{k(x, z)}f(y)\overline{f(z)}dx dy dz. \end{aligned}$$

En utilisant

$$|f(y)\overline{f(z)}| \leq \frac{1}{2} (|f(y)|^2 + |f(z)|^2),$$

on obtient (en utilisant le théorème de Fubini pour intervertir les ordres d'intégration)

$$\begin{aligned} \|Pf\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 &\leq \frac{1}{2} \int \left(\int |k(x, y)||f(y)|^2 dy \right) \left(\int |k(x, z)| dz \right) dx \\ &\quad + \frac{1}{2} \int \left(\int |k(x, z)||f(z)|^2 dz \right) \left(\int |k(x, y)| dy \right) dx \\ &\leq C^2 \|f\|^2. \end{aligned} \quad \square$$

Une conséquence immédiate du lemme de Schur est le corollaire suivant

Corollaire 2.2. Soit P_{\hbar} un opérateur de noyau $k_{\hbar}(x, y)$ de la forme

$$k_{\hbar}(x, y) = \hbar^{-d} K\left(\frac{1}{2}(x + y), \frac{1}{\hbar}(x - y)\right)$$

et tel que la fonction K vérifie

$$N(K) := \int \sup_{X \in \mathbb{R}^d} |K(X, v)| dv < +\infty.$$

Alors l'opérateur P_{\hbar} est un opérateur borné sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ et

$$\|P_{\hbar}\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} \leq N(K).$$

Démonstration. Pour $x \in \mathbb{R}^d$, on a

$$\int |k_{\hbar}(x, y)| dy = \int |K(x - \hbar v/2, v)| dv \leq \int \sup_{X \in \mathbb{R}^d} |K(X, v)| dv.$$

De même, pour $y \in \mathbb{R}^d$,

$$\int |k_{\hbar}(x, y)| dx = \int |K(y + \hbar v/2, v)| dv \leq \int \sup_{X \in \mathbb{R}^d} |K(X, v)| dv.$$

Le corollaire 2.2 est alors une conséquence directe du lemme de Schur. \square

2.2. Application aux opérateurs pseudo-différentiels

Nous pouvons maintenant étudier l'opérance sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ des opérateurs pseudo-différentiels. En effet, le corollaire 2.2 ci-dessus implique le résultat suivant.

Théorème 2.3. Pour $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$, la famille d'opérateurs $(\text{Op}_{\hbar}(a))_{\hbar>0}$ est bornée dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$ et

$$\|\text{Op}_{\hbar}(a)\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} \leq C(a) := \int_{\mathbb{R}^d} \sup_{X \in \mathbb{R}^d} |\mathcal{F}_{\xi}^{-1} a(X, v)| dv.$$

Si l'on veut estimer la constante $C(a)$ en fonction de normes portant directement sur la fonction a et non sur sa transformée de Fourier, on peut remarquer que pour $v \in \mathbb{R}^d$ et $\alpha \in \mathbb{N}^d$,

$$v^{\alpha} \mathcal{F}_{\xi}^{-1} a(X, v) = \mathcal{F}_{\xi}^{-1} ((-D_{\xi})^{\alpha} a)(X, v),$$

où pour $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d) \in \mathbb{N}^d$, on pose

$$D_{\xi}^{\alpha} = \left(\frac{1}{i} \partial_{\xi_1}\right)^{\alpha_1} \dots \left(\frac{1}{i} \partial_{\xi_d}\right)^{\alpha_d}.$$

Par conséquent, pour tout $n \in \mathbb{N}$,

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^d} \sup_{X \in \mathbb{R}^d} |\mathcal{F}_\xi^{-1} a(X, v)| dv \\ & \leq \int_{\mathbb{R}^d} \sup_{X \in \mathbb{R}^d} \left| \mathcal{F}^{-1} \left((1 + |D_\xi|^2)^{n/2} a \right) (X, v) \right| (1 + |v|^2)^{-n} dv \\ & \leq C \sup_{(X, v) \in \mathbb{R}^d} \left| \mathcal{F}^{-1} \left((1 + |D_\xi|^2)^{n/2} a \right) (X, v) \right| \int_{\mathbb{R}^d} (1 + |v|^2)^{-n} dv \\ & \leq C \sup_{X \in \mathbb{R}^d} \left\| (1 + |D_\xi|^2)^{n/2} a \right\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}. \end{aligned}$$

Ainsi, nous avons le corollaire suivant où l'on utilise la notation

$$\forall \gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_d) \in \mathbb{N}^d, \quad |\gamma| = \gamma_1 + \dots + \gamma_d.$$

Corollaire 2.4. *Il existe une constante $c > 0$ telle que*

$$(10) \quad \forall a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d}), \quad \|\text{Op}_\hbar(a)\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} \leq c \sup_{\substack{\beta \in \mathbb{N}^d \\ |\beta| \leq d+1}} \sup_{x \in \mathbb{R}^d} \left\| \partial_\xi^\beta a(x, \bullet) \right\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}.$$

On peut remarquer que ce résultat permet de définir des opérateurs pseudo-différentiels pour des symboles comportant peu de régularité en x . Il suffit que a soit à support compact et que $\partial_\xi^\beta a$ soit bornée et intégrable pour tout multi-indice $\beta \in \mathbb{N}^d$ tel que $|\beta| \leq d + 1$.

Ici, on a choisi une estimation de la norme de $\text{Op}_\hbar(a)$ qui ne « consomme » que des dérivées en ξ mais en nombre conséquent. En jouant avec la transformée de Fourier, on peut obtenir une estimation analogue ne « consommant » que des dérivées dans la variable x . En effet, si $\underline{a}(x, \xi) = a(\xi, x)$, on a

$$\langle f, \text{Op}_\hbar(a)g \rangle = (2\pi)^{-d} \langle \mathcal{F}_\hbar(f), \text{Op}_\hbar(\underline{a}) \mathcal{F}_\hbar(g) \rangle, \quad \forall f, g \in L^2(\mathbb{R}^d).$$

On en déduit

$$\|\text{Op}_\hbar(a)\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} = (2\pi)^{-d} \|\text{Op}_\hbar(\underline{a})\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))}$$

et le corollaire 2.4 donne

$$(11) \quad \|\text{Op}_\hbar(a)\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} \leq C \sup_{\substack{\beta \in \mathbb{N}^d \\ |\beta| \leq d+1}} \sup_{\xi \in \mathbb{R}^d} \left\| \partial_x^\beta a(\cdot, \xi) \right\|_{L^1(\mathbb{R}^d)},$$

pour une constante $C > 0$ indépendante de a et de \hbar .

L'estimation la plus utilisée dans la littérature est celle de Calderón-Vaillancourt [CV71] : il existe $N \in \mathbb{N}^*$ et $C > 0$ tel que pour tout $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$,

$$(12) \quad \|\text{Op}_h(a)\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} \leq C \sup_{|\alpha|+|\beta| \leq N} \sup_{(x,\xi) \in \mathbb{R}^{2d}} |\partial_x^\alpha \partial_\xi^\beta a(x, \xi)|.$$

L'avantage de cette estimation est de faire intervenir des normes L^∞ et non des normes L^1 comme dans les estimation (10) ou (11). En particulier, si w^h est la transformée de Wigner d'une famille (ψ^h) uniformément bornée dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, on obtient le contrôle : $\forall a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$,

$$(13) \quad \left| \int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x, \xi) w^h(t, x, \xi) dx d\xi \right| \leq C \sup_{|\alpha|+|\beta| \leq N} \sup_{(x,\xi) \in \mathbb{R}^{2d}} |\partial_x^\alpha \partial_\xi^\beta a(x, \xi)|.$$

Cette dernière estimation (13) montre que w^h définit une distribution sur \mathbb{R}^{2d} car l'estimation (13) correspond exactement au contrôle que doit vérifier une forme linéaire sur $C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ pour être une distribution au sens de la théorie développée par Laurent Schwartz (voir le paragraphe 2 page 6 du livre [AG91]).

Le lecteur intéressé pourra consulter avec profit l'article [CV71] dans lequel est démontrée l'estimation (12) et précisé l'entier N ; il y est montré (dans le cadre de la quantification classique) que le contrôle des dérivées du symbole est seulement nécessaire pour des multi-entiers $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d)$ et $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_d)$ tels que $\alpha_j, \beta_j \in \{0, 1, 2, 3\}$ pour tout $j \in \{1, \dots, d\}$. À notre connaissance, l'estimation la moins coûteuse en termes de dérivées est due à Hwang (voir [Hwa87] ou l'exercice 5.3 p. 59 de [AG91]), pour la quantification classique également : il existe $C > 0$ tel que pour tout $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$,

$$\|a(x, D)\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} \leq C \sum_{\substack{\alpha \in \{0,1\}^d \\ \beta \in \{0,1\}^d}} \sup_{(x,\xi) \in \mathbb{R}^{2d}} |\partial_x^\alpha \partial_\xi^\beta a(x, \xi)|.$$

3. Premières propriétés des opérateurs pseudo-différentiel

Dans ce paragraphe, nous décrivons quelques propriétés des opérateurs pseudo-différentiels en tant qu'opérateurs sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$. Ce sont essentiellement des propriétés directement liées au noyau de l'opérateur. Nous comparerons aussi les différentes quantifications que nous avons vues précédemment.

3.1. Opérateurs de Hilbert-Schmidt

Rappelons quelques notions concernant les opérateurs définis sur un espace de Hilbert \mathcal{H} . Soit $(e_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ une base hilbertienne de \mathcal{H} et P un opérateur défini sur \mathcal{H} . On dit que l'opérateur P est un *opérateur de Hilbert-Schmidt* si la série $\sum_{n \in \mathbb{Z}} \|Pe_n\|_{\mathcal{H}}^2$ est convergente. La fonction

$$P \mapsto \|P\|_{\text{HS}} = \left(\sum_{n \in \mathbb{Z}} \|Pe_n\|_{\mathcal{H}}^2 \right)^{1/2}$$

est alors une norme sur l'espace vectoriel des opérateurs de Hilbert-Schmidt. On peut remarquer que si l'on a une autre base hilbertienne $(\tilde{e}_n)_{n \in \mathbb{Z}}$, alors

$$\|Pe_n\|_{\mathcal{H}}^2 = \sum_{p \in \mathbb{Z}} \langle \tilde{e}_p, Pe_n \rangle^2 \quad \text{et} \quad \|P\|_{\text{HS}}^2 = \sum_{n, p \in \mathbb{Z}} \langle \tilde{e}_p, Pe_n \rangle^2.$$

Proposition 3.1. *Soit P un opérateur de noyau k sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$ et tel que $k \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$. Alors P est un opérateur de Hilbert-Schmidt et*

$$\|P\|_{\text{HS}} = \|k\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}.$$

Démonstration. Soit $(e_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ une base hilbertienne de $L^2(\mathbb{R}^d)$, on a

$$\|Pe_n\|_{L^2}^2 = \int_{\mathbb{R}^{3d}} k(x, y) \bar{k}(x, z) e_n(y) \bar{e}_n(z) dy dz dx,$$

où l'on a utilisé le théorème de Fubini pour intervertir les ordres d'intégration. En effet, on remarque que pour tout $(x, y, z) \in \mathbb{R}^{3d}$,

$$|k(x, y) \bar{k}(x, z) e_n(y) \bar{e}_n(z)| \leq \frac{1}{2} \left(|e_n(y)|^2 |k(x, z)|^2 + |e_n(z)|^2 |k(x, y)|^2 \right).$$

Comme la fonction $(x, y, z) \mapsto |e_n(y)|^2 |k(x, z)|^2$ est une fonction de $L^1(\mathbb{R}^{3d})$ par hypothèse, on en déduit que la fonction $(x, y, z) \mapsto k(x, y) \bar{k}(x, z) e_n(y) \bar{e}_n(z)$ aussi et nous pouvons donc utiliser le théorème de Fubini.

Notons c_n la fonction de $L^2(\mathbb{R}^d)$ définie pour $n \in \mathbb{Z}$ par

$$c_n(x) = \int_{\mathbb{R}^d} \bar{k}(x, z) e_n(z) dz = \langle k(x, \cdot), e_n \rangle.$$

On a donc par le théorème de Fubini

$$\|Pe_n\|_{L^2}^2 = \int_{\mathbb{R}^d} |c_n(x)|^2 dx, \quad \forall n \in \mathbb{Z}.$$

Comme

$$\|k\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left(\int_{\mathbb{R}^d} |c_n(x)|^2 dx \right) = \int_{\mathbb{R}^d} \left(\sum_{n \in \mathbb{Z}} |c_n(x)|^2 \right) dx,$$

on en déduit la convergence de la famille $\sum_{n \in \mathbb{Z}} \|P e_n\|_{L^2}^2$ et la relation attendue. \square

Les implications de ce résultat pour les opérateurs pseudo-différentiels sont immédiates.

Corollaire 3.2. *Soit $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$. Alors l'opérateur $\text{Op}_\hbar(a)$ est un opérateur Hilbert-Schmidt et*

$$\|\text{Op}_\hbar(a)\|_{\text{HS}(L^2(\mathbb{R}^d))} = (2\pi\hbar)^{-d/2} \|a\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}.$$

Notons que la norme Hilbert-Schmidt de $\text{Op}_\hbar(a)$ est une fonction non bornée de \hbar .

3.2. Rôle de la diagonale dans le noyau d'un opérateur pseudo-différentiel

Une propriété importante des opérateurs pseudo-différentiels semi-classiques consiste en le fait que l'on peut modifier le noyau en dehors de la diagonale $\{x = y\}$ sans que cela entraîne de modifications de l'opérateur au premier ordre en \hbar . Rappelons que si $a \in C_0^\infty$, le noyau de l'opérateur $\text{Op}_\hbar(a)$ est la fonction k_\hbar définie dans (7) par

$$k_\hbar(x, y) = \hbar^{-d} \mathcal{F}_\xi^{-1} a\left(\frac{1}{2}(x + y), \frac{1}{\hbar}(x - y)\right).$$

Nous allons montrer que la partie la plus importante du noyau k_\hbar d'un opérateur $\text{Op}_\hbar(a)$ réside sur la diagonale $\{x = y\}$.

Proposition 3.3. *Soit $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$, $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ telle que $\chi(0) = 1$, $\delta > 0$. Soit $P_{\delta, \hbar}$ l'opérateur de noyau*

$$k_{\delta, \hbar}(x, y) = k_\hbar(x, y) \chi((x - y)/\delta).$$

Alors dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$, on a pour tout $N \in \mathbb{N}$

$$\text{Op}_\hbar(a) = P_{\delta, \hbar} + O\left((\hbar/\delta)^{2N}\right).$$

Démonstration. Nous écrivons

$$\text{Op}_\hbar(a) = P_{\delta, \hbar} + R_\hbar$$

où R_\hbar est l'opérateur de noyau $\hbar^{-d} r_\hbar(\frac{1}{2}(x + y), \frac{1}{\hbar}(x - y))$ avec

$$r_\hbar(X, v) = \mathcal{F}_\xi^{-1} a(X, v) (1 - \chi(\hbar v/\delta)).$$

On remarque alors que la fonction $u \mapsto 1 - \chi(u)$ s'annule en $u = 0$ et peut donc s'écrire

$$1 - \chi(u) = |u|^{2N} \theta_N(u)$$

avec $\theta_N \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$, θ_N bornée ainsi que toutes ses dérivées. On peut donc écrire

$$\begin{aligned} r_{\hbar}(X, v) &= (\hbar/\delta)^{2N} \mathcal{F}_\xi^{-1} a(X, v) |v|^{2N} \theta_N(\hbar v/\delta) \\ &= (\hbar/\delta)^{2N} \mathcal{F}_\xi^{-1} (-\Delta_\xi^N a)(X, v) \theta_N(\hbar v/\delta), \end{aligned}$$

où l'on a utilisé que pour $j \in \{1, \dots, d\}$,

$$v_j \mathcal{F}_\xi^{-1} a(X, v) = \mathcal{F}_\xi^{-1} (i\partial_{\xi_j} a)(X, v), \quad \forall (X, v) \in \mathbb{R}^{2d}.$$

On obtient

$$\int_{\mathbb{R}^d} \sup_{X \in \mathbb{R}^d} |r_{\hbar}(X, v)| dv \leq (\hbar/\delta)^{2N} \|\theta_N\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \int \sup_{x \in \mathbb{R}^d} |\mathcal{F}_\xi^{-1} (-\Delta_\xi^N a)(x, v)| dv.$$

On en déduit par le corollaire 2.2

$$\|R_{\hbar}\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} = O((\hbar/\delta)^{2N}). \quad \square$$

3.3. Comparaison des différentes quantifications

Nous allons comparer les différentes quantifications introduites au paragraphe 1.3 en analysant les noyaux de ces opérateurs. Il suffit de comparer la quantification de Weyl et la t -quantification pour n'importe quel $t \in]0, 1[$.

Proposition 3.4. *Pour $t \in]0, 1[$, $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$, on a dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$,*

$$\text{Op}_{\hbar}(a) = \text{Op}_{\hbar}^t(a) + O(\hbar).$$

Démonstration. On part du fait que le noyau de $\text{Op}_{\hbar}^t(a)$ est la fonction

$$\tilde{k}_{a,t}(x, y) = \hbar^{-d} K_{a,t}(\tfrac{1}{2}(x+y), \tfrac{1}{\hbar}(x-y))$$

avec

$$K_{a,t}(X, v) = \mathcal{F}_\xi^{-1} a(X + \hbar(t-1/2)v, v).$$

La formule de Taylor avec reste intégral permet d'écrire

$$K_{a,t}(X, v) = K_a(X, v) + \hbar(t-1/2)B_{\hbar}(X, v),$$

$$\text{où} \quad B_{\hbar}(X, v) = v \cdot \int_0^1 \mathcal{F}_\xi^{-1} (\nabla_x a)(X + \hbar s(t-1/2)v, v) ds.$$

Rappelons que si $f \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R})$, le gradient de f , noté ∇f , est le vecteur de \mathbb{R}^d de coordonnées $\partial_{x_j} f$, $1 \leq j \leq d$. On a donc

$$\text{Op}_{\hbar}^t(a) = \text{Op}_{\hbar}(a) + \hbar(t-1/2)R_{\hbar},$$

où R_{\hbar} est l'opérateur de noyau

$$r_{\hbar}(x, y) = \hbar^{-d} B_{\hbar}(\tfrac{1}{2}(x + y), \tfrac{1}{\hbar}(x - y)).$$

En utilisant

$$v \cdot \mathcal{F}_{\xi}^{-1}(\nabla_x a)(X, v) = \mathcal{F}_{\xi}^{-1}(i\nabla_{\xi} \cdot \nabla_x a)(X, v), \quad \forall (X, v) \in \mathbb{R}^{2d},$$

on obtient

$$B_{\hbar}(X, v) = \int_0^1 \mathcal{F}_{\xi}^{-1}(i\nabla_{\xi} \cdot \nabla_x a)(X + \hbar s(t - 1/2)v, v) ds.$$

Le fait que l'opérateur R_{\hbar} soit un opérateur borné sur $L^2(\mathbb{R}^d)$, uniformément par rapport à \hbar vient du corollaire 2.2 et de l'estimation

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^d} \sup_{X \in \mathbb{R}^d} |B_{\hbar}(X, v)| dv \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \sup_{X \in \mathbb{R}^d} \left| \int_0^1 \mathcal{F}_{\xi}^{-1}(i\nabla_x \cdot \nabla_{\xi} a)(X + \hbar s(t - 1/2)v, v) ds \right| dv \\ &\leq \int_{\mathbb{R}^d} \sup_{Y \in \mathbb{R}^d} \left| \mathcal{F}_{\xi}^{-1}(i\nabla_x \cdot \nabla_{\xi} a)(Y, v) \right| dv. \quad \square \end{aligned}$$

4. Calcul symbolique

Dans cette partie nous allons démontrer un certain nombre de formules concernant l'adjoint et la composition d'opérateurs pseudo-différentiels. Ces formules reliant les symboles de ces opérateurs, on parle de calcul symbolique. Nous décrivons ensuite différentes applications de ce calcul dont le théorème d'Egorov qui est évoqué dans le texte de Frédéric Faure et utilisé dans celui de Nalini Anantharaman (ce volume).

4.1. L'algèbre des opérateurs pseudo-différentiels semi-classiques

Proposition 4.1. Soit $a, b \in C_0^{\infty}(\mathbb{R}^{2d})$, alors, dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$,

$$(14) \quad \text{Op}_{\hbar}(a)^* = \text{Op}_{\hbar}(\bar{a}),$$

$$(15) \quad \text{Op}_{\hbar}(a)\text{Op}_{\hbar}(b) = \text{Op}_{\hbar}(ab) + \frac{\hbar}{2i} \text{Op}_{\hbar}(\{a, b\}) + O(\hbar^2),$$

$$(16) \quad [\text{Op}_{\hbar}(a), \text{Op}_{\hbar}(b)] = \frac{\hbar}{i} \text{Op}_{\hbar}(\{a, b\}) + O(\hbar^3),$$

où le crochet de Poisson des fonctions a et b est donné par

$$(17) \quad \{a, b\} = \nabla_{\xi} a \cdot \nabla_x b - \nabla_{\xi} b \cdot \nabla_x a.$$

Il est important de remarquer que les formules de composition restent valables si l'un des opérateurs est un opérateur différentiel à coefficients C^∞ . Nous verrons aussi dans le cours de la preuve que l'on peut obtenir des formules asymptotiques à tout ordre en \hbar .

Enfin, notons qu'avec les autres choix de quantification introduits en section 1.3, on obtient des formules du même type mais elles seront légèrement différentes. En particulier, pour la quantification classique, la formule pour l'adjoint (14) présente un développement non trivial en \hbar et la formule sur le commutateur (16) présente un terme non nul en \hbar^2 .

Démonstration. La relation (14) est évidente puisque le noyau de l'opérateur $\text{Op}_\hbar(a)^*$ est la fonction $(x, y) \mapsto \overline{k_\hbar(x, y)}$, où k_\hbar est relié à a par (7). On a alors

$$\begin{aligned} \overline{k_\hbar(y, x)} &= \hbar^{-d} \overline{\mathcal{F}_\xi^{-1}(a)}\left(\frac{1}{2}(x+y), -\frac{1}{\hbar}(x-y)\right) \\ &= \hbar^{-d} \mathcal{F}_\xi^{-1}(\bar{a})\left(\frac{1}{2}(x+y), \frac{1}{\hbar}(x-y)\right) \end{aligned}$$

où l'on a utilisé $\overline{\mathcal{F}_\xi^{-1}(f)(v)} = \mathcal{F}_\xi^{-1}(\bar{f})(-v)$. Le noyau de $\text{Op}_\hbar(a)^*$ est ainsi égal au noyau de $\text{Op}_\hbar(\bar{a})$ et ces deux opérateurs sont donc égaux.

Étudions maintenant la formule de composition (15) : le noyau de $\text{Op}_\hbar(a) \circ \text{Op}_\hbar(b)$ est la fonction $k_\hbar(x, y)$ donnée par

$$\begin{aligned} k_\hbar(x, y) &= (2\pi\hbar)^{-2d} \int_{\mathbb{R}^{3d}} a\left(\frac{1}{2}(x+z), \zeta\right) b\left(\frac{1}{2}(y+z), \eta\right) e^{\frac{i}{\hbar}(x-z)\cdot\zeta + \frac{i}{\hbar}(z-y)\cdot\eta} d\eta d\zeta dz. \end{aligned}$$

Écrivons $k_\hbar(x, y) = \hbar^{-d} K_\hbar((x+y)/2, (x-y)/\hbar)$ avec

$$\begin{aligned} K_\hbar(X, v) &= (2\pi)^{-2d} \int_{\mathbb{R}^{3d}} a\left(X + \frac{\hbar}{2}(w+v/2), \zeta\right) b\left(X + \frac{\hbar}{2}(w-v/2), \eta\right) \\ &\quad \times e^{-i\zeta\cdot(w-v/2) + i\eta\cdot(w+v/2)} d\zeta d\eta dw. \end{aligned}$$

Une formule de Taylor à l'ordre 2 permet d'écrire

$$\begin{aligned} (18) \quad K_\hbar(X, v) &= (2\pi)^{-2d} \int_{\mathbb{R}^{3d}} a(X, \zeta) b(X, \eta) e^{-i\zeta\cdot(w-v/2) + i\eta\cdot(w+v/2)} d\zeta d\eta dw \\ &\quad + \frac{\hbar}{2} (2\pi)^{-2d} \int_{\mathbb{R}^{3d}} (w+v/2) \cdot \nabla_x a(X, \zeta) b(X, \eta) \\ &\quad \times e^{-i\zeta\cdot(w-v/2) + i\eta\cdot(w+v/2)} d\zeta d\eta dw \\ &\quad + \frac{\hbar}{2} (2\pi)^{-2d} \int_{\mathbb{R}^{3d}} a(X, \zeta) (w-v/2) \cdot \nabla_x b(X, \eta) \\ &\quad \times e^{-i\zeta\cdot(w-v/2) + i\eta\cdot(w+v/2)} d\zeta d\eta dw \\ &\quad + \hbar^2 r_\hbar(X, v), \end{aligned}$$

où

$$r_{\hbar}(X, v) = \int_{\mathbb{R}^d} B_{\hbar}(X, w + v/2, -w + v/2) dw$$

avec

$$B_{\hbar}(X, u, u') = \frac{(2\pi)^{-2d}}{2} \sum_{|\alpha|+|\beta|=2} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \int_0^1 u^\alpha \partial_x^\alpha a(X + shu, \zeta) \\ \times (u')^\beta \partial_x^\beta b(X + shu', \eta) e^{i\zeta \cdot u + i\eta \cdot u'} d\zeta d\eta ds.$$

En utilisant des intégrations par parties en ζ et η , on obtient

$$(19) \quad B_{\hbar}(X, u, u') = -\frac{(2\pi)^{-2d}}{2} \sum_{|\alpha|+|\beta|=2} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \int_0^1 \partial_\zeta^\beta \partial_x^\alpha a(X + shu, \zeta) \\ \times \partial_\eta^\alpha \partial_x^\beta b(X + shu', \eta) e^{i\zeta \cdot u + i\eta \cdot u'} d\zeta d\eta ds$$

et on en déduit que la fonction $(X, u, u') \mapsto B_{\hbar}(X, u, u')$ est uniformément bornée par-rapport à \hbar : il existe $C_0 > 0$ tel que

$$\sup_{(x, u, u') \in \mathbb{R}^{3d}} |B_{\hbar}(X, u, u')| \\ \leq C_0 \sup_{|\alpha|+|\beta|=2} \sup_{x \in \mathbb{R}^d} \|\partial_x^\alpha \partial_\xi^\beta a(x, \bullet)\|_{L^1(\mathbb{R}^d)} \|\partial_x^\alpha \partial_\xi^\beta b(x, \bullet)\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}.$$

Le même argument donne :

$$(20) \quad \forall N \in \mathbb{N}, \quad \exists C_N(a, b) > 0, \\ \sup_{(x, u, u') \in \mathbb{R}^{3d}} (1 + |u|^2)^N (1 + |u'|^2)^N |B_{\hbar}(X, u, u')| \leq C_N(a, b)$$

avec

$$C_N(a, b) = \sup_{|\alpha|+|\beta|=2N+2} \sup_{x \in \mathbb{R}^d} \|\partial_x^\alpha \partial_\xi^\beta a(x, \bullet)\|_{L^1(\mathbb{R}^d)} \|\partial_x^\alpha \partial_\xi^\beta b(x, \bullet)\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}.$$

Revenons maintenant à la fonction K_{\hbar} : le même type d'intégrations par parties en ζ et η et une intégration en w (qui engendre une masse de Dirac $\delta(\zeta - \eta)$) permet d'écrire

$$(21) \quad K_{\hbar}(X, v) = K_{\hbar}^{(1)}(X, v) + \hbar^2 r_{\hbar}(X, v)$$

avec

$$\begin{aligned} K_{\hbar}^{(1)}(X, v) &= (2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} a(X, \zeta) b(X, \zeta) e^{i\zeta \cdot v} d\zeta \\ &\quad - \frac{\hbar}{2i} (2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} \nabla_x a(X, \zeta) \cdot \nabla_\xi b(X, \zeta) e^{i\zeta \cdot v} d\zeta \\ &\quad + \frac{\hbar}{2i} (2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} \nabla_\xi a(X, \zeta) \cdot \nabla_x b(X, \zeta) e^{i\zeta \cdot v} d\zeta. \end{aligned}$$

On remarque alors que la fonction

$$k_{\hbar}(x, y) = \hbar^{-d} K_{\hbar}^{(1)}\left(\frac{1}{2}(x+y), \frac{1}{\hbar}(x-y)\right)$$

est le noyau de l'opérateur

$$\text{Op}_{\hbar}\left(ab + \frac{\hbar}{2i} \nabla_\xi a \cdot \nabla_x b - \frac{\hbar}{2i} \nabla_x a \cdot \nabla_\xi b\right).$$

Par ailleurs, au vu de (20), on a

$$\int_{\mathbb{R}^d} \sup_{X \in \mathbb{R}^d} |r_{\hbar}(X, v)| dv \leq \int_{\mathbb{R}^d} \sup_{X \in \mathbb{R}^d} |B_{\hbar}(X, u, u')| du' du \leq C,$$

pour une constante $C > 0$. De ce fait, l'opérateur de noyau $\hbar^{-d} r_{\hbar}\left(\frac{1}{2}(x+y), \frac{1}{\hbar}(x-y)\right)$ est uniformément borné sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ par le corollaire 2.2. On déduit alors de l'équation (21) que

$$\text{Op}_{\hbar}(a) \circ \text{Op}_{\hbar}(b) = \text{Op}_{\hbar}\left(ab + \frac{\hbar}{2i} \nabla_\xi a \cdot \nabla_x b - \frac{\hbar}{2i} \nabla_x a \cdot \nabla_\xi b\right) + O(\hbar^2)$$

dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$.

La formule sur le commutateur (16) est une conséquence du calcul précédent. Il faut juste remarquer que les termes d'ordre 2 engendrés par la formule de Taylor dans (18) sont symétriques en a et b . En effet

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} B_0(X, w+v/2, w-v/2) dw \\ = \frac{(2\pi)^{-d}}{2} \sum_{|\alpha|+|\beta|=2} \partial_\xi^\beta \partial_x^\alpha a(X, \xi) \partial_\xi^\alpha \partial_x^\beta b(X, \xi) e^{i\xi \cdot v} d\xi. \end{aligned}$$

Ils engendrent donc des contributions identiques dans le développement de $\text{Op}_{\hbar}(a)\text{Op}_{\hbar}(b)$ et dans celui de $\text{Op}_{\hbar}(b)\text{Op}_{\hbar}(a)$, lesquelles vont s'annuler dans la formule du commutateur. \square

Dans la preuve ci-dessus, on voit qu'en poussant le développement de Taylor quelques crans plus loin, on obtiendrait un développement asymptotique d'ordre supérieur pour la formule de composition. On

voit que l'on peut réaliser cela à l'ordre que l'on veut. On a donc des formules asymptotiques à tout ordre.

Le calcul symbolique a de nombreuses applications. Dans les paragraphes suivants nous en décrivons quelques-unes.

4.2. Application 1 : l'approximation semi-classique et le théorème d'Egorov

Venons-en à l'équation de Schrödinger qui décrit l'évolution au cours du temps d'une fonction d'onde ψ_t^{\hbar} :

$$(22) \quad i\hbar\partial_t\psi_t^{\hbar} = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta\psi_t^{\hbar} + V(x)\psi_t^{\hbar},$$

avec une donnée initiale ψ_0^{\hbar} . Rappelons que la fonction

$$H(x, \xi) = \frac{1}{2}\|\xi\|^2 + V(x)$$

est appelée le hamiltonien de l'équation. En mettant des hypothèses précises sur V , par exemple en supposant que V est un potentiel C^∞ à croissance au plus quadratique lorsque $\|x\|$ tend vers l'infini, on peut démontrer l'existence d'une unique solution $t \mapsto \psi_t^{\hbar}$ associée à la donnée $\psi_0^{\hbar} \in L^2(\mathbb{R}^d)$, et qui est alors une fonction continue du temps à valeurs dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. Une façon d'exprimer ce résultat consiste à démontrer que, sous ces hypothèses sur le potentiel, l'opérateur non borné $\text{Op}_{\hbar}(H)$ est auto-adjoint et à définir son propagateur $U(t)$ grâce au théorème spectral qui sera évoqué dans la section suivante. Soit

$$U(t) = e^{-i\frac{t}{\hbar}\text{Op}_{\hbar}(H)},$$

l'opérateur $U(t)$ est unitaire et vérifie

$$(23) \quad i\hbar\frac{d}{dt}U(t) = \text{Op}_{\hbar}(H)U(t) = U(t)\text{Op}_{\hbar}(H), \quad U(0) = \text{Id}.$$

La solution de (22) est donc donnée par $\psi_t^{\hbar} = U(t)\psi_0^{\hbar}$.

Nous avons aussi vu au paragraphe 1.1 du texte de Frédéric Faure (ce volume) comment on associe au symbole $H(x, \xi)$ des quantités « classiques » telles que les trajectoires hamiltoniennes

$$(24) \quad \phi_t(x, \xi) = (x(t), \xi(t))$$

où

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = \xi(t), & x(0) = x, \\ \dot{\xi}(t) = -\nabla V(x(t)), & \xi(0) = \xi. \end{cases}$$

Par ailleurs, on a associé à ces trajectoires l'opérateur de Liouville \mathcal{L}_t défini par

$$\forall a \in C^\infty(\mathbb{R}^{2d}), \quad \mathcal{L}_t a = a \circ \phi_{-t},$$

et dont l'évolution infinitésimale vérifie

$$(25) \quad \frac{d}{dt}(\mathcal{L}_t a) = \{H, \mathcal{L}_t a\},$$

où le crochet de Poisson $\{\bullet, \bullet\}$ a été défini dans (17).

Le théorème d'Egorov décrit la conjugaison d'un opérateur pseudo-différentiel semi-classique par le propagateur de Schrödinger. Il relie ainsi l'évolution quantique (le propagateur de Schrödinger) à des quantités classiques (l'opérateur de Liouville) et ce lien est fait à la limite $\hbar \rightarrow 0$, appelée « limite semi-classique ». Nous sommes donc au cœur de l'approximation semi-classique qui nous permet de retrouver des équations de la mécanique classique en partant de la mécanique quantique.

Théorème 4.2. *Soit $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$. Pour tout $t \in \mathbb{R}$ on a l'égalité dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$,*

$$U(-t) \circ \text{Op}_\hbar(a) \circ U(t) = \text{Op}_\hbar(\mathcal{L}_t a) + O(\hbar^2 |t|).$$

Démonstration. On définit pour $s \in [0, t]$, $t > 0$, l'opérateur

$$A_\hbar(s) = U(-s) \text{Op}_\hbar(\mathcal{L}_{t-s} a) U(s).$$

On a donc

$$A_\hbar(0) = \text{Op}_\hbar(\mathcal{L}_t a) \quad \text{et} \quad A_\hbar(t) = U(-t) \circ \text{Op}_\hbar(a) \circ U(t).$$

En utilisant (23) et (25), on écrit

$$\frac{d}{ds} A_\hbar(s) = U(-s) \left(\frac{1}{i\hbar} [\text{Op}_\hbar(\mathcal{L}_{t-s} a), \text{Op}_\hbar(H)] - \text{Op}_\hbar(\{H, \mathcal{L}_{t-s} a\}) \right) U(s).$$

Compte tenu du calcul symbolique

$$[\text{Op}_\hbar(\mathcal{L}_{t-s} a), \text{Op}_\hbar(H)] = \frac{\hbar}{i} \text{Op}_\hbar(\{\mathcal{L}_{t-s} a, H\}) + O(\hbar^3),$$

d'où

$$\frac{d}{ds} A_\hbar(s) = O(\hbar^2),$$

ce qui donne le résultat après intégration entre $s = 0$ et $s = t$. \square

Ce théorème permet de décrire la transformée de Wigner au temps t d'une famille de solutions de l'équation de Schrödinger (22).

Corollaire 4.3. Soit $w^{\hbar}(t)$, la transformée de Wigner de ψ_t^{\hbar} , solution de (22). Alors, pour tout $a \in C_0^{\infty}(\mathbb{R}^{2d})$,

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x, \xi) w^{\hbar}(t, x, \xi) dx d\xi = \int_{\mathbb{R}^{2d}} (\mathcal{L}_t a)(x, \xi) w^{\hbar}(0, x, \xi) dx d\xi + O(\hbar^2 |t|).$$

En particulier, si $(\psi_0^{\hbar})_{\hbar>0}$ a une unique mesure semi-classique μ_0 , alors $(\psi_t^{\hbar})_{\hbar>0}$ a une unique mesure semi-classique μ_t définie par

$$\forall a \in C_0^{\infty}(\mathbb{R}^{2d}), \quad \int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x, \xi) d\mu_t(x, \xi) = \int_{\mathbb{R}^{2d}} (\mathcal{L}_t a)(x, \xi) d\mu_0(x, \xi).$$

Le résultat du corollaire 4.3 ouvre la voie au développement de méthodes numériques efficaces pour calculer la transformée de Wigner de la famille $(\psi_t^{\hbar})_{\hbar>0}$ en écrivant

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x, \xi) w^{\hbar}(t, x, \xi) dx d\xi \sim \int_{\mathbb{R}^{2d}} (\mathcal{L}_t a)(x, \xi) w^{\hbar}(0, x, \xi) dx d\xi,$$

et il suffit de connaître la transformée de Wigner de la fonction d'onde au temps initial pour la calculer à un instant t donné sans avoir à résoudre numériquement des équations dépendant du paramètre \hbar . En effet, il existe des méthodes efficaces de résolution numérique permettant de calculer les trajectoires hamiltoniennes ϕ_t , et donc l'opérateur de Liouville \mathcal{L}_t . Cette méthode est beaucoup moins coûteuse en termes de temps de calcul que la résolution numérique de l'équation de Schrödinger car la présence de \hbar dans (22) impose d'utiliser des pas de discrétisation de très petite taille. Des méthodes de ce type ont été développées en particulier dans [LR10, FL12] avec des applications en chimie quantique. On trouvera aussi dans [Las12] des schémas numériques basés sur le théorème d'Egorov et utilisant des termes de correction issus d'une analyse fine du développement asymptotique du commutateur dans le calcul symbolique.

4.3. Application 2 : inégalité de Gårding

L'inégalité de Gårding répond à la question du lien entre la positivité de la fonction a et la positivité de l'opérateur associé. Nous démontrons ici une version faible de l'inégalité de Gårding.

Proposition 4.4. Soit $a \in C_0^{\infty}(\mathbb{R}^{2d})$ tel que $a \geq 0$. Alors, pour tout $\delta > 0$, il existe $C_{\delta} > 0$ tel que pour tout $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$,

$$\langle f, \text{Op}_{\hbar}(a)f \rangle \geq -(\delta + C_{\delta}\hbar^2) \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2, \quad \forall f \in L^2(\mathbb{R}^d).$$

Sous les hypothèses de la proposition ci-dessus, on peut démontrer l'inégalité suivante :

$$\exists C > 0, \quad \forall f \in L^2(\mathbb{R}^d), \quad \langle f, \text{Op}_{\hbar}(a)f \rangle \geq -C\hbar^2 \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2.$$

Cette inégalité est connue sous le nom d'inégalité de Fefferman-Phong (voir [Zwo12] pour une preuve détaillée). Comme nous le verrons ci-dessous, la version faible que nous avons énoncée dans la proposition 4.4 se démontre de façon élémentaire et permet déjà d'obtenir des résultats intéressants à la limite $\hbar \rightarrow 0$.

Démonstration. La proposition repose sur l'observation que si $a \geq 0$, on peut lui associer une « presque racine carrée » en considérant une fonction $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ telle que $\chi = 1$ sur le support de a et en posant pour $\tilde{\delta} > 0$

$$b_{\tilde{\delta}}(x, \xi) = \chi(x, \xi)(a(x, \xi) + \tilde{\delta})^{1/2}.$$

On obtient ainsi une fonction $b_{\tilde{\delta}} \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ telle que

$$b_{\tilde{\delta}}(x, \xi)^2 = a(x, \xi) + \tilde{\delta}\chi^2(x, \xi).$$

Le calcul symbolique donne alors dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$,

$$\text{Op}_{\hbar}(b_{\tilde{\delta}})^* \text{Op}_{\hbar}(b_{\tilde{\delta}}) = \text{Op}_{\hbar}(a) + \tilde{\delta} \text{Op}_{\hbar}(\chi^2(x, \xi)) + O(\hbar^2).$$

Considérons maintenant $\delta > 0$ et ajustons $\tilde{\delta}$ de sorte que

$$\tilde{\delta} \|\text{Op}_{\hbar}(\chi^2(x, \xi))\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} \leq \delta,$$

on obtient alors pour $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$,

$$\begin{aligned} 0 &\leq \|\text{Op}_{\hbar}(b_{\tilde{\delta}})f\|^2 = \langle f, \text{Op}_{\hbar}(b_{\tilde{\delta}})^* \text{Op}_{\hbar}(b_{\tilde{\delta}})f \rangle \\ &= \langle f, \text{Op}_{\hbar}(a)f \rangle + \tilde{\delta} \langle f, \text{Op}_{\hbar}(\chi^2(x, \xi))f \rangle + O\left(\hbar^2 \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2\right) \\ &\leq \langle f, \text{Op}_{\hbar}(a)f \rangle + \delta \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 + O\left(\hbar^2 \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2\right). \end{aligned}$$

D'où le résultat. \square

Un corollaire important de l'inégalité de Gårding est la positivité des limites faibles des transformées de Wigner.

Théorème 4.5. *Soit $(f^{\hbar})_{\hbar>0}$ une famille uniformément bornée dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, il existe une suite $(\hbar_n)_{n \in \mathbb{N}}$ tendant vers 0 lorsque n tend vers l'infini et une mesure de Radon positive μ telle que*

$$(26) \quad \forall a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d}), \quad \langle f^{\hbar_n}, \text{Op}_{\hbar_n}(a)f^{\hbar_n} \rangle \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x, \xi) d\mu(x, \xi).$$

Toute mesure μ vérifiant (26) pour une certaine suite $(\hbar_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est appelée mesure de Wigner ou mesure semi-classique de la famille $(f^{\hbar})_{\hbar > 0}$. Une famille donnée peut donc avoir plusieurs mesures semi-classiques. On remarquera que les suites (u_{\hbar}) et (v_{\hbar}) étudiées dans l'introduction admettent chacune une unique mesure semi-classique que l'on notera μ_u et μ_v et qui vérifient pour tout $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$,

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x, \xi) d\mu_u(x, \xi) = (2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} a(x_0, \xi) |\widehat{\Phi}(\xi)|^2 d\xi$$

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x, \xi) d\mu_v(x, \xi) = \int_{\mathbb{R}^d} a(x, \xi_0) |\Phi(x)|^2 dx.$$

Pour chacune de ces deux familles, on voit apparaître les points d'obstruction à la convergence forte dans le support de sa mesure semi-classique. Nous nous concentrons maintenant sur la preuve du théorème 4.5.

Démonstration. La quantité

$$I_{\hbar}(a) = \langle f^{\hbar}, \text{Op}_{\hbar}(a) f^{\hbar} \rangle$$

étant bornée en \hbar pour toute fonction $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$, on peut en extraire une sous suite convergente $I_{\hbar_n, a}(a)$. En considérant une partie dénombrable dense de l'ensemble $C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ et en utilisant un principe d'extraction diagonal, on construit une suite \hbar_n pour laquelle $I_{\hbar_n}(a)$ a une limite pour tout $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$. L'application qui associe à a la limite $I(a)$ de la suite $I_{\hbar_n}(a)$ est une forme linéaire sur $C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ et l'inégalité de Gårding montre que cette forme linéaire est positive.

Par ailleurs, en considérant une fonction $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ telle que $0 \leq \chi \leq 1$, $\chi(u) = 0$ pour $|u| \geq 2$ et $\chi(u) = 1$ pour $|u| \leq 1$, on obtient par le lemme de Fatou

$$\forall R > 0, \quad I(1) \leq I(\chi(x^2 + \xi^2/R)) \leq C,$$

où C est une constante strictement positive. On a donc $I(1) < \infty$ et la positivité de I donne

$$\forall a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d}), \quad I(\|a\|_{L^\infty(\mathbb{R}^{2d})} - a) \geq 0,$$

ce qui implique un contrôle de type mesure de la quantité $I(a)$:

$$\forall a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d}), \quad I(a) \leq C \|a\|_{L^\infty(\mathbb{R}^{2d})}.$$

La forme linéaire I définit donc une mesure de Radon positive μ sur \mathbb{R}^{2d} . \square

L'utilisation des mesures semi-classiques s'est généralisée dans les années 1990 avec les articles [LP93] ou [GL93] (voir aussi [GMMP97]). Leur emploi a permis récemment de montrer d'importants résultats sur la densité de suites de fonctions propres du laplacien sur le tore (voir [AM14]). En effet, on peut relier les mesures semi-classiques aux limites faibles des densités de probabilité de présence comme le montre la proposition suivante.

Proposition 4.6. *Soit μ une mesure semi-classique de la famille (f^{\hbar}) pour la sous-suite \hbar_n .*

(i) *Pour tout $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$,*

$$\liminf_{n \rightarrow +\infty} \int_{\mathbb{R}^d} \varphi(x) |f^{\hbar_n}(x)|^2 dx \geq \int_{\mathbb{R}^{2d}} \varphi(x) \mu(dx, d\xi).$$

(ii) *Si $(f^{\hbar})_{\hbar > 0}$ est \hbar -oscillante, c'est-à-dire si*

$$\limsup_{\hbar \rightarrow 0} \int_{|\xi| > R/\hbar} |\widehat{f^{\hbar}}(\xi)|^2 d\xi \xrightarrow{R \rightarrow +\infty} 0,$$

alors pour tout $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$,

$$\liminf_{n \rightarrow +\infty} \int_{\mathbb{R}^d} \varphi(x) |f^{\hbar_n}(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}^{2d}} \varphi(x) \mu(dx, d\xi).$$

(iii) *Si f^{\hbar_n} converge faiblement vers f lorsque n tend vers $+\infty$, c'est-à-dire si elle vérifie*

$$\forall g \in L^2(\mathbb{R}^d), \quad \langle f^{\hbar_n}, g \rangle \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \langle f, g \rangle,$$

alors

$$(27) \quad \forall a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d), \quad \int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x, \xi) d\mu(x, \xi) \geq \int_{\mathbb{R}^d} a(x, 0) |f(x)|^2 dx.$$

On notera $\delta(\xi) \otimes |f(x)|^2 dx$ la mesure définie par le membre de droite de l'équation (27).

Démonstration.

(i) On utilise la fonction χ introduite dans la preuve du théorème 4.5. On écrit pour $R > 0$,

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} \varphi(x) |f^{\hbar_n}(x)|^2 dx &\geq \langle f^{\hbar_n}, \varphi(x) \chi(\hbar_n D/R) f^{\hbar_n} \rangle \\ &\geq \langle f^{\hbar_n}, \text{Op}_{\hbar_n}(\varphi(x) \chi(\xi/R)) f^{\hbar_n} \rangle + O(\hbar_n). \end{aligned}$$

En passant à la limite $n \rightarrow +\infty$, on obtient pour tout $R > 0$,

$$\liminf_{n \rightarrow +\infty} \int_{\mathbb{R}^d} \varphi(x) |f^{\hbar n}(x)|^2 dx \geq \int_{\mathbb{R}^{2d}} \varphi(x) \chi(\xi/R) \mu(dx, d\xi),$$

d'où le résultat en faisant tendre R vers $+\infty$.

(ii) On remarque que la condition de \hbar -oscillation implique que pour la fonction χ précédente, on a

$$\limsup_{n \rightarrow +\infty} \left\langle f^{\hbar n}, \varphi(x) (1 - \chi(\hbar_n D/R)) f^{\hbar n} \right\rangle \xrightarrow{R \rightarrow +\infty} 0.$$

On obtient donc le résultat annoncé en faisant tendre n puis R vers l'infini dans l'égalité

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} \varphi(x) |f^{\hbar n}(x)|^2 dx &= \left\langle f^{\hbar n}, \varphi(x) \chi(\hbar_n D/R) f^{\hbar n} \right\rangle \\ &\quad + \left\langle f^{\hbar n}, \varphi(x) (1 - \chi(\hbar_n D/R)) f^{\hbar n} \right\rangle \\ &= \left\langle f^{\hbar n}, \text{Op}_{\hbar_n}(\varphi(x) \chi(\xi/R)) f^{\hbar n} \right\rangle + O(\hbar_n) \\ &\quad + \left\langle f^{\hbar n}, \varphi(x) (1 - \chi(\hbar_n D/R)) f^{\hbar n} \right\rangle \end{aligned}$$

(iii) On pose $g^{\hbar} = f^{\hbar} - f$ et on écrit pour $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$,

$$\langle g^{\hbar n}, \text{Op}_{\hbar_n}(a) g^{\hbar n} \rangle = (1) + (2) + (3)$$

avec

$$(1) = \langle f^{\hbar n}, \text{Op}_{\hbar}(a) f^{\hbar n} \rangle \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x, \xi) \mu(dx, d\xi);$$

$$(2) = \langle f, \text{Op}_{\hbar_n}(a) f \rangle - \langle f^{\hbar n}, \text{Op}_{\hbar_n}(a) f \rangle \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$$

$$\begin{aligned} (3) &= \langle f, \text{Op}_{\hbar_n}(a) f^{\hbar n} \rangle = \langle \text{Op}_{\hbar_n}(\bar{a}) f, f^{\hbar n} \rangle + O(\hbar_n) \\ &\xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \int_{\mathbb{R}^d} \int a(x, 0) |f(x)|^2 dx. \end{aligned}$$

On en déduit que la mesure $\mu(x, \xi) - |f(x)|^2 dx \otimes \delta(\xi)$ est une mesure semi-classique de la famille $(g^{\hbar})_{\hbar > 0}$ et est donc une mesure positive, on en déduit la relation (27). \square

Une application intéressante de la proposition 4.6 est proposée dans l'article [GL93]. Soit $\theta \in L^2(\mathbb{R}^d)$ et S une fonction localement intégrable dont la dérivée au sens des distributions est aussi localement intégrable. On suppose que $dS \neq 0$ presque partout, alors on peut montrer que la suite $f^{\hbar}(x) = e^{iS(x)/\hbar} \theta(x)$ converge faiblement vers 0

lorsque \hbar tend vers 0. La preuve de [GL93] consiste à étudier la transformée de Wigner de la famille $(f^\hbar)_{\hbar>0}$, et à démontrer que l'unique mesure semi-classique de cette famille est

$$\mu(x, \xi) = |\theta(x)|^2 dx \otimes \delta(\xi - dS(x)).$$

Une fois démontré que la famille $(f^\hbar)_{\hbar>0}$ est \hbar -oscillante, le résultat (iii) de la proposition 4.6 implique que toute limite faible de $(f^\hbar)_{\hbar>0}$ est nulle sous la condition $dS \neq 0$ presque partout. C'est une preuve relativement simple d'un résultat que la faible régularité supposée sur la fonction S rend difficile à démontrer. Nous renvoyons le lecteur intéressé à l'article [GL93].

4.4. Application 3 : calcul fonctionnel

Notre deuxième application du calcul symbolique concerne le calcul fonctionnel qui permet d'associer à certains opérateurs P un autre opérateur $\varphi(A)$ obtenu comme « fonction » de P par une fonction continue φ . Une fois établi un tel processus, et dans le cas où P est un opérateur pseudo-différentiel, on peut se demander s'il en est de même de l'opérateur $\varphi(P)$.

Rappelons qu'un opérateur P défini sur un espace de Hilbert \mathcal{H} est dit auto-adjoint s'il est égal à son adjoint, $P = P^*$. Un tel opérateur a un spectre réel :

$$\text{sp}(P) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid P - \lambda \text{Id est inversible}\} \subset \mathbb{R}.$$

Pour les opérateurs auto-adjoints, il existe un théorème spectral qui joue le rôle du théorème de diagonalisation des matrices hermitiennes. Ce théorème permet de décrire un opérateur auto-adjoint P grâce à une mesure $E(\lambda)$ sur \mathbb{R} supportée par le spectre de P et appelée mesure spectrale de P , et à une famille de projecteurs $R(\lambda)$, appelés projecteurs spectraux. On écrit

$$P = \int_{\mathbb{R}} \lambda dE(\lambda)R(\lambda)$$

et on a alors

$$\forall f \in L^2(\mathbb{R}^d), \quad Pf = \int_{\mathbb{R}} R(\lambda) f \lambda dE(\lambda).$$

Dans le cas de l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = \mathbb{C}^d$, un opérateur auto-adjoint est donné par une matrice hermitienne A et la mesure $E(\lambda)$ est

déterminée par les k valeurs propres distinctes de A , $\lambda_1 < \dots < \lambda_k$:

$$E(\lambda) = \sum_{1 \leq j \leq k} \delta(\lambda - \lambda_j),$$

et, pour $j \in \{1, \dots, k\}$, le projecteur $R(\lambda_j)$ n'est rien d'autre que le projecteur sur le sous-espace propre associé à λ_j . Dans le cas général, la structure de la mesure $E(\lambda)$ est plus compliquée.

Toujours dans le cas $\mathcal{H} = \mathbb{C}^d$, si F est une fonction continue sur \mathbb{R} et à valeurs dans \mathbb{C} , on définit la matrice $F(A)$ par

$$F(A) = \sum_{1 \leq j \leq k} F(\lambda_j) R(\lambda_j).$$

De même, dans le cas général, on définit l'opérateur $F(P)$ par la formule

$$F(P) = \int_{\mathbb{R}} F(\lambda) R(\lambda) dE(\lambda).$$

Nous renvoyons au livre [Dav95] pour une présentation du calcul fonctionnel pour les opérateurs auto-adjoints.

Nous avons vu dans la section précédente que, lorsque le symbole a est à valeurs réelles, l'opérateur $\text{Op}_{\hbar}(a)$ est un opérateur auto-adjoint. Il est donc légitime de se demander ce qui reste de la nature pseudo-différentielle de l'opérateur, une fois qu'on l'a transformé par le calcul fonctionnel. C'est à cette question que répond le théorème suivant.

Théorème 4.7. *Soit $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ à valeurs réelles et $F \in C_0^\infty(\mathbb{R})$. Soit $F(\text{Op}_{\hbar}(a))$ l'opérateur associé par le calcul fonctionnel. Alors dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$*

$$F(\text{Op}_{\hbar}(a)) = \text{Op}_{\hbar}(F(a)) + O(\hbar).$$

Ce théorème repose sur la formule de Helffer-Sjöstrand qui sera décrite dans la proposition 4.8 ci-dessous. L'idée sous-jacente à cette formule consiste à étendre la fonction F en une fonction \tilde{F} définie sur le plan complexe et comportant de bonnes propriétés. Par là, on pense bien entendu au fait d'admettre des dérivées partielles en x ou en y , mais aussi à des propriétés liées à la structure complexe. Rappelons qu'à une fonction d'une variable complexe \tilde{F} , on associe

$$\frac{\partial \tilde{F}}{\partial \bar{z}} := \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{F}}{\partial x} + i \frac{\partial \tilde{F}}{\partial y} \right).$$

Une fonction \tilde{F} qui est une fonction de $C^1(\mathbb{R}^2)$ en tant que fonction des variables x et y et qui vérifie $\partial \tilde{F} / \partial \bar{z} = 0$ est dite holomorphe,

elle est alors analytique. On va donc chercher à étendre F au plan complexe en étant compatible autant que possible avec cette structure analytique. Comme on va construire un prolongement à support compact et qu'il n'existe pas de fonctions analytiques à support compact autres que la fonction nulle, ce prolongement \tilde{F} sera appelé prolongement presque analytique au sens où $\partial\tilde{F}/\partial\bar{z}$ s'annulera sur la droite réelle à un ordre aussi élevé que souhaité. Plus précisément, on démontre la proposition qui suit.

Proposition 4.8 ([HS89] et [Dav95]). *Soit $F \in C_0^\infty(\mathbb{R})$. Pour tout $N_0 \in \mathbb{N}$, il existe un prolongement presque analytique, c'est-à-dire une fonction $\tilde{F} \in C_0^\infty(\mathbb{C})$ coïncidant avec F sur \mathbb{R} et telle que l'on ait l'estimation*

$$(28) \quad \forall z \in \mathbb{C}, \quad \left| \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \tilde{F}(z) \right| \leq C |\operatorname{Im}(z)|^{N_0},$$

et l'égalité

$$(29) \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}, \quad F(\lambda) = -\frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \tilde{F}(z) (\lambda - z)^{-1} dz,$$

où dz est la mesure de Lebesgue sur \mathbb{C} ($dz = dx dy$ où $z = x + iy$).

La formule (29) est appelée formule de Helffer-Sjöstrand. Nous renvoyons à la fin de ce paragraphe pour la preuve de la proposition 4.8 et la construction de \tilde{F} et démontrons maintenant le théorème 4.7.

Démonstration. Soit maintenant $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ à valeurs réelles. L'opérateur $\operatorname{Op}_\hbar(a)$ est alors auto-adjoint par (14) et, par le théorème spectral ainsi que la formule (30), on peut écrire

$$(30) \quad F(\operatorname{Op}_\hbar(a)) = -\frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \tilde{F}(z) (\operatorname{Op}_\hbar(a) - z)^{-1} dz.$$

En effet, si $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, l'opérateur $\operatorname{Op}_\hbar(a) - z$ est inversible et la norme de la résolvante $(\operatorname{Op}_\hbar(a) - z)^{-1}$ est contrôlée par la distance de z au spectre qui est inclus dans \mathbb{R} :

$$(31) \quad \exists C > 0, \quad \|(\operatorname{Op}_\hbar(a) - z)^{-1}\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} \leq C |\operatorname{Im}(z)|^{-1}.$$

En choisissant N_0 suffisamment grand dans (28), l'intégrale (30) est bien définie.

Nous allons maintenant utiliser les formules de calcul symbolique. Pour deux symboles b_1 et b_2 , on a

$$\operatorname{Op}_\hbar(b_1)\operatorname{Op}_\hbar(b_2) = \operatorname{Op}_\hbar(b_1 b_2) + \hbar R_\hbar \quad \text{dans } \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$$

avec

$$\|R_{\hbar}\|_{\mathcal{L}(L^2)} \leq C \left(\sup_{|\beta| \leq N} \sup_{x \in \mathbb{R}^d} \|\partial_{\xi}^{\beta} b_1(x, \cdot)\|_{L^1(\mathbb{R}^d)} \right) \left(\sup_{|\beta| \leq N} \sup_{x \in \mathbb{R}^d} \|\partial_{\xi}^{\beta} b_2(x, \cdot)\|_{L^1(\mathbb{R}^d)} \right)$$

pour un certain $N \in \mathbb{N}$. Nous allons appliquer cette formule à $b_1 = a - z$ et $b_2 = (a - z)^{-1}$; ces symboles ne sont pas à support compact mais génèrent néanmoins des opérateurs bornés (avec des bornes dépendant de z) et à qui on peut appliquer le calcul symbolique. Ceci permet d'écrire, pour tout $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$,

$$\text{Op}_{\hbar}(a - z) \text{Op}_{\hbar}((a - z)^{-1}) = \text{Op}_{\hbar}(1) + \hbar R_{\hbar} = \text{Id} + \hbar R_{\hbar},$$

avec $\|R_{\hbar}\|_{\mathcal{L}(L^2)} \leq |\text{Im}(z)|^{-N_1}$ pour un certain $N_1 \in \mathbb{N}$. En conjuguant cette équation par la résolvante $(\text{Op}_{\hbar}(a) - z)^{-1}$, on en déduit grâce à (31)

$$\text{Op}_{\hbar}((a - z)^{-1}) = (\text{Op}_{\hbar}(a) - z)^{-1} + \hbar \tilde{R}_{\hbar} = (\text{Op}_{\hbar}(a - z))^{-1} + \hbar \tilde{R}_{\hbar},$$

avec $\|\tilde{R}_{\hbar}\|_{\mathcal{L}(L^2)} \leq C |\text{Im}(z)|^{-N_1 - 1}$. En choisissant $N_0 > N_1$ dans (28), la formule d'Helffer-Sjöstrand (30) donne alors

$$\begin{aligned} F(\text{Op}_{\hbar}(a)) &= -\frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \tilde{F}(z) \text{Op}_{\hbar}((a - z)^{-1}) dz + O(\hbar) \\ &= \text{Op}_{\hbar} \left(-\frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \tilde{F}(z) (a - z)^{-1} dz \right) + O(\hbar) \\ &= \text{Op}_{\hbar}(F(a)) + O(\hbar). \end{aligned} \quad \square$$

Il reste à démontrer la proposition 4.8.

Démonstration. Soit \tilde{F} , la fonction de \mathbb{C} dans \mathbb{C} définie par

$$(32) \quad \forall (x, y) \in \mathbb{R}^2, \quad \tilde{F}(x + iy) = \left(\sum_{k=0}^{N_0} F^{(k)}(x) \frac{(iy)^k}{k!} \right) \chi(x, y)$$

où $\chi(x, y) = \theta(y/\sqrt{1+x^2})$ pour une fonction θ , paire, qui vaut 1 sur $[-1, 1]$ et 0 sur l'intervalle $]-\infty, -2] \cup [2, +\infty[$. On remarquera que

$$\frac{\partial \tilde{F}}{\partial \bar{z}} = \frac{1}{2} \left(\sum_{k=0}^{N_0} F^{(k)}(x) \frac{(iy)^k}{k!} \right) (\partial_x \chi + i \partial_y \chi) + \frac{1}{2} F^{(N_0+1)}(x) \frac{(iy)^{N_0}}{N_0!} \chi.$$

On en déduit que lorsque $y \rightarrow 0$, pour tout $x \in \mathbb{R}$,

$$\left| \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \tilde{F}(x + iy) \right| = O(|y|^{N_0}),$$

d'où le nom de prolongement presque analytique, puisqu'il est « analytique » ($\partial_{\bar{z}}\tilde{F} = 0$) sur la droite réelle.

Il reste à vérifier que la fonction \tilde{F} vérifie bien l'équation (29). Pour cela, on va utiliser un domaine auxiliaire. On choisit $C > 0$ tel que

$$\text{Supp}(\tilde{F}) \subset \{z = x + iy \in \mathbb{C} \mid |x| \leq C, |y| \leq C\}$$

et on définit Ω_δ pour $\delta > 0$ par

$$\Omega_\delta = \{z = x + iy \in \mathbb{C} \mid |x| \leq C, \delta < |y| < C\}.$$

On a alors

$$-\frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \tilde{F}(z)(\lambda - z)^{-1} dz, = -\frac{1}{\pi} \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{\Omega_\delta} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \tilde{F}(z)(\lambda - z)^{-1} dz.$$

Par ailleurs, en remarquant que $\partial\Omega_\delta$ ne rencontre le support de \tilde{F} que le long de deux segments, la formule de Stokes nous donne

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\pi} \int_{\Omega_\delta} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \tilde{F}(z)(\lambda - z)^{-1} dz \\ &= \frac{i}{2\pi} \int_{-N}^{+N} \left(\tilde{F}(x + i\delta)(\lambda - x - i\delta)^{-1} - \tilde{F}(x - i\delta)(\lambda - x + i\delta)^{-1} \right) dx, \end{aligned}$$

pour un certain $N \in \mathbb{R}^+$ qui peut être pris de sorte que $|\lambda| < N$. Lorsque l'on remplace \tilde{F} par l'expression (32), on voit apparaître la somme de trois termes

$$-\frac{1}{\pi} \int_{\Omega_\delta} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \tilde{F}(z)(\lambda - z)^{-1} dL(z) = A_{\delta,0} + A_{\delta,1} + A_{\delta,2}$$

où, pour $j \in \{0, 1, 2\}$,

$$A_{\delta,j} = \frac{i}{2\pi} \int_{-N}^{+N} \left[(G_j(x + i\delta)(x + i\delta - \lambda)^{-1} - G_j(x - i\delta)(x - i\delta - \lambda)^{-1}) \right] dx$$

avec pour tout $(x, y) \in \mathbb{R}^2$,

$$\begin{aligned} G_0(x + iy) &= F(x)\chi(x, y), \\ G_1(x + iy) &= iyF'(x)\chi(x, y), \\ G_2(x + iy) &= O(|y|^2). \end{aligned}$$

L'équation (29) vient alors de l'observation.

$$A_{\delta,0} \xrightarrow{\delta \rightarrow 0} F(\lambda), \quad A_{\delta,1} \xrightarrow{\delta \rightarrow 0} 0, \quad A_{\delta,2} \xrightarrow{\delta \rightarrow 0} 0.$$

La preuve de ces trois limites conclut donc la démonstration de la proposition 4.8. \square

Il s'agit là de trois estimations élémentaires. Remarquons tout d'abord qu'il existe une constante C_2 telle que

$$|A_{\delta,2}| \leq \frac{C_2}{\delta} \int_{-N}^{+N} (|G_2(x+i\delta)| + |G_2(x-i\delta)|) dx \leq 4N C_2 \delta.$$

Par ailleurs, la fonction θ ayant été choisie paire, on peut écrire

$$\begin{aligned} |A_{\delta,1}| &= \left| \frac{\delta}{\pi} \int_{-N}^{+N} F'(x) \theta\left(\frac{\delta}{\sqrt{1+x^2}}\right) \frac{x-\lambda}{\delta^2 + (x-\lambda)^2} dx \right| \\ &\leq \frac{\delta}{\pi} \sup_{[-N,N]} |F'| \sup_{\mathbb{R}} |\theta| \int_{\frac{-N-\lambda}{\delta}}^{\frac{N-\lambda}{\delta}} \frac{u}{1+u^2} du \\ &\leq \frac{\delta}{2\pi} \sup_{[-N,N]} |F'| \sup_{\mathbb{R}} |\theta| \log \left(\frac{(N-\lambda)^2 + \delta^2}{(N+\lambda)^2 + \delta^2} \right), \end{aligned}$$

ce qui donne la convergence vers 0 de $A_{\delta,1}$ lorsque δ tend vers 0. Enfin, toujours en utilisant la parité de θ , on écrit

$$\begin{aligned} A_{\delta,0} &= \frac{1}{\pi} \int_{-N}^{+N} F(x) \frac{\delta}{(x-\lambda)^2 + \delta^2} \theta\left(\frac{\delta}{\sqrt{1+x^2}}\right) dx \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{\frac{-N-\lambda}{\delta}}^{\frac{N-\lambda}{\delta}} F(\lambda + \delta u) \chi\left(\frac{\delta}{\sqrt{1+(\lambda+\delta u)^2}}\right) \frac{du}{1+u^2} \end{aligned}$$

On a donc

$$A_{\delta,0} \xrightarrow{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} F(\lambda) \chi(0) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{1+u^2} = F(\lambda),$$

ce qui conclut la preuve.

5. Opérateurs pseudo-différentiels sur une variété

Avant d'esquisser la manière dont on étend la notion d'opérateurs pseudo-différentiels au cas d'une variété, nous commencerons par étudier la transformation d'un opérateur pseudo-différentiel semi-classique par changement de variable. Cela nous permettra de mieux comprendre la nature géométrique de l'espace des phases et de pouvoir étendre ce calcul au cas des variétés.

5.1. Opérateurs pseudo-différentiels et changement de variables

Soit κ un C^1 difféomorphisme d'un voisinage U de $x_0 \in \mathbb{R}^d$ dans un voisinage V de $0 \in \mathbb{R}^d$. Si $x \in U$, $\kappa(x)$ est un vecteur de \mathbb{R}^d , $\kappa(x) =$

$(\kappa_1(x), \dots, \kappa_d(x))$. On notera abusivement $\nabla\kappa$ la matrice dont les lignes sont les vecteurs $\nabla\kappa_i$, c'est-à-dire la matrice de coefficient i ème ligne, j -ème colonne $\partial\kappa_i/\partial x_j(x)$. Comme κ est un difféomorphisme local, cette matrice est inversible pour tout $x \in U$.

Si f est une fonction à support dans U , on lui associe κ_*f à support dans V définie par

$$\kappa_*f = f \circ \kappa^{-1}.$$

L'application κ_* ainsi définie admet comme inverse κ^* , définie par $\kappa^*f = f \circ \kappa$.

Proposition 5.1. *Pour tout $a \in C_0^\infty(V \times \mathbb{R}^d)$, on a*

$$\|\kappa^* \text{Op}_{\hbar}(a) \kappa_* - \text{Op}_{\hbar}(a \circ (T^*\kappa))\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} = O(\hbar),$$

avec

$$(33) \quad (T^*\kappa)(x, \xi) = \left(\kappa(x), {}^t\nabla\kappa(x)^{-1}\xi \right).$$

Démonstration. On remarque que si f est à support dans V ,

$$\begin{aligned} \kappa^* \text{Op}_{\hbar}(a) \kappa_* f(x) &= (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} a\left(\frac{1}{2}(\kappa(x) + z), \xi\right) e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (\kappa(x) - z)} f \circ \kappa^{-1}(z) dz d\xi. \end{aligned}$$

Après changement de variable $z = \kappa(y)$, on voit que le noyau de cet opérateur est la fonction

$$(34) \quad k_{\hbar}(x, y) = (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} a\left(\frac{1}{2}(\kappa(x) + \kappa(y)), \xi\right) e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (\kappa(x) - \kappa(y))} J_{\kappa}(y) d\xi,$$

où J_{κ} est le jacobien du changement de variable,

$$J_{\kappa}(y) = |\det(\nabla\kappa(y))|.$$

Écrivons

$$(35) \quad k_{\hbar}(x, y) = \hbar^{-d} K_{\hbar}\left(\frac{1}{2}(x + y), \frac{1}{\hbar}(x - y)\right)$$

avec

$$\begin{aligned} K_{\hbar}(X, v) &= (2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (\kappa(X + \hbar v/2) - \kappa(X - \hbar v/2))} \\ &\quad \times a\left(\frac{1}{2}(\kappa(X + \hbar v/2) + \kappa(X - \hbar v/2)), \xi\right) J_{\kappa}(X + \hbar v/2) d\xi. \end{aligned}$$

Ici encore, nous allons utiliser des formules de Taylor. Une formule de Taylor à l'ordre 1 avec reste intégral permet d'écrire

$$J_{\kappa}(X + \hbar v/2) = J_{\kappa}(X) + \hbar A(X, \hbar v) \cdot v$$

où A est une fonction sur \mathbb{R}^{2d} à valeurs dans \mathbb{R}^d dont les d composantes sont indéfiniment dérivable, bornées ainsi que toutes leurs dérivées partielles, uniformément par-rapport à $\hbar \in]0, 1]$. La formule de Taylor à l'ordre 2 avec reste intégral donne

$$\kappa(X + \hbar v/2) + \kappa(X - \hbar v/2) = 2\kappa(X) + \hbar^2 B(X, \hbar v)v \cdot v,$$

où B est une fonction sur \mathbb{R}^{2d} à valeurs dans les matrices $d \times d$ dont les coefficients sont indéfiniment dérivables, bornés ainsi que leurs dérivées partielles, uniformément par-rapport à $\hbar \in]0, 1]$. Enfin, en faisant deux formules de Taylor, l'une à l'ordre 3 et l'autre à l'ordre 1, on obtient

$$\begin{aligned} \kappa(X + \hbar v/2) - \kappa(X - \hbar v/2) &= \hbar \nabla \kappa(X) \cdot v + \hbar^3 C(x, \hbar v)[v, v, v], \\ e^{\frac{i}{\hbar} \xi \cdot (\kappa(X + \frac{\hbar}{2}v) - \kappa(X - \frac{\hbar}{2}v))} &= e^{i\xi \cdot (\nabla \kappa(X)v)} (1 + \hbar^2 \xi \cdot D(X, \hbar v)[v, v, v]), \end{aligned}$$

où les fonctions C et D sont définies sur \mathbb{R}^{2d} et à valeurs dans l'ensemble des formes trilinéaires sur \mathbb{R}^d (on note $\phi[v_1, v_2, v_3]$ l'action sur le vecteur $(v_1, v_2, v_3) \in (\mathbb{R}^d)^3$ de la forme trilinéaire ϕ). De plus ces fonctions C et D sont C^∞ , bornées ainsi que leurs dérivées partielles, uniformément par-rapport à $\hbar \in]0, 1]$. On peut donc transformer K_\hbar de la façon suivante

$$K_\hbar(X, v) = (2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{i\xi \cdot (\nabla \kappa(X)v)} a(\kappa(X), \xi) J_\kappa(X) d\xi + \hbar R_\hbar(X, v),$$

avec

$$R_\hbar(X, v) = \sum_{|\alpha| \leq 3} \int e^{i\xi \cdot (\nabla \kappa(X)v)} \Theta_{\alpha, \hbar}(X, \xi, \hbar v) v^\alpha d\xi$$

où les fonctions $\Theta_{\alpha, \hbar}$ sont C^∞ et à support compact en ξ , et pour tout $\beta \in \mathbb{N}^d$, $\partial_\xi^\beta \Theta_{\alpha, \hbar}$ est bornée uniformément par-rapport à $\hbar \in]0, 1]$. On utilise alors une intégrations par parties en v pour écrire

$$K_\hbar(X, v) = (2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{i{}^t \nabla \kappa(X) \xi \cdot v} a(\kappa(X), \xi) J_\kappa(X) d\xi + \hbar R_\hbar(X, v).$$

Puis, on fait le changement de variables $\xi \mapsto {}^t \nabla \kappa(X)^{-1} \xi$, ce qui donne

$$K_\hbar(X, v) = (2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{i\xi \cdot v} a(\kappa(X), {}^t \nabla \kappa(X)^{-1} \xi) d\xi + \hbar R_\hbar(X, v).$$

On va maintenant travailler la fonction R_\hbar en utilisant à nouveau des intégrations par parties pour transformer les puissances de v en

dérivées en ξ ; dans le pire des cas, il faut faire trois intégrations par parties successives et on obtient

$$R_{\hbar}(X, v) = \sum_{|\alpha| \leq 3} \int e^{i\xi \cdot v} (-i\nabla\kappa(X)^{-1}\partial_{\xi})^{\alpha} \Theta_{\alpha, \hbar}(X, {}^t\nabla\kappa(X)^{-1}\xi, \hbar v) J_{\kappa}(X)^{-1} d\xi$$

Les estimations énoncées sur les fonctions $\Theta_{\alpha, \hbar}$ permettent d'obtenir qu'il existe une constante $C > 0$ telle que pour tout $\hbar \in]0, 1[$,

$$\int_{\mathbb{R}^d} \sup_{X \in \mathbb{R}^d} |R_{\hbar}(X, v)| dv \leq C.$$

Par le résultat du corollaire 2.2, l'opérateur de noyau $(x, y) \mapsto \hbar^{-d} R_{\hbar}(\frac{1}{2}(x+y), \frac{1}{\hbar}(x-y))$ est donc uniformément borné sur $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$. Par ailleurs, au vu des équations (34) et (35), on en déduit

$$k_{\hbar}(x, y) = \tilde{k}_{\hbar}(x, y) + \hbar^{-d+1} R_{\hbar}(\frac{1}{2}(x+y), \frac{1}{\hbar}(x-y))$$

avec

$$\tilde{k}_{\hbar}(x, y) = (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x-y)} a(\kappa(\frac{1}{2}(x+y)), {}^t\nabla\kappa(\frac{1}{2}(x+y))^{-1}\xi) d\xi.$$

Les opérateurs de noyau $k_{\hbar}(x, y)$ et $\tilde{k}_{\hbar}(x, y)$ sont donc égaux à $O(\hbar)$ près dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$. Or la fonction $\tilde{k}_{\hbar}(x, y)$ est le noyau de l'opérateur $\text{Op}_{\hbar}(a_{\kappa})$. Les opérateurs $\kappa^* \text{Op}_{\hbar}(a) \kappa_*$ et $\text{Op}_{\hbar}(a_{\kappa})$ diffèrent donc de $O(\hbar)$ dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$. \square

5.2. Opérateurs pseudo-différentiels sur une variété et nature géométrique de l'espace des phases

Le résultat de la section 5.1 va permettre de définir les opérateurs pseudo-différentiels sur une variété M . Rappelons que lorsque M est une sous variété de \mathbb{R}^d , il existe une famille d'homéomorphismes \mathcal{G} dont les éléments γ envoient des ouverts U_{γ} de M sur des ouverts V_{γ} de \mathbb{R}^d avec les deux propriétés suivantes :

(1) Les ouverts U_{γ} recouvrent M , $M = \bigcup_{\gamma \in \mathcal{G}} U_{\gamma}$,

(2) Les recouvrements sont réguliers : si $\gamma_1, \gamma_2 \in \mathcal{G}$, alors $\gamma_2 \circ \gamma_1^{-1}$ est une application C^{∞} de $\gamma_1(U_{\gamma_1} \cap U_{\gamma_2})$ dans $\gamma_2(U_{\gamma_1} \cap U_{\gamma_2})$.

On appelle la famille $\{(\gamma, U_{\gamma}), \gamma \in \mathcal{G}\}$ un atlas pour M et on dit que l'élément U_{γ} est une carte locale de M .

Ce sont ces cartes locales qui permettent de définir des fonctions C^∞ sur la variété M . Une fonction f de M dans \mathbb{R}^k , $k \in \mathbb{N}$, est dite C^∞ si pour tout $\gamma \in \mathcal{G}$, la fonction $f|_{U_\gamma} \circ \gamma^{-1}$ est une fonction C^∞ de V_γ dans \mathbb{R}^k .

Nous allons définir deux fibrés vectoriels au-dessus de M : le fibré tangent à M que l'on note TM et le fibré cotangent à M que l'on note T^*M . Le fibré TM est la collection des espaces tangents $T_x M$ aux points $x \in M$ et le fibré T^*M est la collection des espaces $T_x^* M$ qui sont les espaces duaux des espaces $T_x M$, c'est-à-dire les espaces des formes linéaires sur $T_x M$.

Si κ est un C^1 difféomorphisme local de M , il induit une application $T\kappa$ de TM dans lui-même et une application $T^*\kappa$ de T^*M dans lui-même définies comme suit : notons z les éléments de $T_x M$ et ξ ceux de $T_x^* M$, on a

$$T_x \kappa : T_x M \longrightarrow T_{\kappa(x)} M, \quad z \longmapsto \nabla \kappa(x) z,$$

$$\text{et} \quad T_x^* \kappa : T_x^* M \longrightarrow T_{\kappa(x)}^* M, \quad \xi \longmapsto {}^t \nabla \kappa(x)^{-1} \xi.$$

On remarque que l'on a

$$\forall z \in T_x M, \quad T_x^* \kappa(\xi)(T_x \kappa(z)) = \xi(z).$$

Ces notions sont triviales lorsque $M = \mathbb{R}^d$ mais il est intéressant de remarquer que les règles de transformation du symbole d'un opérateur pseudo-différentiel par changement de variable énoncées en (33) dans la proposition 5.1 montrent que le symbole définit une fonction de l'espace cotangent de \mathbb{R}^d . C'est cette remarque fondamentale qui permet de définir les opérateurs pseudo-différentiels sur M en prenant pour ensemble de symboles des fonctions à support compact dans T^*M . En utilisant les cartes locales, on transporte sur la variété M la notion d'opérateur pseudo-différentiel définie sur \mathbb{R}^d . La règle de transformation par changement de variable permet alors de recoller les définitions à l'intersection de deux cartes au premier ordre en \hbar . Ces opérateurs sont donc définis modulo des restes de taille $O(\hbar)$.

Il faut noter que les résultats de calcul symbolique (adjoint, composition), ainsi que ceux concernant le calcul fonctionnel restent valables dans le cadre du calcul pseudo-différentiel semi-classique sur

une variété. Il en est de même pour le théorème d'Egorov (théorème 4.2) et ce résultat sera utilisé dans le texte de Nalini Anantharaman (ce volume). Néanmoins, la dépendance temporelle du reste dans le théorème d'Egorov peut différer du cas euclidien et est fortement reliée à la structure géométrique de la variété M ; il peut par exemple être exponentiellement grand, en $O(\hbar e^{\lambda t})$ pour un certain $\lambda > 0$.

Nous terminons ce paragraphe par une remarque sur la structure géométrique de l'espace des phases. Il est usuel de munir l'espace cotangent $T^*\mathbb{R}^d$ d'une structure d'espace symplectique par la 2-forme

$$\omega = d\xi \wedge dx = \sum_{1 \leq i \leq d} d\xi_i \wedge dx_i.$$

Une bonne transformation de l'espace des phases est une transformation qui préserve cette structure symplectique. De telles transformations sont appelées transformations symplectiques ou encore transformations canoniques. On peut vérifier que l'application $T^*\kappa$ définie par (voir équation (33))

$$T^*\kappa : (x, \xi) \mapsto (\kappa(x), {}^t\nabla\kappa(x)^{-1}\xi)$$

est une transformation canonique. Il en est de même pour l'application

$$(x, \xi) \mapsto \phi_t(x, \xi)$$

définie en (24) du paragraphe 3.3 donnée par le flot hamiltonien associé au symbole de l'opérateur de Schrödinger.

6. Opérateurs pseudo-différentiels sur le tore

Dans ce dernier paragraphe, nous allons définir les opérateurs pseudo-différentiels sur le tore et décrire des propriétés de ces opérateurs qui sont utilisées dans le texte de Nalini Anantharaman (ce volume).

6.1. Définition

Rappelons que le tore en dimension d est le groupe \mathbb{T}^d défini comme le quotient

$$\mathbb{T}^d = \mathbb{R}^d \setminus (2\pi\mathbb{Z})^d,$$

c'est-à-dire l'ensemble des classes d'équivalence pour la relation : $x \mathcal{R} y$ si et seulement si $x - y \in (2\pi\mathbb{Z})^d$, muni de la loi induite par l'addition sur \mathbb{R}^d . Il existe donc une projection naturelle (qui est un morphisme de groupe)

$$\pi : \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{T}^d$$

qui associe à tout réel sa classe d'équivalence dans le tore \mathbb{T}^d .

À une fonction f définie sur le tore \mathbb{T}^d , on associe la fonction $f \circ \pi$ qui est une fonction $(2\pi\mathbb{Z})^d$ -périodique sur \mathbb{R}^d . Réciproquement, une fonction $(2\pi\mathbb{Z})^d$ périodique sur \mathbb{R}^d définit naturellement une fonction sur le tore \mathbb{T}^d . L'ensemble des fonctions sur \mathbb{T}^d est donc en bijection avec l'ensemble des fonctions $(2\pi\mathbb{Z})^d$ -périodiques sur \mathbb{R}^d . Dans la suite nous utiliserons cette bijection et identifierons les fonctions sur \mathbb{T}^d avec les fonctions $(2\pi\mathbb{Z})^d$ -périodiques.

Considérons maintenant un observable a , c'est-à-dire une fonction sur l'espace cotangent du tore $T^*\mathbb{T}^d = \mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d$ et notons encore une fois $k_{\hbar}(x, y)$ la fonction définie pour $x, y \in \mathbb{R}^d$ par

$$(36) \quad k_{\hbar}(x, y) = (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} a\left(\frac{1}{2}(x + y), \xi\right) e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x - y)} d\xi.$$

Remarquons que la fonction a étant à support compact en ξ et du fait de l'identification ci-dessus, la fonction k_{\hbar} est bien définie et vérifie

$$(37) \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^d, \quad \forall n \in (2\pi\mathbb{Z})^d, \quad k_{\hbar}(x, y) = k_{\hbar}(x + n, y + n).$$

On définit alors l'opérateur pseudo-différentiel de symbole a par son action sur les fonctions $f \in C^0(\mathbb{T}^d)$ par la même formule que dans le cas euclidien :

$$(38) \quad \text{Op}_{\hbar}(a)f(x) = \int_{\mathbb{R}^d} k_{\hbar}(x, y)f(y)dy,$$

où, là aussi, on a utilisé l'identification des fonctions sur le tore \mathbb{T}^d aux fonctions de \mathbb{R}^d qui sont 2π -périodiques. Remarquons que pour tout $x \in \mathbb{R}^d$, la fonction $y \mapsto k_{\hbar}(x, y)$ est une fonction continue à décroissance rapide en y ; par conséquent, la formule (38) définit bien un réel pour toute fonction f localement intégrable et bornée, ce qui est le cas en particulier si f est continue et 2π -périodique. La proposition suivante nous montre que l'opérateur $\text{Op}_{\hbar}(a)$ envoie une fonction sur le tore en une fonction sur le tore et permet ainsi de définir le calcul pseudo-différentiel sur le tore.

Proposition 6.1. Soit $f \in C^0(\mathbb{T}^d)$ et $a \in C_0^\infty(\mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d)$, la fonction $x \mapsto \text{Op}_\hbar(a)f(x)$ est une fonction $(2\pi\mathbb{Z})^d$ -périodique que l'on peut donc identifier à une fonction sur le tore \mathbb{T}^d .

Démonstration. Soit $x \in \mathbb{R}^d$ et $n \in (2\pi\mathbb{Z})^d$, on a

$$\text{Op}_\hbar(a)f(x+n) = \int_{\mathbb{R}^d} k_\hbar(x+n, y)f(y)dy.$$

Mais, comme la fonction k_\hbar vérifie (37), le changement de variable $y \mapsto y+n$ donne

$$\begin{aligned} \text{Op}_\hbar(a)f(x+n) &= \int_{\mathbb{R}^d} k_\hbar(x+n, y+n)f(y+n)dy \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} k_\hbar(x, y)f(y+n)dy \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} k_\hbar(x, y)f(y)dy = \text{Op}_\hbar(a)f(x) \end{aligned}$$

puisque la fonction f est elle aussi $(2\pi\mathbb{Z})^d$ -périodique. \square

Remarque 6.2. On peut aussi décrire l'action de $\text{Op}_\hbar(a)$ avec un noyau défini sur $\mathbb{T}^d \times \mathbb{T}^d$:

$$\forall x \in \mathbb{T}^d, \quad \text{Op}_\hbar(a)f(x) = \int_{\mathbb{T}^d} \left(\sum_{n \in (2\pi\mathbb{Z})^d} k_\hbar(x, y+n) \right) f(y)dy.$$

Démonstration. En effet, on va décomposer l'espace \mathbb{R}^d en l'union disjointe d'hypercubes $(C_n)_{n \in \mathbb{Z}^d}$, où pour $n \in (2\pi\mathbb{Z})^d$, on pose

$$C_n = 2\pi n + \mathbb{T}^d.$$

On écrit alors

$$\begin{aligned} \text{Op}_\hbar(a)f(x) &= \sum_{n \in 2\pi\mathbb{Z}^d} \int_{C_n} k_\hbar(x, y)f(y)dy \\ &= \sum_{n \in 2\pi\mathbb{Z}^d} \int_{\mathbb{T}^d} k_\hbar(x, y+n)f(y+n)dy \\ &= \int_{\mathbb{T}^d} \left(\sum_{n \in 2\pi\mathbb{Z}^d} k_\hbar(x, y+n) \right) f(y)dy, \end{aligned}$$

où l'on a fait le changement de variable $y \mapsto y+n$ et utilisé la périodicité de f . \square

Il peut être éclairant de voir le lien entre les opérateurs ainsi définis et l'analyse en coefficients de Fourier que l'on fait classiquement sur le tore. Pour $f \in L^2(\mathbb{T}^d)$, l'analyse de Fourier permet d'écrire

$$f(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \widehat{f}(k) e^{ik \cdot x} \quad \text{avec} \quad \widehat{f}(k) = (2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{T}^d} f(x) e^{-ik \cdot x} dx.$$

Rappelons la formule de Plancherel et ses conséquences sur le produit scalaire

$$\|f\|_{L^2(\mathbb{T}^d)}^2 = (2\pi)^d \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \|\widehat{f}(k)\|^2, \quad \langle f, g \rangle = (2\pi)^d \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \overline{\widehat{f}(k)} \widehat{g}(k).$$

Proposition 6.3. Soit $a \in C_0^\infty(\mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d)$ et

$$\widehat{a}_k(\xi) = (2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{T}^d} a(x, \xi) e^{-ik \cdot x} dx.$$

Alors pour tout $f \in \mathcal{S}(\mathbb{T}^d)$,

$$(39) \quad \text{Op}_{\hbar}(a)f(x) = \sum_{k, j \in \mathbb{Z}^d} \widehat{a}_{k-j}(\tfrac{1}{2}\hbar(k+j)) \widehat{f}(j) e^{ik \cdot x}.$$

Démonstration. On part de l'équation (38) dans laquelle on injecte la formule (36), ce qui donne

$$\text{Op}_{\hbar}(a)f(x) = (2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} a(\tfrac{1}{2}(x+y), \hbar\xi) e^{i\xi \cdot (x-y)} f(y) dy d\xi,$$

où l'on a fait le changement de variable $\xi \mapsto \hbar\xi$. On fait ensuite apparaître les coefficients de Fourier dans l'expression de $\text{Op}_{\hbar}(a)f(x)$, en utilisant les formules :

$$f(y) = \sum_{j \in \mathbb{Z}^d} \widehat{f}(j) e^{ij \cdot y} \quad \text{et} \quad a(x, \xi) = \sum_{\ell \in \mathbb{Z}^d} \widehat{a}_\ell(\xi) e^{i\ell \cdot x}.$$

On a donc

$$\text{Op}_{\hbar}(a)f(x) = (2\pi)^{-d} \sum_{j, \ell \in \mathbb{Z}^d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \widehat{f}(j) \widehat{a}_\ell(\hbar\xi) e^{i\xi \cdot (x-y) + ij \cdot y + i\ell \cdot (x+y)/2} dy d\xi.$$

Une intégration en y fait apparaître la masse de Dirac $\delta(\xi - j - \ell/2)$. On obtient

$$\text{Op}_{\hbar}(a)f(x) = \sum_{j, \ell \in \mathbb{Z}^d} \widehat{f}(j) \widehat{a}_\ell(\hbar(j + \ell/2)) e^{ix \cdot (j + \ell)}.$$

Le changement d'indice $k = j + \ell$ donne $j + \ell/2 = (j + k)/2$ et permet d'écrire

$$\text{Op}_{\hbar}(a)f(x) = \sum_{k,j \in \mathbb{Z}^d} \widehat{f}(j) \widehat{a}_{k-j}(\tfrac{1}{2}\hbar(k+j)) e^{ix \cdot k}. \quad \square$$

La formule (39) est à rapprocher de celles obtenues en utilisant la formule d'inversion de Fourier pour exprimer les opérateurs de multiplication en position et en impulsion : soit $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{T}^d)$ et $\Phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$, pour $f \in L^2(\mathbb{T}^d)$, on a

$$\varphi(x)f(x) = \sum_{j,k \in \mathbb{Z}^d} \widehat{\varphi}(k-j) \widehat{f}(j) e^{ik \cdot x}.$$

On remarque que $\text{Op}_{\hbar}(\varphi(x))$ est bien l'opérateur de multiplication par φ . Par ailleurs, on a

$$\Phi(\hbar D)f(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \Phi(\hbar k) \widehat{f}(k) e^{ik \cdot x},$$

ce qui s'écrit aussi

$$\begin{aligned} \Phi(\hbar D)f(x) &= \sum_{j,k \in \mathbb{Z}^d} \Phi(\hbar k) \delta_{k-j} \widehat{f}(j) e^{ik \cdot x} \\ &= \sum_{j,k \in \mathbb{Z}^d} \Phi(\hbar j) \delta_{k-j} \widehat{f}(j) e^{ik \cdot x} \\ &= \sum_{j,k \in \mathbb{Z}^d} \Phi(\tfrac{1}{2}\hbar(k+j)) \delta_{k-j} \widehat{f}(j) e^{ik \cdot x}, \end{aligned}$$

de sorte que

$$\text{Op}_{\hbar}(\Phi(\xi)) = \Phi(\hbar D).$$

La formule (39) fait jouer des rôles symétriques à j et k . Remarquons qu'il s'agit bien de la quantification de Weyl : si a est à valeurs réelles, l'opérateur $\text{Op}_{\hbar}(a)$ est auto-adjoint du fait que $(k+j)/2$ apparaît dans la variable ξ et non k ou j .

6.2. Caractère borné sur $L^2(\mathbb{T}^d)$

On peut utiliser la formule (39) pour démontrer que l'opérateur $\text{Op}_{\hbar}(a)$ est uniformément borné sur $L^2(\mathbb{T}^d)$. On se ramène grâce à la formule de Plancherel à un résultat sur l'espace $\ell^2(\mathbb{Z})$ des suites de $\mathbb{C}^{\mathbb{Z}}$ de carré sommable et on utilise une version discrète du lemme de Schur (lemme 2.1).

Lemme 6.4. Soit P un opérateur défini sur $\mathbb{C}^{\mathbb{Z}}$ par

$$(40) \quad \forall u = (u_n)_{n \in \mathbb{Z}}, \quad (Pu)_n = \sum_{\ell \in \mathbb{Z}} A_{n,\ell} u_\ell.$$

On suppose qu'il existe une constante $C > 0$ telle que la famille $(A_{n,\ell})_{(n,\ell) \in \mathbb{Z}^2}$ vérifie

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} \sup_{\ell \in \mathbb{Z}} |A_{n,\ell}| < C \quad \text{et} \quad \sum_{\ell \in \mathbb{Z}} \sup_{n \in \mathbb{Z}} |A_{n,\ell}| < C.$$

Alors P est un opérateur borné sur $\ell^2(\mathbb{Z})$ et $\|P\|_{\mathcal{L}(\ell^2(\mathbb{Z}))} \leq C$.

Ce lemme se démontre de la même manière que le lemme de Schur sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ et nous laissons sa preuve en exercice. On l'utilise en remarquant que la formule de Plancherel permet de ramener l'étude de $\text{Op}_{\hbar}(a)$ sur $L^2(\mathbb{T}^d)$ à l'étude sur $\ell^2(\mathbb{Z})$ de l'opérateur P défini par (40) avec

$$A_{n,\ell} = \widehat{a}_{n-\ell} \left(\hbar \frac{n+\ell}{2} \right), \quad (n,\ell) \in \mathbb{Z}^2.$$

On peut alors appliquer le lemme de Schur et on obtient la proposition suivante.

Proposition 6.5. Soit $a \in C_0^\infty(\mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d)$, et C la constante strictement positive définie par

$$C = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \sup_{\xi \in \mathbb{R}^d} |\widehat{a}_k(\xi)|.$$

On a

$$\forall \hbar \in \mathbb{R}_+^*, \quad \|\text{Op}_{\hbar}(a)\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{T}^d))} \leq C.$$

La famille d'opérateur $(\text{Op}_{\hbar}(a))_{\hbar > 0}$ est donc une famille uniformément bornée de $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{T}^d))$.

6.3. Propriétés

Les opérateurs pseudo-différentiels sur le tore jouissent des mêmes propriétés que ceux que nous avons définis sur \mathbb{R}^d : caractère borné sur $L^2(\mathbb{T}^d)$, calcul symbolique, rôle prédominant de la diagonale dans le noyau. En revanche, la formule donnant la norme Hilbert-Schmidt comme l'intégrale du module au carré du symbole est un peu différente du cas euclidien.

Proposition 6.6. Soit $a \in C_0^\infty(\mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d)$, alors

$$(41) \quad \|\text{Op}_{\hbar}(a)\|_{\text{HS}} \sim_{\hbar \rightarrow 0} (2\pi\hbar)^{-d/2} \|a\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}.$$

Il faut comparer ce résultat à celui de la proposition 3.1 dans le cas euclidien. En effet, pour un opérateur pseudo-différentiel sur \mathbb{R}^d , la relation (41) est une égalité alors que sur \mathbb{T}^d , on a seulement un équivalent.

Démonstration. On utilise la base hilbertienne de \mathbb{T}^d donnée par les fonctions $(e_k)_{k \in \mathbb{Z}^d}$,

$$e_k(x) = (2\pi)^{-d/2} e^{ik \cdot x}, \quad k \in \mathbb{Z}^d.$$

La formule de Plancherel donne

$$\|\text{Op}_{\hbar}(a)e_n\|_{L^2(\mathbb{T}^d)}^2 = \sum_{n \in \mathbb{Z}^d} |\widehat{a}_{k-n}(\hbar k + n/2)|^2.$$

On en déduit

$$\|\text{Op}_{\hbar}(a)\|_{\text{HS}}^2 = \sum_{n, p \in \mathbb{Z}^d} |\widehat{a}_p(\hbar(n + p/2))|^2.$$

Par définition des sommes de Riemann,

$$\sum_{n, p \in \mathbb{Z}^d} |\widehat{a}_p(\hbar(n + p/2))|^2 \sim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar^{-d} \sum_{p \in \mathbb{Z}^d} \int_{\mathbb{R}^d} |\widehat{a}_p(\xi)|^2 d\xi.$$

On a donc

$$\|\text{Op}_{\hbar}(a)\|_{\text{HS}}^2 \sim_{\hbar \rightarrow 0} (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d} |a(x, \xi)|^2 dx d\xi,$$

où l'on a utilisé encore une fois la formule de Plancherel,

$$\forall \xi \in \mathbb{R}^d, \quad (2\pi)^d \sum_{p \in \mathbb{Z}^d} \widehat{a}_p(\xi) = \int_{\mathbb{T}^d} |a(x, \xi)|^2 dx. \quad \square$$

Références

- [AG91] S. ALINHAC & P. GÉRARD – *Opérateurs pseudo-différentiels et théorème de Nash-Moser*, Savoirs Actuels, InterEditions, Paris; Éditions du Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS), 1991.
- [AM14] N. ANANTHARAMAN & F. MACIÀ – « Semiclassical measures for the Schrödinger equation on the torus », *J. Eur. Math. Soc. (JEMS)* **16** (2014), no. 6, p. 1253–1288.
- [BFKG12] H. BAHOURI, C. FERMANIAN-KAMMERER & I. GALLAGHER – *Phase-space analysis and pseudodifferential calculus on the Heisenberg group*, Astérisque, vol. 342, Société Mathématique de France, 2012.
- [BO27] M. BORN & R. OPPENHEIMER – « Zur Quantentheorie der Molekeln », *Ann. der Phys. (4)* **84** (1927), p. 457–484.
- [CV71] A.-P. CALDERÓN & R. VAILLANCOURT – « On the boundedness of pseudo-differential operators », *J. Math. Soc. Japan* **23** (1971), p. 374–378.
- [Dav95] E. B. DAVIES – *Spectral theory and differential operators*, Cambridge Studies in Advanced Mathematics, vol. 42, Cambridge University Press, Cambridge, 1995.

- [DS99] M. DIMASSI & J. SJÖSTRAND – *Spectral asymptotics in the semi-classical limit*, London Mathematical Society Lecture Note Series, vol. 268, Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- [FL12] C. FERMANIAN KAMMERER & C. LASSER – « Single switch surface hopping for molecular quantum dynamics », *J. Math. Chem.* **50** (2012), no. 3, p. 620–635 (English).
- [FR12] V. FISCHER & M. RUZHANSKY – « A pseudo-differential calculus on graded Lie groups », arXiv:1209.262, 2012.
- [GL93] P. GÉRARD & É. LEICHTNAM – « Ergodic properties of eigenfunctions for the Dirichlet problem », *Duke Math. J.* **71** (1993), no. 2, p. 559–607.
- [GMMP97] P. GÉRARD, P. A. MARKOWICH, N. J. MAUSER & F. POUPAUD – « Homogenization limits and Wigner transforms », *Comm. Pure Appl. Math.* **50** (1997), no. 4, p. 323–379.
- [Hel] B. HELFFER – « 30 ans d'analyse semi-classique, bibliographie commentée », <http://www.math.u-psud.fr/~helffer/histoire2003.ps>.
- [HS89] B. HELFFER & J. SJÖSTRAND – « Équation de Schrödinger avec champ magnétique et équation de Harper », in *Schrödinger operators (Sønderborg, 1988)*, Lecture Notes in Phys., vol. 345, Springer, Berlin, 1989, p. 118–197.
- [Hör79] L. HÖRMANDER – « The Weyl calculus of pseudodifferential operators », *Comm. Pure Appl. Math.* **32** (1979), no. 3, p. 360–444.
- [Hwa87] I. L. HWANG – « The L_{sp^2} -boundedness of pseudodifferential operators », *Trans. Amer. Math. Soc.* **302** (1987), no. 1, p. 55–76.
- [Las12] C. LASSER – « Corrections to Wigner type phase space methods », arXiv:1403.2839, 2012.
- [LR10] C. LASSER & S. RÖBLITZ – « Computing expectation values for molecular quantum dynamics », *SIAM J. Sci. Comput.* **32** (2010), no. 3, p. 1465–1483.
- [Ler10] N. LERNER – *Metrics on the phase space and non-selfadjoint pseudo-differential operators*, Pseudo-Differential Operators. Theory and Applications, vol. 3, Birkhäuser Verlag, Basel, 2010.
- [LP93] P.-L. LIONS & T. PAUL – « Sur les mesures de Wigner », *Rev. Mat. Iberoamericana* **9** (1993), no. 3, p. 553–618.
- [RT07] M. RUZHANSKY & V. TURUNEN – « On the Fourier analysis of operators on the torus », in *Modern trends in pseudo-differential operators*, Oper. Theory Adv. Appl., vol. 172, Birkhäuser, Basel, 2007, p. 87–105.
- [Shu87] M. A. SHUBIN – *Pseudodifferential operators and spectral theory*, Springer Series in Soviet Mathematics, Springer-Verlag, Berlin, 1987, en russe : 1978.
- [Vor77] A. VOROS – « Développements semi-classiques », thèse d'état, 1977.
- [Wey27] H. WEYL – « Quantenmechanik und Gruppentheorie », *Zeitschrift für Physik* **46** (1927), p. 1–46.
- [Wig32] E. P. WIGNER – « On the quantum correction for thermodynamic equilibrium », *Phys. Rev., II. Ser.* **40** (1932), p. 749–759.
- [Wig59] ———, *Group theory and its application to the quantum mechanics of atomic spectra*, Pure and Applied Physics, vol. 5, Academic Press, New York-London, 1959.
- [Zwo12] M. ZWORSKI – *Semiclassical analysis*, Graduate Studies in Mathematics, vol. 138, American Mathematical Society, Providence, RI, 2012.

LE THÉORÈME D'ERGODICITÉ QUANTIQUE

par

Nalini Anantharaman

En mécanique quantique, la fonction d'onde $\psi_t(x)$ permet de calculer la densité de probabilité de présence $|\psi_t(x)|^2$ d'une particule au point $x \in \mathbb{R}^3$, à l'instant t . Celle-ci évolue selon l'équation de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathbf{H}\psi,$$

où \mathbf{H} est l'opérateur hamiltonien, donné (selon Schrödinger et Heisenberg) par l'expression

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(x)$$

si la particule, de masse m , est soumise à une force dérivant d'un potentiel V . La notation Δ désigne le laplacien, et \hbar est la constante de Planck. L'énergie *classique* du système admet l'expression *énergie cinétique* + *énergie potentielle* :

$$H(x, \xi) = \frac{\|\xi\|^2}{2m} + V(x)$$

si $\xi \in \mathbb{R}^3$ est la quantité de mouvement. L'opérateur \mathbf{H} se déduit de la fonction H par les procédés de quantification introduits dans les textes de F. Faure et C. Fermanian (ce volume). La fonction d'onde au temps t s'exprime donc grâce à la fonction d'onde au temps 0,

$$\psi_t = e^{-it\mathbf{H}/\hbar} \psi_0$$

(il s'agit ici de l'exponentielle d'un opérateur non borné : cette exponentielle n'est pas définie par une série entière, mais en « diagonalisant » \mathbf{H} à condition qu'il soit auto-adjoint). Les fonctions propres

de \mathbf{H} , c'est-à-dire les solutions de

$$\mathbf{H}\psi_0 = E\psi_0$$

avec $E \in \mathbb{R}$, jouent un rôle particulier : si ψ_0 est fonction propre de \mathbf{H} , on a

$$\psi_t(x) = e^{-itE/\hbar}\psi_0(x),$$

et la probabilité de présence $|\psi_t(x)|^2$ ne dépend pas du temps. Si l'on peut trouver une base hilbertienne $(\phi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de l'espace de Hilbert des fonctions de carré intégrable $L^2(\mathbb{R}^3)$, formée de fonctions propres de \mathbf{H} (pour les valeurs propres $(E_n)_{n \in \mathbb{N}}$), toute donnée initiale se décompose alors selon cette base en une série convergente dans $L^2(\mathbb{R}^3)$:

$$\psi_0(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} \left(\int_{\mathbb{R}^3} \overline{\phi_n} \psi_0 \right) \phi_n(x),$$

et donc

$$\psi_t(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} \left(\int_{\mathbb{R}^3} \overline{\phi_n} \psi_0 \right) e^{-itE_n/\hbar} \phi_n(x).$$

Les différences de valeurs propres, $E_n - E_m$, jouent un rôle très important en physique, car elles sont liées aux énergies que le système peut absorber ou émettre lors d'interactions avec la lumière. Dans ce texte, nous ne parlerons pas beaucoup des valeurs propres elles-mêmes : les conjectures les concernant sont loin d'être démontrées mathématiquement (voir le § 3.2 du texte de F. Faure dans ce volume). Nous essaierons de comprendre les probabilités de présence $|\phi_n(x)|^2$ associées aux fonctions propres ϕ_n . L'étude mathématique est assez différente, selon que la particule reste confinée dans une région bornée de l'espace (*système fermé*) ou qu'elle peut s'échapper à l'infini (*système ouvert*). Ceci dépend des propriétés, confinantes ou non, du potentiel V (essentiellement, V est confinante si $V(x) \rightarrow +\infty$ quand $\|x\| \rightarrow +\infty$).

Ici nous ne nous intéresserons qu'au cas des systèmes fermés, et nous essaierons de comprendre comment la géométrie du problème joue sur les probabilités de présence $|\phi_n(x)|^2$. Nous regarderons des cas où il n'y a pas de potentiel ($V = 0$, donc \mathbf{H} est un multiple du laplacien Δ) mais où la particule est astreinte à se déplacer dans un espace compact, généralement une variété. Ceci n'est qu'un léger changement de point de vue (en effet, notre discussion pourrait

s'adapter à des potentiels confinants sur \mathbb{R}^3) qui permet d'aborder des exemples géométriques de base : tores plats, sphère. Notre but principal est de démontrer le théorème d'ergodicité quantique : celui-ci fait le lien entre les propriétés du hamiltonien classique H et celles des fonctions propres de H . L'hypothèse cruciale de ce théorème est l'ergodicité du système hamiltonien classique, ce qui signifie que les trajectoires visitent de manière uniforme leur couche d'énergie. Si le système hamiltonien classique est ergodique, le théorème dit que les fonctions propres quantiques ont tendance à être délocalisées : $|\phi_n(x)|^2$ est proche de la probabilité uniforme.

On donnera la preuve complète du théorème d'ergodicité quantique dans le cas des tores plats. Attention, l'hypothèse d'ergodicité n'est pas satisfaite dans ce cas ! On démontrera donc une version modifiée du théorème, valable seulement pour des observables de position $a(x)$. Ceci nous permettra d'avoir une preuve qui n'utilise pas de notions sur les variétés. À titre de comparaison, on décrira ensuite les fonctions propres de Δ sur la sphère. On verra, de manière pas très étonnante, qu'il y a des fonctions propres telles que $|\phi_n(x)|^2$ se concentre au voisinage de l'équateur (et donc la probabilité de présence n'est pas du tout uniforme). Enfin, on abordera le théorème d'ergodicité quantique sur les variétés. On ne rentrera pas dans les détails, mais on dira comment adapter la preuve donnée sur le tore. L'énoncé général concerne des observables $a(x, \xi)$ dépendant à la fois de x (position) et de ξ (quantité de mouvement, impulsion).

En conclusion, on évoque brièvement des recherches récentes sur le sujet, en particulier les travaux d'Elon Lindenstrauss [Lin06], médaillé Fields 2010.

1. Une version du théorème d'ergodicité quantique pour les tores plats

1.1. Laplacien et fonctions propres sur un tore plat

Dans toute cette section \mathbb{R}^d sera muni de sa structure euclidienne usuelle $(x, y) \mapsto x \cdot y$, pour laquelle la base canonique est orthonormée, de la norme $\|\cdot\|$ associée, et de la distance d associée.

On appelle réseau de \mathbb{R}^d un sous-groupe Λ de $(\mathbb{R}^d, +)$, discret pour la topologie induite, et tel que le \mathbb{R} -espace vectoriel engendré $\text{Vect}(\Lambda)$

soit égal à \mathbb{R}^d . Si Λ est un réseau, considérons l'espace quotient \mathbb{R}^d/Λ pour la relation d'équivalence ($x' \sim y' \iff x' - y' \in \Lambda$). Il peut-être muni de la topologie quotient, définie par la distance

$$d_\Lambda(x, y) = \min\{d(x', y') \mid x' \text{ représentant de } x, y' \text{ représentant de } y\}.$$

Cet espace est compact. En fait, si l'on considère une *base* (e_1, \dots, e_d) de Λ , de sorte que $\Lambda = \mathbb{Z}e_1 \oplus \dots \oplus \mathbb{Z}e_d$, l'application

$$\begin{aligned} [0, 1]^d &\longrightarrow \mathbb{R}^d/\Lambda \\ (y_1, \dots, y_d) &\longmapsto y_1e_1 + \dots + y_de_d \end{aligned}$$

est une surjection continue (et c'est une bijection en restriction à $[0, 1]^d$). L'espace \mathbb{R}^d/Λ , qui est homéomorphe à un parallélépipède $[0, 1]^d$ dont on recolle les côtés par translation, s'appelle un tore. Si on le munit de la structure riemannienne héritée de la structure euclidienne de \mathbb{R}^d , ce tore a une courbure nulle, d'où l'appellation *tore plat*.

Soit

$$p : \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}^d/\Lambda$$

la projection canonique. Si f est une fonction de \mathbb{R}^d/Λ dans \mathbb{C} , remarquons que $F = f \circ p$ est une fonction sur \mathbb{R}^d qui vérifie

$$F(x + \lambda) = F(x)$$

pour tout $\lambda \in \Lambda$: autrement dit F est Λ -périodique. Inversement, si F est Λ -périodique elle s'écrit $F = f \circ p$ pour une unique fonction $f : \mathbb{R}^d/\Lambda \rightarrow \mathbb{R}$. Ainsi, on peut identifier les fonctions sur \mathbb{R}^d/Λ aux fonctions Λ -périodiques sur \mathbb{R}^d . Par définition de la topologie quotient, f est continue si et seulement si F l'est. Nous dirons que f est de classe C^k sur \mathbb{R}^d/Λ si F est de classe C^k sur \mathbb{R}^d .

Sur \mathbb{R}^d , le laplacien est l'opérateur qui s'exprime par la formule

$$\Delta_{\mathbb{R}^d} = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial x_d^2}$$

dans les coordonnées de la base canonique. Si A est une transformation affine de \mathbb{R}^d , de partie linéaire L , et si F est une fonction de classe C^2 sur \mathbb{R}^d , on a la formule

$$(1) \quad \Delta_{\mathbb{R}^d}(F \circ A) = \left(\sum_{ij} \ell_{ij} \frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j} \right) \circ A,$$

où ℓ est la matrice représentant $L^t L$. On voit que, si A est une isométrie affine, on a $\Delta_{\mathbb{R}^d}(F \circ A) = (\Delta_{\mathbb{R}^d} F) \circ A$, c'est-à-dire que $\Delta_{\mathbb{R}^d}$ commute avec les isométries affines.

On voit en particulier que si F est Λ -périodique et de classe C^2 sur \mathbb{R}^d , $\Delta_{\mathbb{R}^d} F$ est aussi Λ -périodique. Ceci permet de définir sans ambiguïté l'opérateur laplacien Δ_Λ sur les fonctions de classe C^2 sur le tore \mathbb{R}^d/Λ : si f est une fonction de classe C^2 sur le tore \mathbb{R}^d/Λ , on écrit $F = f \circ p$, et $\Delta_\Lambda f$ est l'unique fonction sur \mathbb{R}^d/Λ telle que $\Delta_{\mathbb{R}^d} F = (\Delta_\Lambda f) \circ p$.

Définition 1.1. Soit f une fonction de classe C^2 sur \mathbb{R}^d/Λ , à valeurs complexes, non identiquement nulle. On dira que f est une fonction propre de Δ_Λ s'il existe un nombre complexe μ tel que

$$\Delta_\Lambda f + \mu f = 0.$$

Avec ces notations, $-\mu$ est la valeur propre de Δ_Λ associée à f , on verra dans un instant la raison de cette convention de signe.

Dans la suite, pour simplifier, nous nous restreignons à $\Lambda = (2\pi\mathbb{Z})^d$ (mais tous les résultats peuvent s'étendre à des réseaux plus généraux) et on notera $\mathbb{T}^d = \mathbb{R}^d/(2\pi\mathbb{Z})^d$, et $\Delta_\Lambda = \Delta_{\mathbb{T}^d}$. Comme on l'a vu, une fonction continue sur \mathbb{T}^d n'est rien d'autre qu'une fonction continue sur \mathbb{R}^d qui est 2π -périodique en chaque variable.

Pour f continue bornée sur \mathbb{T}^d , on définit $\int_{\mathbb{T}^d} f = \int_{\mathbb{T}^d} f(x) dx$ comme étant

$$\int_{[a_1, a_1+2\pi] \times [a_2, a_2+2\pi] \times \dots \times [a_d, a_d+2\pi]} F(x) dx,$$

où $x = (x_1, \dots, x_d)$ et $dx = (2\pi)^{-d} dx_1 \cdots dx_d$ est la mesure de Lebesgue normalisée. Par périodicité de F on vérifie que cette définition est indépendante du choix des réels a_1, a_2, \dots, a_d .

En effectuant des intégrations par parties, et en utilisant la périodicité des fonctions considérées, on montre les identités suivantes :

Proposition 1.2. Si f et g sont de classe C^2 sur \mathbb{T}^d , on a

$$\int_{\mathbb{T}^d} g \Delta_{\mathbb{T}^d} f = - \int_{\mathbb{T}^d} \sum_{i=1}^d \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial g}{\partial x_i} = \int_{\mathbb{T}^d} f \Delta_{\mathbb{T}^d} g.$$

Si f et g sont à valeurs complexes, on a aussi

$$\int_{\mathbb{T}^d} \bar{g} \Delta_{\mathbb{T}^d} f = - \int_{\mathbb{T}^d} \sum_{i=1}^d \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\overline{\partial g}}{\partial x_i} = \int_{\mathbb{T}^d} f \overline{\Delta_{\mathbb{T}^d} g}.$$

En appliquant ces identités à $f = g$, on en déduit que

$$\int_{\mathbb{T}^d} \bar{f} \Delta_{\mathbb{T}^d} f \leq 0$$

pour tout f , et donc que les valeurs propres de $\Delta_{\mathbb{T}^d}$ sont des réels négatifs (c'est pourquoi on notera de préférence $-\lambda$, avec $\lambda \geq 0$, les valeurs propres). De plus, si f est fonction propre, $\text{Ré}(f)$ et $\text{Im}(f)$ le sont aussi (si elles sont non nulles). Enfin, si f et g sont des fonctions propres associées à des valeurs propres distinctes $-\mu$ et $-\lambda$, on a $\int_{\mathbb{T}^d} g \Delta_{\mathbb{T}^d} f = \int_{\mathbb{T}^d} f \Delta_{\mathbb{T}^d} g$ donc $\mu \int_{\mathbb{T}^d} f g = \lambda \int_{\mathbb{T}^d} f g$, donc

$$\int_{\mathbb{T}^d} f g = 0.$$

Tout ceci peut s'exprimer en disant que $\Delta_{\mathbb{T}^d}$ est un opérateur symétrique (non borné, de domaine $C^2(\mathbb{T}^d)$) sur l'espace de Hilbert complexe $L^2(\mathbb{T}^d)$, qui est le complété de l'espace des fonctions C^0 pour la norme issue du produit hilbertien $\langle g, f \rangle = \int_{\mathbb{T}^d} f \bar{g}$. On note $\|\cdot\|_2$ la norme associée :

$$\|f\|_2 = \left(\int_{\mathbb{T}^d} |f|^2 \right)^{1/2}.$$

Remarquons que dans le cas du tore, on peut utiliser la décomposition en séries de Fourier pour caractériser complètement les fonctions propres de $\Delta_{\mathbb{T}^d}$. Pour $k = (k_1, \dots, k_d) \in \mathbb{Z}^d$, les fonctions $e_k : x = (x_1, \dots, x_d) \mapsto e^{ik \cdot x}$ (avec $k \cdot x = k_1 x_1 + \dots + k_d x_d$) sont des fonctions propres du laplacien, on a en effet

$$\Delta_{\mathbb{T}^d} e_k = -\|k\|^2 e_k,$$

où $\|k\|^2 = k_1^2 + \dots + k_d^2$. D'après la théorie des séries de Fourier, on sait que les fonctions e_k sont linéairement indépendantes, et qu'elles forment une *base hilbertienne* de l'espace $L^2(\mathbb{T}^d)$, ce qui signifie que $\text{Vect}(e_k)_{k \in \mathbb{Z}^d}$ est dense dans $L^2(\mathbb{T}^d)$. Ceci est d'ailleurs un cas particulier du théorème de diagonalisation 3.7 énoncé plus bas.

Plus généralement, f est une fonction propre de $\Delta_{\mathbb{T}^d}$, associée à la valeur propre $-\lambda$, si et seulement si sa décomposition en séries de

Fourier est de la forme

$$(2) \quad f(x) = \sum_{\substack{k \in \mathbb{Z}^d \\ \|k\|^2 = \lambda}} c_k e^{ik \cdot x},$$

où les c_k sont les coefficients de Fourier de f . On observe donc que

- Les valeurs propres λ sont exactement les entiers positifs qui peuvent s'écrire comme sommes de d carrés;

- La multiplicité $m(\lambda)$ de la valeur propre λ , définie comme la dimension du sous-espace propre associé, est exactement le nombre de décompositions de λ comme somme de d carrés (si l'on compte toutes les décompositions, même celles qui ne diffèrent que par le signe ou par l'ordre).

Pour $d = 2$, le théorème des deux carrés (dont il existe plusieurs démonstrations, dues à Fermat, Euler, Gauss...) dit que λ est somme de deux carrés si et seulement si chacun de ses facteurs premiers de la forme $4k + 3$ intervient à une puissance paire. La multiplicité $m(\lambda)$ est une fonction non bornée de λ , mais étudier de manière fine sa dépendance en λ est une question très difficile en théorie des nombres.

C'est d'ailleurs ce qui donne un intérêt à l'étude, que nous présentons ci-dessous, des fonctions propres sur le tore : si $m(\lambda)$ était bornée, l'étude des sommes de la forme (2) n'aurait que peu d'intérêt. C'est parce que le nombre de termes dans la somme peut être arbitrairement grand qu'il y a des questions intéressantes à se poser.

1.2. Loi de Weyl

S'il est très difficile d'étudier les fluctuations de la multiplicité $m(\lambda)$, il est en revanche plus aisé de comprendre son comportement moyen : on note $N(E) = \sum_{\lambda \leq E} m(\lambda)$ le nombre de valeurs propres de $-\Delta_{\mathbb{T}^d}$ inférieures à E . C'est aussi le nombre de points à coordonnées entières $k = (k_1, \dots, k_d)$ contenus dans la boule de centre 0 et de rayon \sqrt{E} de \mathbb{R}^d . Décrivons le comportement asymptotique de $N(E)$ quand $E \rightarrow +\infty$.

On peut remarquer que

$$N(E) = \sum_{k=(k_1, \dots, k_d) \in \mathbb{Z}^d} f(k/\sqrt{E}),$$

où f est la fonction qui vaut 1 sur la boule fermée $\overline{B_{\mathbb{R}^d}(0, 1)}$ de \mathbb{R}^d , de centre 0 et de rayon 1, dont nous noterons Vol le volume, et 0

ailleurs. La fonction f étant intégrable, on a convergence des sommes de Riemann

$$\frac{1}{\sqrt{E}^d} \sum_{k=(k_1, \dots, k_d) \in \mathbb{Z}^d} f(k/\sqrt{E}) \longrightarrow \int_{\mathbb{R}^d} f = \text{Vol } \overline{B_{\mathbb{R}^d}(0, 1)}.$$

On obtient donc l'asymptotique suivante, qui est un cas particulier de la loi de Weyl qui sera énoncée plus bas :

$$(3) \quad N(E) \sim \sqrt{E}^d \text{Vol } \overline{B_{\mathbb{R}^d}(0, 1)}$$

quand $E \rightarrow +\infty$. On montre de la même manière que pour toute fonction χ Riemann intégrable sur \mathbb{R}

$$(4) \quad \sum_{k=(k_1, \dots, k_d) \in \mathbb{Z}^d} \chi(\|k\|^2/E) \sim \sqrt{E}^d \sigma_{d-1}(\mathbb{S}^{d-1}) \int_0^{+\infty} \chi(r^2) r^{d-1} dr,$$

où $\sigma_{d-1}(\mathbb{S}^{d-1})$ est la mesure $(d-1)$ -dimensionnelle totale de la sphère unité \mathbb{S}^{d-1} (voir la section concernant la sphère pour une définition plus précise).

Remarque 1.3. Voici une méthode plus savante pour démontrer le même résultat, en faisant le lien avec les résultats sur les opérateurs pseudo-différentiels démontrés par C. Fermanian (ce volume). Si χ est une fonction de classe C^∞ sur \mathbb{R} , à support compact, notons $\chi(-\Delta_{\mathbb{T}^d})$ l'opérateur défini sur $L^2(\mathbb{T}^d)$ par son action sur la base hilbertienne (e_k) :

$$\chi(-\Delta_{\mathbb{T}^d})e_k = \chi(\|k^2\|)e_k.$$

Comme conséquence de la formule d'inversion de Fourier, on a

$$\text{Op}_\hbar(\chi(\|\xi\|^2))e_k = \chi(\hbar^2\|k^2\|)e_k$$

et donc on a l'identité entre opérateurs

$$\text{Op}_\hbar(\chi(\|\xi\|^2)) = \chi(-\hbar^2\Delta_{\mathbb{T}^d}).$$

(on a utilisé la notation abusive, mais pratique, $\text{Op}_\hbar(\chi(\|\xi\|^2))$ pour désigner l'opérateur $\text{Op}_\hbar(a)$ où a est la fonction $(x, \xi) \mapsto \chi(\|\xi\|^2)$). On continuera par la suite à pratiquer ce genre d'abus de notation).

La loi de Weyl peut maintenant se démontrer ainsi : si l'on note (λ_n) les valeurs propres de $-\Delta_{\mathbb{T}^d}$, ordonnées de manière croissante et répétées avec leurs multiplicité, on utilise la définition de la norme de

Hilbert-Schmidt donnée par C. Fermanian dans son § 3.1 (ce volume), pour écrire

$$\sum_n \chi^2(\hbar^2 \lambda_n) = \|\chi(-\hbar^2 \Delta_{\mathbb{T}^d})\|_{\text{HS}}^2 = \|\text{Op}_{\hbar}(\chi(\|\xi\|^2))\|_{\text{HS}}^2$$

et on applique la proposition 6.6 du texte de C. Fermanian :

$$\begin{aligned} \|\text{Op}_{\hbar}(\chi(\|\xi\|^2))\|_{\text{HS}}^2 &\sim_{\hbar \rightarrow 0} (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d} \chi^2(\|\xi\|^2) dx d\xi \\ &\sim (2\pi\hbar)^{-d} (2\pi)^d \int_{\mathbb{R}^d} \chi^2(\|\xi\|^2) d\xi, \end{aligned}$$

ce qui est identique à la formule (4) en remplaçant χ par χ^2 et en posant $\hbar = E^{-1/2}$. L'avantage de cette preuve, plus compliquée, est qu'elle s'adapte à des situations où l'on ne connaît pas explicitement le spectre du laplacien. Le désavantage est qu'il faut supposer χ de classe C^∞ pour que les résultats prouvés par C. Fermanian s'appliquent (pour passer à des fonctions moins régulières, telles que des fonctions caractéristiques, il faut procéder par encadrements).

Il est difficile d'obtenir une estimation de l'erreur. Dans le cas présent, on peut faire le raisonnement suivant, qui ne donne cependant pas une estimation optimale de l'erreur. Restreignons-nous à la dimension $d = 2$.

Pour des raisons de symétrie, pour estimer $N(E)$ il suffit de multiplier par 4 le nombre de points de coordonnées entières dans le cadran

$$C(\sqrt{E}) = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \mid x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, \sqrt{x_1^2 + x_2^2} \leq \sqrt{E}\}.$$

Si $k = (k_1, k_2) \in \mathbb{N}^2$ est un vecteur entier dans $C(\sqrt{E})$, on note C_k le carré $[k_1, k_1 + 1) \times [k_2, k_2 + 1)$. Il est clair que

$$C(\sqrt{E}) \subset \bigcup_{k \in C(\sqrt{E}) \cap \mathbb{Z}^2} C_k,$$

l'union étant disjointe. Comme chaque carré est d'aire 1, on en déduit en comparant les aires de ces deux ensembles que

$$\text{Aire}(C(\sqrt{E})) = \frac{\pi E}{4} \leq \sum_{k \in C(\sqrt{E}) \cap \mathbb{Z}^2} 1$$

On raisonne de même dans les 4 cadrans, on somme les 4 inégalités ainsi obtenues et on obtient

$$\pi E \leq N(E) + O(\sqrt{E})$$

où l'erreur $O(\sqrt{E})$ correspond aux points qui ont été comptés plusieurs fois, c'est-à-dire ceux qui sont sur les axes de coordonnées. Par ailleurs

$$\bigcup_{k \in C(\sqrt{E}) \cap \mathbb{Z}^2} C_k \subset C(\sqrt{E} + \sqrt{2}),$$

d'où, en comparant de nouveau les aires des deux ensembles,

$$N(E) \leq \pi E + O(\sqrt{E}).$$

En fin de compte on a donc $N(E) = \pi E + O(\sqrt{E})$.

Il est en fait conjecturé que $N(E) = \pi E + O(E^{1/4+\varepsilon})$ pour tout $\varepsilon > 0$, et Huxley [Hux02] a démontré que $N(E) = \pi E + O(E^{131/416})$. Dennis Hejhal estimait en 1976 que cette conjecture était peut-être plus difficile encore que l'hypothèse de Riemann [Hej76].

1.3. Ergodicité quantique sur le tore

Nous démontrons maintenant le théorème suivant :

Théorème 1.4. *Soit $(\phi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une base hilbertienne de $L^2(\mathbb{T}^d)$ formée de fonctions propres du laplacien :*

$$\Delta_{\mathbb{T}^d} \phi_n = -\lambda_n \phi_n$$

que l'on supposera ordonnées de sorte que $\lambda_n \leq \lambda_{n+1}$. Soit $a \in C^0(\mathbb{T}^d)$.

Alors

$$\lim_{E \rightarrow +\infty} \frac{1}{N(E)} \sum_{\substack{n \\ \lambda_n \leq E}} \left| \langle \phi_n, a \phi_n \rangle - \int_{\mathbb{T}^d} a(x) dx \right|^2 = 0.$$

Remarquons que le produit scalaire $\langle \phi_n, a \phi_n \rangle$ n'est rien d'autre que $\int_{\mathbb{T}^d} a(x) |\phi_n(x)|^2 dx$.

Nous utiliserons la notation

$$\varepsilon(E) = \frac{1}{N(E) - N(E/2)} \sum_{\substack{n \\ E/2 < \lambda_n \leq E}} \left| \langle \phi_n, a \phi_n \rangle - \int_{\mathbb{T}^d} a(x) dx \right|^2.$$

D'après la loi de Weyl (3),

$$\frac{N(E)}{N(E) - N(E/2)} = O(1).$$

Le théorème implique donc que $\lim_{E \rightarrow +\infty} \varepsilon(E) = 0$. De plus, on peut écrire

$$\begin{aligned} \sqrt{\varepsilon(E)} \# \left\{ n \mid E/2 < \lambda_n \leq E, \left| \langle \phi_n, a\phi_n \rangle - \int_{\mathbb{T}^d} a(x) dx \right|^2 \geq \sqrt{\varepsilon(E)} \right\} \\ \leq \sum_{E/2 < \lambda_n \leq E} \left| \langle \phi_n, a\phi_n \rangle - \int_{\mathbb{T}^d} a(x) dx \right|^2. \end{aligned}$$

Si l'on appelle $A_E \subset \mathbb{N}$ l'ensemble

$$A_E = \left\{ n \mid E/2 < \lambda_n \leq E, \left| \langle \phi_n, a\phi_n \rangle - \int_{\mathbb{T}^d} a(x) dx \right|^2 \geq \sqrt{\varepsilon(E)} \right\},$$

on a donc, en divisant par $N(E) - N(E/2)$,

$$\frac{\sqrt{\varepsilon(E)}}{N(E) - N(E/2)} \cdot \#A_E \leq \varepsilon(E).$$

Finalement,

$$(5) \quad \#A_E \leq \sqrt{\varepsilon(E)} (N(E) - N(E/2)).$$

On a donc, en notant A_E^c le complémentaire de A_E ,

$$\left(1 - \sqrt{\varepsilon(E)}\right) (N(E) - N(E/2)) < \#A_E^c \leq N(E) - N(E/2),$$

la deuxième inégalité étant évidente, et la première découlant de (5). Prenant $E = 2^M$, on peut donc choisir une suite croissante d'entiers (n_k) telle que

$$(6) \quad \left| \langle \phi_{n_k}, a\phi_{n_k} \rangle - \int_{\mathbb{T}^d} a(x) dx \right|^2 \leq \sqrt{\varepsilon(2^M)}$$

dès que $\lambda_{n_k} \in [2^{M-1}, 2^M]$, et telle que

$$\#\{k \mid \lambda_{n_k} \in [2^{M-1}, 2^M]\} \geq \left(1 - \sqrt{\varepsilon(2^M)}\right) (N(2^M) - N(2^{M-1})),$$

ce qui signifie que la proportion des k tels que $\lambda_{n_k} \in [2^{M-1}, 2^M]$ et qui vérifient (6) tend vers 1. On voit ainsi que le théorème est équivalent à l'énoncé suivant :

Corollaire 1.5. Soit $(\phi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une base hilbertienne de $L^2(\mathbb{T}^d)$ formée de fonctions propres du laplacien :

$$\Delta_{\mathbb{T}^d} \phi_n = -\lambda_n \phi_n$$

que l'on supposera ordonnées de sorte que $\lambda_n \leq \lambda_{n+1}$. Soit $a \in C^0(\mathbb{T}^d)$. Alors il existe une suite croissante d'entiers (n_k) telle que

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \langle \phi_{n_k}, a \phi_{n_k} \rangle = \int_{\mathbb{T}^d} a(x) dx$$

et

$$\#\{k \mid \lambda_{n_k} \leq E\} \sim N(E).$$

En utilisant le fait qu'il existe une suite (dénombrable) dense dans $C^0(\mathbb{T}^d)$ et en utilisant un procédé d'extraction diagonale, on pourrait même s'arranger pour que la suite (n_k) soit indépendante de la fonction a . L'énoncé nous dit alors que les mesures $|\phi_{n_k}(x)|^2 dx$ convergent au sens faible vers la mesure de Lebesgue dx .

Ces énoncés ne rentrent pas, à strictement parler, dans le cadre du « véritable » théorème d'ergodicité quantique qui sera énoncé plus bas : en effet, le flot géodésique sur le tore, c'est-à-dire la famille d'applications

$$\phi^t : (x, \xi) \mapsto (x + t\xi, \xi)$$

(où $t \in \mathbb{R}$) n'est pas ergodique, pour la raison simple qu'il laisse invariante la deuxième coordonnée. Rappelons que l'ergodicité signifierait l'identité des moyennes temporelles et spatiales

$$(7) \quad \lim_{|T| \rightarrow +\infty} \frac{1}{T} \int_0^T a(x_0 + t\xi_0, \xi_0) dt = \int_{\substack{x \in \mathbb{T}^d \\ u \in \mathbb{S}^{d-1}}} a(x, \|\xi_0\|u) dx d\sigma_{d-1}(u)$$

pour toute fonction continue $a : \mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ et pour *Lebesgue-presque-tout* couple de données initiales (x_0, ξ_0) (dans cette formule $d\sigma_{d-1}(u)$ est de nouveau la mesure de volume $(d-1)$ -dimensionnel sur la sphère \mathbb{S}^{d-1} , voir sa définition dans la section sur les sphères, § 2). Il est clair par exemple que l'identité (7) ne peut avoir lieu si $a = a(\xi)$ est une fonction qui ne dépend que de la deuxième variable ξ .

Il est cependant classique (lemme 1.6) que si a ne dépend *pas* de la coordonnée ξ , autrement dit si on considère une fonction $a : \mathbb{T}^d \rightarrow \mathbb{R}$, on a

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

pour presque tout ξ_0 (plus explicitement, si et seulement si l'hyperplan ξ_0^\perp n'intersecte \mathbb{Z}^d qu'en 0, autrement dit si les coordonnées de ξ_0 dans la base canonique sont indépendantes sur \mathbb{Q}). On a donc, sur le tore, un phénomène d'*ergodicité restreinte* à la classe des fonctions ne

dépendant que de x . Ceci explique qu'on puisse démontrer le théorème 1.4, *théorème d'ergodicité quantique restreint* aux opérateurs de multiplication par $a(x)$.

Il est légitime de s'interroger sur l'intérêt du théorème 1.4, étant donné que l'on connaît une base orthonormée explicite de fonctions propres de $\Delta_{\mathbb{T}^d}$ (les fonctions e_k) pour laquelle le résultat est évident : on constate en effet que

$$\int_{\mathbb{T}^d} a(x)|e_k(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{T}^d} a(x) dx$$

pour tout k . Donnons deux réponses à cette objection : d'une part, à cause de la multiplicité des valeurs propres du laplacien, le choix d'une telle base orthonormée n'est pas unique, et il peut être intéressant d'avoir un résultat valable pour *n'importe quelle* base de fonctions propres (on verra d'ailleurs plus bas qu'il y a des questions intéressantes à se poser sur les fonctions propres générales du laplacien sur \mathbb{T}^d , c'est à-dire les fonctions de la forme (2)). Deuxième réponse : le théorème 1.4 dans le cas particulier du tore nous permet de donner une présentation relativement simple, en évitant le langage des variétés riemanniennes, de la preuve du théorème d'ergodicité quantique. La preuve présentée ci-dessous s'adaptera mot pour mot à des variétés plus générales, la difficulté supplémentaire étant surtout de savoir définir les objets.

Le lemme suivant est une version du lemme de Kronecker-Weyl :

Lemme 1.6. *Soit $a \in C^0(\mathbb{T}^d)$ et soit $\xi_0 \in \mathbb{R}^d$ dont les coordonnées dans la base canonique sont indépendantes sur \mathbb{Q} . Alors, quel que soit $x_0 \in \mathbb{T}^d$,*

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

Démonstration. Par densité de $\text{Vect}(e_k)_{k \in \mathbb{Z}}$ dans l'espace $C^0(\mathbb{T}^d)$ (muni de la norme de la convergence uniforme), il suffit de démontrer le lemme pour $a = e_k$. Pour $k = 0$ c'est évident, la fonction e_k étant constante. Pour $k \neq 0$, on sait par hypothèse que $k \cdot \xi_0 \neq 0$. On a

$$(8) \quad \frac{1}{T} \int_0^T e^{ik \cdot (x_0 + t\xi_0)} dt = \frac{e^{ik \cdot x_0} (e^{iT k \cdot x_0} - 1)}{iT k \cdot \xi_0}$$

et donc

$$\lim_{|T| \rightarrow +\infty} \frac{1}{T} \int_0^T e_k(x_0 + t\xi_0) dt = 0 = \int_{x \in \mathbb{T}^d} e_k(x) dx.$$

On voit aussi que la condition du lemme est nécessaire : si $k \cdot \xi_0 = 0$, on a convergence de la quantité (8), mais vers une quantité autre que $\int_{x \in \mathbb{T}^d} a(x) dx$. \square

On commence à présent la preuve du théorème 1.4. On utilise les résultats énoncés par C. Fermanian (ce volume), portant sur la quantification $\text{Op}_{\hbar}(a)$ pour $a : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$, $(2\pi\mathbb{Z})^d$ -périodique en x .

On a vu à la remarque 1.3 que si $b(x, \xi) = \chi(\|\xi\|^2)$ on a $\text{Op}_{\hbar}(b) = \chi(-\hbar^2 \Delta_{\mathbb{T}^d})$. Par ailleurs, on a

$$\text{Op}_{\hbar}(a(x, \xi)) \circ \text{Op}_{\hbar}(\chi(\|\xi\|^2)) = \text{Op}_{\hbar}(a(x, \xi)\chi(\|\xi\|^2)) + O(\hbar),$$

et cette relation est même exacte (sans $O(\hbar)$) si, au lieu de la quantification de Weyl, on utilise la quantification appelée *classique* au § 1.3 du texte de C. Fermanian – ce que l'on peut faire sans changer l'énoncé final du théorème.

Du texte de C. Fermanian, on rappelle le théorème d'Egorov :

$$e^{-it\hbar\Delta_{\mathbb{T}^d}/2} \text{Op}_{\hbar}(a(x, \xi)) e^{it\hbar\Delta_{\mathbb{T}^d}/2} = \text{Op}_{\hbar}(a(x + t\xi, \xi)) + O(|t|\hbar)$$

valable pour toute fonction a de classe C^∞ , dont chaque dérivée est uniformément bornée (l'estimation de l'erreur est moins bonne pour la quantification classique que pour la quantification de Weyl, mais cela n'aura aucune importance ici). L'estimée du reste est valable dans l'espace $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{T}^d))$ des endomorphismes continus de $L^2(\mathbb{T}^d)$.

En remplaçant a par $a - \int_{\mathbb{T}^d} a(x) dx$, on se ramène au cas où $\int_{\mathbb{T}^d} a(x) dx = 0$.

On commence par écrire

$$\frac{1}{N(E)} \sum_{\lambda_n \leq E} |\langle \phi_n, a\phi_n \rangle|^2 \leq \frac{1}{N(E)} \sum_{n=0}^{+\infty} \chi^2(\lambda_n/E) |\langle \phi_n, a\phi_n \rangle|^2$$

si χ est une fonction dans $C_c^\infty(\mathbb{R})$, constante égale à 1 sur $[0, 1]$. Soient t et \hbar quelconques. En utilisant le fait que les ϕ_n sont des fonctions propres du laplacien on a

$$\langle \phi_n, a\phi_n \rangle = \left\langle \phi_n, e^{-it\hbar\Delta_{\mathbb{T}^d}/2} a e^{it\hbar\Delta_{\mathbb{T}^d}/2} \phi_n \right\rangle$$

ou, en intégrant sur un intervalle $[0, T]$ quelconque,

$$\langle \phi_n, a\phi_n \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T \left\langle \phi_n, e^{-it\hbar\Delta_{\mathbb{T}^d}/2} a e^{it\hbar\Delta_{\mathbb{T}^d}/2} \phi_n \right\rangle dt.$$

Si l'on se souvient que la multiplication par a coïncide avec l'opérateur $\text{Op}_{\hbar}(a)$, le théorème d'Egorov permet ensuite de transformer cette dernière égalité en

$$\langle \phi_n, \text{Op}_{\hbar}(a)\phi_n \rangle = \langle \phi_n, \text{Op}_{\hbar}(a_T(x, \xi))\phi_n \rangle + O(\hbar|T|),$$

où l'on a noté

$$a_T(x, \xi) = \frac{1}{T} \int_0^T a(x + t\xi) dt.$$

Il vient donc

$$\begin{aligned} (9) \quad & \frac{1}{N(E)} \sum_n \chi^2(\lambda_n/E) |\langle \phi_n, \text{Op}_{\hbar}(a)\phi_n \rangle|^2 \\ &= \frac{1}{N(E)} \sum_n \chi^2(\lambda_n/E) |\langle \phi_n, \text{Op}_{\hbar}(a_T)\phi_n \rangle|^2 \\ &\quad + O(\hbar|T|) \frac{1}{N(E)} \sum_n \chi^2(\lambda_n/E) \\ &= \frac{1}{N(E)} \sum_n \chi^2(\lambda_n/E) |\langle \phi_n, \text{Op}_{\hbar}(a_T)\phi_n \rangle|^2 + O(\hbar|T|). \end{aligned}$$

Pour passer de la deuxième à la troisième ligne, on a utilisé la loi de Weyl, selon laquelle $N(E) \sim CE^{d/2}$, ce qui implique que $\sum_n \chi^2(\lambda_n/E) = O(E^{d/2})$.

À ce stade on prend $\hbar = \hbar(E) = E^{-1/2}$, et on remarque que

$$\begin{aligned} \chi^2(\lambda_n/E) |\langle \phi_n, \text{Op}_{\hbar}(a_T)\phi_n \rangle|^2 &= |\langle \phi_n, \text{Op}_{\hbar}(a_T)\chi(\Delta/E)\phi_n \rangle|^2 \\ &= |\langle \phi_n, \text{Op}_{\hbar}(a_T(x, \xi)\chi(\|\xi\|^2))\phi_n \rangle|^2. \end{aligned}$$

Pour majorer la dernière ligne de (9), on utilise la norme de Hilbert-Schmidt de l'opérateur $\text{Op}_{\hbar}(a_T(x, \xi)\chi(\|\xi\|^2))$:

$$\sum_{n=0}^{+\infty} |\langle \phi_n, \text{Op}_{\hbar}(a_T(x, \xi)\chi(\|\xi\|^2))\phi_n \rangle|^2 \leq \| \text{Op}_{\hbar}(a_T(x, \xi)\chi(\|\xi\|^2)) \|_{\text{HS}}^2$$

et l'on a vu dans la proposition 6.6 du texte de C. Fermanian (ce volume) que

$$\| \text{Op}_{\hbar}(a_T(x, \xi)\chi(\|\xi\|^2)) \|_{\text{HS}}^2 \sim (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d} a_T^2(x, \xi)\chi^2(\|\xi\|^2) dx d\xi.$$

Notons aussi que d'après la loi de Weyl, $N(E) \sim CE^{d/2} \sim \tilde{C}(2\pi\hbar)^{-d}$ pour des constantes $C, \tilde{C} > 0$.

Mettant bout à bout ces inégalités, faisant tendre E vers l'infini, et donc \hbar vers 0, à T fixé, on constate que

$$\limsup_{E \rightarrow +\infty} \frac{1}{N(E)} \sum_{n, \lambda_n \leq E} |\langle \phi_n, a\phi_n \rangle|^2 \leq \tilde{C}^{-1} \int_{\mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d} a_T^2(x, \xi) \chi^2(\|\xi\|^2) dx d\xi$$

pour T arbitraire.

On prend maintenant la limite $T \rightarrow +\infty$: le lemme 1.6 montre que $a_T^2(x, \xi) \rightarrow 0$ pour presque tout ξ , et par convergence dominée on a

$$\int_{\mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d} a_T^2(x, \xi) \chi^2(\|\xi\|^2) dx d\xi \xrightarrow{T \rightarrow +\infty} 0,$$

d'où finalement

$$\limsup_{E \rightarrow +\infty} \frac{1}{N(E)} \sum_{\substack{n \\ \lambda_n \leq E}} |\langle \phi_n, a\phi_n \rangle|^2 \leq 0$$

ce qui conclut la preuve du théorème. \square

2. Fonctions propres de la sphère ronde

À titre de comparaison, décrivons le laplacien et ses fonctions propres sur la sphère. On renvoie au livre [Far08], Chap. 9, pour une présentation plus détaillée.

2.1. Laplacien et fonctions propres sur la sphère

La sphère de dimension d est la sous-variété de \mathbb{R}^{d+1}

$$\mathbb{S}^d = \{(x_1, \dots, x_{d+1}) \in \mathbb{R}^{d+1} \mid x_1^2 + \dots + x_{d+1}^2 = 1\}.$$

La sphère \mathbb{S}^d peut être munie de la structure riemannienne héritée de la structure euclidienne de \mathbb{R}^{d+1} . Elle rentre donc dans le cadre général qui sera décrit au paragraphe 3.1. Nous donnons ici une construction *ad hoc* du laplacien sur \mathbb{S}^d et décrivons une base de fonctions propres, les *harmoniques sphériques*.

Soit $a > 1$ arbitraire. Toute fonction f sur \mathbb{S}^d peut être étendue de manière unique en une fonction f_0 sur

$$\mathbb{S}_a^d = \{(x_1, \dots, x_{d+1}) \in \mathbb{R}^{d+1} \mid 1 - a^{-1} \leq x_1^2 + \dots + x_{d+1}^2 \leq 1 + a\}$$

qui coïncide avec f sur \mathbb{S}^d , et qui soit 0-homogène, c'est-à-dire qui satisfasse

$$f_0(x) = f_0(x/\|x\|)$$

pour tout $x = (x_1, \dots, x_{d+1}) \in \mathbb{S}_a^d$. On dira que f est de classe C^k sur \mathbb{S}^d si f_0 est de classe C^k sur \mathbb{S}_a^d . Si f est de classe C^2 sur \mathbb{S}^d , on définira $\Delta_{\mathbb{S}^d} f$ comme la restriction à \mathbb{S}^d de $\Delta_{\mathbb{R}^{d+1}} f_0$.

Soit $\alpha > 0$ et soit f_α une fonction α -homogène sur \mathbb{S}_a^d , c'est-à-dire que

$$(10) \quad f_\alpha(x) = \|x\|^\alpha f_\alpha(x/\|x\|).$$

Autrement dit, si l'on pose $g(r, u) = f_\alpha(ru)$ pour $1 - a^{-1} < r^2 < 1 + a$ et $u \in \mathbb{S}^d$, on a $g(r, u) = r^\alpha g(1, u)$. À l'aide de la formule (1), on calcule « à la main » l'expression

$$(11) \quad (\Delta_{\mathbb{R}^{d+1}} f_\alpha)(x) \\ = \alpha(\alpha + d - 1)\|x\|^{\alpha-2} f_\alpha(x/\|x\|) + \|x\|^{\alpha-2} \Delta_{\mathbb{S}^d} f_\alpha(x/\|x\|),$$

autrement dit

$$\Delta_{\mathbb{R}^{d+1}} f_\alpha(x) = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{d}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta_{\mathbb{S}^d} \right) g(r, u).$$

Cette expression du laplacien $\Delta_{\mathbb{R}^{d+1}}$ en coordonnées sphériques reste vraie pour des fonctions quelconques, car les combinaisons linéaires de fonctions homogènes sont denses dans $C^k(\mathbb{S}_a^d)$.

La mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^{d+1} , $d\ell^{d+1}(x) = dx_1 \cdots dx_{d+1}$, est homogène de degré $d + 1$, c'est-à-dire qu'elle est multipliée par λ^{d+1} sous l'action de l'homothétie linéaire de rapport $\lambda > 0$. Ceci implique qu'il existe une mesure positive σ_d sur \mathbb{S}^d telle que l'on ait

$$\int_{\mathbb{R}^{d+1}} f(x) d\ell^{d+1}(x) = \int_0^\infty \int_{\mathbb{S}^d} f(ru) r^d dr d\sigma_d(u)$$

pour toute fonction f sur \mathbb{R}^{d+1} pour lesquelles ces intégrales sont absolument convergentes. On a, pour tout $A \subset \mathbb{S}^d$,

$$\sigma_d(A) = \ell^{d+1} \left(\left\{ x \in \mathbb{S}_a^d \mid x/\|x\| \in A \right\} \right) \frac{d+1}{(1+a)^{d+1} - (1-a^{-1})^{d+1}}.$$

Notons que cette mesure $d\sigma_d$ est invariante par l'action de tous les éléments de $O(d, \mathbb{R})$, ce qui signifie que $\sigma_d(A) = \sigma_d(M(A))$ pour toute matrice $M \in O(d, \mathbb{R})$ (c'est pourquoi on l'appelle parfois *mesure uniforme* sur \mathbb{S}^d).

De la formule

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^{d+1}} \Delta_{\mathbb{R}^{d+1}} f(x)g(x)d\ell^{d+1}(x) &= \int_{\mathbb{R}^{d+1}} f(x)\Delta_{\mathbb{R}^{d+1}}g(x)d\ell^{d+1}(x) \\ &= - \int_{\mathbb{R}^{d+1}} \nabla f(x) \cdot \nabla g(x)d\ell^{d+1}(x) \end{aligned}$$

valable pour f, g à supports compacts et de classe C^2 sur \mathbb{R}^{d+1} , on peut déduire la formule

$$(12) \quad \begin{aligned} \int_{\mathbb{S}^d} \Delta_{\mathbb{S}^d} f(u)g(u)d\sigma_d(u) &= \int_{\mathbb{S}^d} f(u)\Delta_{\mathbb{S}^d}g(u)d\sigma_d(u) \\ &= - \int_{\mathbb{S}^d} \nabla f_0(u) \cdot \nabla g_0(u)d\sigma_d(u) \end{aligned}$$

valable pour f, g de classe C^2 sur \mathbb{S}^d ; les fonctions f_0, g_0 sont, comme plus haut, les fonctions 0-homogènes qui coïncident avec f, g sur \mathbb{S}^d . Le gradient $\nabla f_0(u)$ est orthogonal à u .

Exactement comme dans le cas du tore, on en déduit que

- Les valeurs propres de $\Delta_{\mathbb{S}^d}$ sont des réels ≤ 0 ;
- si f et g sont des fonctions propres associées à des valeurs propres distinctes, alors $\int_{\mathbb{S}^d} f(u)\overline{g(u)}d\sigma_d(u) = 0$, autrement dit, elles sont orthogonales pour le produit scalaire hermitien

$$\langle g, f \rangle = \int_{\mathbb{S}^d} f(u)\overline{g(u)}d\sigma_d(u).$$

Si $f \in C^0(\mathbb{S}^d)$ on notera

$$\|f\|_2 = \sqrt{\langle f, f \rangle}$$

et on définit l'espace de Hilbert $L^2(\mathbb{S}^d)$ comme le complété de $C^0(\mathbb{S}^d)$ pour cette norme.

Une fonction f sur un ouvert de \mathbb{R}^{d+1} est dite *harmonique* si $\Delta_{\mathbb{R}^{d+1}}f = 0$. De la formule (11), on déduit directement que si f est harmonique sur \mathbb{S}_a^d , et homogène de degré α (c'est-à-dire qu'elle satisfait à (10)), alors la fonction $F = u \mapsto f(u)$ définie sur \mathbb{S}^d vérifie

$$\Delta_{\mathbb{S}^d}F = -\alpha(\alpha + d - 1)F.$$

Autrement dit, F est une fonction propre du laplacien sur la sphère. Ci-dessous on va montrer qu'en fait les restrictions à \mathbb{S}^d des *polynômes* harmoniques sont denses dans $C^0(\mathbb{S}^d)$ et donc dans $L^2(\mathbb{S}^d)$. Il en découlera que l'on peut trouver une base hilbertienne de $L^2(\mathbb{S}^d)$, formée de restrictions à \mathbb{S}^d de polynômes *homogènes* harmoniques. Ces polynômes nous fournissent une base hilbertienne de fonctions

propres de $\Delta_{\mathbb{S}^d}$, et comme le degré d'homogénéité d'un polynôme est un entier, les valeurs propres de $\Delta_{\mathbb{S}^d}$ sont donc les $-m(m+d-1)$, où $m \in \mathbb{N}$ (on calculera aussi les multiplicités des valeurs propres).

On notera \mathcal{P} l'algèbre des fonctions polynomiales à plusieurs variables sur \mathbb{R}^{d+1} . Une base de cette algèbre est donnée par les fonctions

$$x = (x_1, \dots, x_{d+1}) \mapsto x^\alpha,$$

où $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_{d+1}) \in \mathbb{N}^{d+1}$ est un multi-indice, et la notation x^α désigne $x_1^{\alpha_1} \dots x_{d+1}^{\alpha_{d+1}}$. On notera \mathcal{P}_m l'espace des fonctions polynomiales homogènes de degré m , engendré par les fonctions $x \mapsto x^\alpha$ avec $|\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_{d+1} = m$. La dimension δ_m de \mathcal{P}_m est

$$\delta_m = \frac{(m+d)!}{d!m!},$$

c'est le nombre de manières d'écrire $m = \alpha_1 + \dots + \alpha_{d+1}$ avec les α_i entiers positifs. Remarquons que $\Delta_{\mathbb{R}^{d+1}}$ envoie \mathcal{P}_m dans \mathcal{P}_{m-2} . On notera

$$\mathcal{H}_m = \{p \in \mathcal{P}_m \mid \Delta_{\mathbb{R}^{d+1}} p = 0\}$$

et $\mathcal{H}\mathcal{S}_m \subset C^\infty(\mathbb{S}^d)$ les restrictions à \mathbb{S}^d des fonctions de \mathcal{H}_m . On sait que les éléments de $\mathcal{H}\mathcal{S}_m$ sont des fonctions propres de $\Delta_{\mathbb{S}^d}$ pour la valeur propre $-m(m+d-1)$ (on les appelle *harmoniques sphériques*) et ceci implique que pour $m \neq m'$, les espaces $\mathcal{H}\mathcal{S}_m$ et $\mathcal{H}\mathcal{S}_{m'}$ sont orthogonaux pour le produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$.

Le but de ce qui suit est de montrer que $\bigoplus_{m \in \mathbb{N}} \mathcal{H}\mathcal{S}_m$ est dense dans $L^2(\mathbb{S}^d)$, afin de montrer qu'on a exhibé ainsi toutes les fonctions propres.

Notons Q l'élément de \mathcal{P}_2 , $Q(x) = x_1^2 + \dots + x_{d+1}^2$.

Proposition 2.1.

(1) Pour toute application polynomiale $p \in \mathcal{P}_m$, il existe des applications polynomiales harmoniques $h_k \in \mathcal{H}_{m-2k}$ ($k \in \mathbb{N}$, $0 \leq k \leq m/2$) telles que

$$p = \sum_{0 \leq k \leq m/2} h_k Q^k.$$

(2) $\bigoplus_m \mathcal{H}\mathcal{S}_m$ est dense dans $C^0(\mathbb{S}^d)$ et donc dans $L^2(\mathbb{S}^d)$. Par conséquent, l'espace de Hilbert $L^2(\mathbb{S}^d)$ est somme hilbertienne des $\mathcal{H}\mathcal{S}_m$ (ces sous-espaces étant deux à deux orthogonaux).

(3) La dimension d_m de $\mathcal{H}\mathcal{S}_m$ vaut

$$d_m = \delta_m - \delta_{m-2} = (2m + d - 1) \frac{(m + d - 2)!}{(d - 1)!m!}.$$

Démonstration. On va montrer que $\mathcal{P}_m = \mathcal{H}_m \oplus Q\mathcal{P}_{m-2}$ pour tout $m \geq 2$. Le (3) en découlera, ainsi que le (1) en faisant une récurrence.

On introduit sur \mathcal{P} le produit scalaire hermitien défini par

$$((p, q)) = \sum_{\alpha \in \mathbb{N}^{d+1}} \alpha! \overline{p_\alpha} q_\alpha$$

si $p = \sum_{\alpha \in \mathbb{N}^{d+1}} p_\alpha x^\alpha$ et $q = \sum_{\alpha \in \mathbb{N}^{d+1}} q_\alpha x^\alpha$. On a noté $\alpha! = \alpha_1! \dots \alpha_{d+1}!$.

On vérifie qu'on a $((\partial_{x_k} p, q)) = ((p, x_k q))$, d'où

$$((\Delta_{\mathbb{R}^{d+1}} p, q)) = ((p, Qq)),$$

autrement dit, l'adjoint de $\Delta_{\mathbb{R}^{d+1}}$ est l'opérateur M_Q de multiplication par Q . La formule annoncée résulte alors de l'identité

$$\mathcal{P}_m = \text{Ker } \Delta_{\mathbb{R}^{d+1}} \oplus (\text{Ker } \Delta_{\mathbb{R}^{d+1}})^\perp$$

(on utilise ici l'orthogonal au sens du produit scalaire $((\cdot, \cdot))$) et

$$(\text{Ker } \Delta_{\mathbb{R}^{d+1}})^\perp = \text{Im } \Delta_{\mathbb{R}^{d+1}}^* = \text{Im } M_Q = Q\mathcal{P}_{m-2}.$$

Le théorème de Stone-Weierstrass implique que l'ensemble des restrictions à \mathbb{S}^d d'éléments de \mathcal{P} est dense dans $C^0(\mathbb{S}^d)$, lui-même dense dans $L^2(\mathbb{S}^d)$. Le (1) implique alors que tout élément de \mathcal{P}_m coïncide sur \mathbb{S}^d , avec un élément de $\bigoplus_{k \leq m/2} \mathcal{H}_k$, et ceci démontre le point (2). \square

En utilisant la formule de Stirling, on montre que la multiplicité d_m de la valeur propre $-m(m + d - 1)$ est donnée, asymptotiquement quand $m \rightarrow +\infty$, par la formule

$$d_m \sim \frac{2m^{d-1}}{(d-1)!}.$$

On en déduit la loi de Weyl : soit $N(E) = \sum_{m(m+d-1) \leq E} d_m$; alors pour $E \rightarrow +\infty$ on a

$$N(E) \sim \sum_{m \leq E^{1/2}} \frac{2m^{d-1}}{(d-1)!}.$$

Grâce à une comparaison avec l'intégrale $\int_1^{E^{1/2}} \frac{2x^{d-1}}{(d-1)!} dx$, on obtient

$$N(E) \sim \frac{2E^{d/2}}{d!}.$$

2.2. Suite de fonctions propres se concentrant sur l'équateur

Considérons la suite de fonctions ϕ_n sur \mathbb{R}^{d+1} définie par $\phi_n(x_1, \dots, x_{d+1}) = (x_1 + ix_2)^n$. Pour tout entier n , ϕ_n est un polynôme n -homogène sur \mathbb{R}^{d+1} , et l'on vérifie aisément qu'il est harmonique. La restriction de ϕ_n à \mathbb{S}^d est donc une fonction propre du laplacien, de valeur propre $-n(n+d-1)$. Sa norme dans $L^2(\mathbb{S}^d)$ est $(\int_{\mathbb{S}^d} |u_1 + iu_2|^{2n} d\sigma_d(u))^{1/2}$, quantité que nous n'avons pas besoin de calculer explicitement pour ce qui suit.

On constate que sur \mathbb{S}^d le maximum de $u \mapsto |u_1 + iu_2|$ est 1, atteint si et seulement si $u_3 = u_4 = \dots = u_{d+1} = 0$. Un argument standard⁽¹⁾ montre alors que, si a est une fonction continue sur \mathbb{S}^d , qui s'annule au voisinage du cercle $\mathcal{C} = \{u \in \mathbb{S}^d \mid u_3 = u_4 = \dots = u_{d+1} = 0\}$, on a

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{\int_{\mathbb{S}^d} a(u) |u_1 + iu_2|^{2n} d\sigma_d(u)}{\int_{\mathbb{S}^d} |u_1 + iu_2|^{2n} d\sigma_d(u)} = 0.$$

Autrement dit, toute la « masse » des fonctions propres ϕ_n se concentre sur le cercle \mathcal{C} .

Soit maintenant a une fonction continue quelconque sur \mathbb{S}^d . En remarquant que $\phi_n \circ R_\theta = e^{-in\theta} \phi_n$ pour tout $\theta \in \mathbb{R}$, où R_θ est la rotation des deux premières coordonnées définie par

$$\begin{aligned} R_\theta(x_1, x_2, x_3, \dots, x_{d+1}) \\ = (\cos \theta x_1 + \sin \theta x_2, -\sin \theta x_1 + \cos \theta x_2, x_3, \dots, x_{d+1}), \end{aligned}$$

et en utilisant l'invariance de σ_d par les isométries, on montre que

$$\lim_n \frac{\int_{\mathbb{S}^d} a(u) |\phi_n(u)|^2 d\sigma_d(u)}{\int_{\mathbb{S}^d} |\phi_n(u)|^2 d\sigma_d(u)} = \lim_n \frac{\int_{\mathbb{S}^d} a \circ R_\theta(u) |\phi_n(u)|^2 d\sigma_d(u)}{\int_{\mathbb{S}^d} |\phi_n(u)|^2 d\sigma_d(u)}.$$

⁽¹⁾Sur le support de a , on peut trouver $\delta > 0$ tel que $|u_1 + iu_2| < 1 - 2\delta$. En revanche, il existe un voisinage Ω_δ de la courbe \mathcal{C} tel que $|u_1 + iu_2| > 1 - \delta$ sur Ω_δ . Ainsi,

$$\left| \frac{\int_{\mathbb{S}^d} a(u) |u_1 + iu_2|^{2n} d\sigma_d(u)}{\int_{\mathbb{S}^d} |u_1 + iu_2|^{2n} d\sigma_d(u)} \right| \leq \left(\frac{1 - 2\delta}{1 - \delta} \right)^{2n} \frac{\int_{\Omega_\delta} |a(u)| d\sigma_d(u)}{\int_{\Omega_\delta} d\sigma_d(u)}.$$

Autrement dit, la limite est invariante par la transformation $a \mapsto a \circ R_\theta$.

Comme le cercle \mathcal{C} porte une unique mesure de probabilité invariante par toutes les rotations R_θ , on a nécessairement

$$\lim_n \frac{\int_{\mathbb{S}^d} a(u) |\phi_n(u)|^2 d\sigma_d(u)}{\int_{\mathbb{S}^d} |\phi_n(u)|^2 d\sigma_d(u)} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} a(\cos \theta, \sin \theta, 0, \dots, 0) d\theta$$

pour toute fonction a continue sur \mathbb{S}^d .

Nous verrons au paragraphe 4.3 que ce phénomène de concentration de fonctions propres sur des courbes marque une grande différence entre le tore et la sphère : en effet, sur le tore, Bourgain et Jakobson ont démontré à partir du développement en série de Fourier (2) que cela n'est pas possible.

3. Ergodicité quantique sur les variétés riemanniennes

3.1. Structures riemanniennes et opérateur de Laplace-Beltrami

Pour simplifier la présentation, nous considérons uniquement des *sous-variétés* de \mathbb{R}^n (ceci n'est en fait pas une restriction, si l'on connaît le théorème de plongement de Nash (1956, [Nas56]), selon lequel toute variété riemannienne abstraite peut se réaliser de manière isométrique comme sous-variété d'un espace euclidien \mathbb{R}^n avec n assez grand).

Définition 3.1 (sous-variété). Un sous-ensemble $M \subset \mathbb{R}^n$ est une sous-variété de dimension d et de classe C^k si, pour tout $x \in M$, il existe un voisinage U de x dans \mathbb{R}^n , un ouvert Ω de \mathbb{R}^d contenant 0, et une application Φ de classe C^k de Ω dans \mathbb{R}^n , telle que $\Phi(0) = x$, $d\Phi(0)$ est injective, et Φ est un homéomorphisme de Ω sur $M \cap U$ (muni de la topologie induite).

On renvoie, par exemple, au livre de Berger–Gostiaux [BG92]. La sous-variété M est munie de la topologie induite par celle de \mathbb{R}^n . Les applications Φ de la caractérisation (3) s'appellent des *cartes*. Une application $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ est dite de classe C^k si $f \circ \Phi$ est de classe C^k , pour toute carte Φ . L'espace tangent $T_y M$ à M en un point y est le sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^n

$$T_y M = d\Phi(a) \cdot \mathbb{R}^d \quad \text{si } y \in M \cap U \text{ et } y = \Phi(a).$$

De manière plus intuitive : $v \in T_y M$ si et seulement si il existe une courbe $\gamma :]-\varepsilon, \varepsilon[\rightarrow \mathbb{R}^n$ de classe C^1 avec $\gamma(t) \in M$ pour tout t , $\gamma(0) = y$, $\gamma'(0) = v$.

Le *fibré tangent* de M est le sous-ensemble de $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ défini comme suit :

$$TM = \{(x, v) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \mid x \in M, v \in T_x M\}$$

(c'est une sous-variété de dimension $2d$ de $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$).

Le produit scalaire défini par la base canonique de \mathbb{R}^n permet d'identifier \mathbb{R}^n à $(\mathbb{R}^n)^*$ et l'espace dual $T_y^* M$ du sous-espace $T_y M \subset \mathbb{R}^n$ à l'espace des formes linéaires sur \mathbb{R}^n s'annulant sur l'orthogonal $T_y M^\perp$. Soit $P(y) : \mathbb{R}^n \rightarrow T_y M$ le projecteur orthogonal. Alors l'espace cotangent $T_y^* M$ est plongé comme un sous-espace vectoriel de $(\mathbb{R}_n)^*$ par l'application

$$(13) \quad \xi \in T_y^* M \longmapsto \xi \circ P(y) \in (\mathbb{R}_n)^*.$$

Le *fibré cotangent* $T^* M$ est la sous-variété de dimension $2d$ de $\mathbb{R}^n \times (\mathbb{R}^n)^*$ définie par

$$(14) \quad T^* M = \{(x, \xi \circ P(x)) \in \mathbb{R}^n \times (\mathbb{R}^n)^* \mid x \in M, \xi \in T_x^* M\}.$$

Structure riemannienne induite sur M , et distance associée

Pour $y \in M$ et $v, v' \in T_y M$, on peut définir leur produit scalaire $v \cdot v'$ comme étant celui qui provient de la structure euclidienne usuelle de \mathbb{R}^n . La donnée d'un produit scalaire sur chaque espace tangent $T_y M$ (dépendant de manière C^k de y) est ce qu'on appelle *structure riemannienne* de classe C^k sur M . Ici, par souci de simplicité, on ne parlera pas de structures riemanniennes abstraites et on ne regardera que le cas de sous-variétés de \mathbb{R}^n avec la structure riemannienne induite.

On définit la longueur $\ell(\gamma)$ d'une courbe $\gamma : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^n$ de classe C^1 tracée sur M :

$$\ell(\gamma) = \int_0^1 \|\gamma'(t)\| dt$$

et son énergie $E(\gamma)$,

$$E(\gamma) = \frac{1}{2} \int_0^1 \|\gamma'(t)\|^2 dt.$$

On vérifie que la longueur ne dépend pas du paramétrage, alors que l'énergie en dépend. Ceci permet de définir une distance sur M

$$d_M(x, y) = \inf\{\ell(\gamma) \mid \gamma(0) = x, \gamma(1) = y\}.$$

Cette distance définit sur M la même topologie que la topologie induite.

Gradient d'une fonction

Soit $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ de classe C^1 et soit $y \in M$. La différentielle $df(y)$ est une forme linéaire sur T_yM : pour tout $v \in T_yM$,

$$df(y)v = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(\gamma(t)) - f(y)}{t}$$

où γ est une courbe tracée sur M telle que $\gamma(0) = y$ et $\gamma'(0) = v$.

Comme le produit scalaire définit une forme bilinéaire non dégénérée sur T_yM , il existe un unique vecteur de T_yM , noté $\nabla f(y)$, tel que

$$df(y)v = \nabla f(y) \cdot v$$

pour tout $v \in T_yM$.

Géodésiques

Soit $\gamma_s : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^n$ une famille de courbes tracées sur M , indexées par $s \in]-\varepsilon, \varepsilon[$. Plus précisément, on demande que $(s, t) \mapsto \gamma_s(t)$ soit de classe C^2 sur $] -\varepsilon, \varepsilon[\times [a, b]$. L'application énergie, $s \mapsto E(\gamma_s)$ est dérivable, et par dérivation sous le signe \int ,

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} E(\gamma_s) &= \int_a^b \gamma'_s(t) \cdot \frac{d}{ds} \gamma'_s(t) dt \\ &= \int_a^b \gamma'_s(t) \cdot \frac{d}{ds} \frac{d}{dt} \gamma_s(t) dt \\ &= \int_a^b \gamma'_s(t) \cdot \frac{d}{dt} \frac{d}{ds} \gamma_s(t) dt \\ &= - \int_a^b \gamma''_s(t) \cdot \frac{d}{ds} \gamma_s(t) dt + \gamma'_s(b) \cdot \frac{d}{ds} \gamma_s(b) - \gamma'_s(a) \cdot \frac{d}{ds} \gamma_s(a) \end{aligned}$$

(intégration par parties). On dira qu'une courbe $\gamma : [a, b] \rightarrow M$ est une *géodésique* de M si l'on a $\frac{d}{ds}|_{s=0} E(\gamma_s) = 0$ pour toute famille C^2 de courbes $\gamma_s : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^n$ tracées sur M , telles que $\gamma_0 = \gamma$ et telle que

$$\gamma_s(a) = \gamma(a), \quad \gamma_s(b) = \gamma(b)$$

pour tout $s \in] - \varepsilon, \varepsilon[$ (c'est à-dire que les extrémités sont fixes). En particulier, on a $\frac{d}{ds}\gamma_s(a) = 0$ et $\frac{d}{ds}\gamma_s(b) = 0$. Une condition nécessaire et suffisante pour que γ soit une géodésique est donc que

$$\int_a^b \gamma''(t) \cdot \frac{d}{ds}\Big|_{s=0} \gamma_s(t) dt = 0$$

pour toute famille C^2 de courbes $\gamma_s : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^n$ tracées sur M , telles que $\gamma_0 = \gamma$ et d'extrémités fixes. Comme $\frac{d}{ds}\Big|_{s=0} \gamma_s(t)$ est un élément quelconque de $T_{\gamma(t)}M$, on voit qu'une condition nécessaire et suffisante est que

$$(15) \quad \gamma''(t) \perp T_{\gamma(t)}M$$

pour tout t : l'accélération doit être normale à M .

Définition 3.2. Plus généralement, si $I \subset \mathbb{R}$ est un intervalle de \mathbb{R} , on dira que $\gamma : I \rightarrow M$ est une géodésique si γ est de classe C^2 et si on a $\gamma''(t) \perp T_{\gamma(t)}M$ pour tout $t \in I$ (alors $\|\gamma'(t)\| = \text{cste}$).

Montrons que l'équation des géodésiques (15) peut se mettre sous forme hamiltonienne, afin de faire le lien avec les exposés précédents. Cela peut paraître artificiel ici, mais le caractère hamiltonien de l'équation joue en fait un rôle très important quand on veut faire le lien avec la mécanique quantique. Cela dit, comme nous ne donnerons pas de preuves détaillées concernant les opérateurs pseudo-différentiels sur les variétés, il est tout-à-fait possible de passer à la définition 3.4 sans lire les calculs ci-dessous. On notera toujours $\|\cdot\|$ la norme euclidienne sur \mathbb{R}^n muni de sa base canonique orthonormée $(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)$, et on utilisera la même notation $\|\cdot\|$ pour la norme sur le dual $(\mathbb{R}^n)^*$. L'usage de la même notation est justifié par la remarque que l'identification de $(\mathbb{R}^n)^*$ à \mathbb{R}^n grâce au produit scalaire est une isométrie. Néanmoins, quand on voudra souligner la différence entre ces deux normes, on les notera $\|\cdot\|_{\mathbb{R}^n}$ et $\|\cdot\|_{(\mathbb{R}^n)^*}$.

Pour $v \in \mathbb{R}^n$ on note $\xi_v : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ la forme linéaire $x \mapsto v \cdot x$ sur \mathbb{R}^n (produit scalaire par v). L'application $v \mapsto \xi_v$ est donc l'identification usuelle entre \mathbb{R}^n et son dual. Rappelons que, pour $x \in M$, $P(x)$ désigne le projecteur orthogonal de \mathbb{R}^n sur l'espace tangent T_xM . C'est en particulier un endomorphisme de T_xM , et pour tout vecteur $v \in T_xM$, on a $P(x)(v) = v$. Sa matrice dans la base $(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)$ sera

notée $(P_{ij}(x))$. Puisque la variété M est différentiable, l'application $x \mapsto P(x)$ est différentiable de M dans l'espace des matrices $M_n(\mathbb{R})$.

Pour tout $v = \sum_j v_j \varepsilon_j \in T_x M$, on a donc $\sum_j P_{ij}(x) v_j = v_i$ pour tout i . Les matrices des dérivées $\partial P(x)/\partial x_k$ satisfont aussi à une propriété de symétrie que nous allons détailler. Soit x_o un point quelconque de M et soit $\gamma(t)$ une courbe différentiable tracée sur M issue de x_o . On a donc $\gamma(0) = x_o$ et $v := \gamma'(0) \in T_{x_o} M$. Pour tout t on a ainsi $\sum_j P_{ij}(\gamma(t)) \gamma'(t)_j = \gamma'(t)_i$. En dérivant par rapport à t on obtient pour tout i , par dérivation composée,

$$\sum_{j,k} \frac{\partial P_{ij}}{\partial x_k}(\gamma(t)) \gamma'(t)_j \gamma'(t)_k + \sum_j P_{ij}(x) \gamma''(t)_j = \gamma''(t)_i,$$

et en $t = 0$ on en déduit

$$\sum_{j,k} \frac{\partial P_{ij}}{\partial x_k}(x_o) v_j v_k = \gamma''(0)_i - \sum_j P(x_o)_{ij} \gamma''(0)_j,$$

formule qui montre que, quelque soit $v \in T_{x_o} M$, le vecteur

$$\sum_i \left(\sum_{j,k} \frac{\partial P_{ij}}{\partial x_k}(x_o) v_j v_k \right) \varepsilon_i$$

est dans l'image de $\text{Id} - P(x_o)$, donc est orthogonal à $T_{x_o} M$. Par conséquent, pour tout $w \in T_{x_o} M$, la forme quadratique sur $T_{x_o} M$ définie par

$$Q_w(v, v) = \sum_i w_i \left(\sum_{j,k} \frac{\partial P_{ij}}{\partial x_k}(x_o) v_j v_k \right)$$

est nulle. Par polarisation on en déduit que, pour tous $u, v \in T_{x_o} M$, on a $Q_w(u, v) + Q_w(v, u) = 0$. Nous n'utiliserons l'annulation de cette forme tri-linéaire que pour les triplets u, v, w avec $w = v$, ce qui donne

$$(16) \quad \sum_{i,j,k} \frac{\partial P_{ij}}{\partial x_k}(x_o) v_i v_j u_k = - \sum_{i,j,k} \frac{\partial P_{ik}}{\partial x_j}(x_o) v_i v_j u_k$$

pour tout $x_o \in M$ et pour tous $u, v \in T_{x_o} M$.

Revenons maintenant aux géodésiques. L'équation des géodésiques signifie que la forme linéaire composée $\xi_{\gamma''(t)} \circ P(\gamma(t)) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ est nulle pour tout $t \in I$. On considère sur le fibré cotangent T^*M (défini par (14) et muni de la métrique induite par celle de $(\mathbb{R}^n)^*$) la fonction (*hamiltonien*)

$$H_M(x, \xi) = \frac{1}{2} \|\xi\|_{T^*M}^2.$$

On peut aussi l'écrire sous la forme

$$H_M(x, \xi) = \frac{1}{2} \|\xi \circ P(x)\|_{(\mathbb{R}^n)^*}^2$$

C'est donc la fonction $(y, \eta) \mapsto \frac{1}{2} \|\eta\|_{(\mathbb{R}^n)^*}^2$ sur $\mathbb{R}^n \times (\mathbb{R}^n)^*$ que l'on induit sur le sous-ensemble T^*M .

Proposition 3.3. *On peut écrire l'équation des géodésiques (15) sous la forme du couple d'équations vectorielles de Hamilton*

$$(17) \quad \begin{cases} \frac{dx}{dt} = \frac{\partial H_M}{\partial \xi}(x, \xi), \\ \frac{d\xi}{dt} = -\frac{\partial H_M}{\partial x}(x, \xi) \end{cases}$$

Démonstration. La difficulté principale de cet énoncé vient de ce qu'il faut interpréter ces équations comme étant des équations sur la sous-variété T^*M et non comme des équations sur $\mathbb{R}^n \times (\mathbb{R}^n)^*$, ce qui était le cas à la proposition 1.4 du texte de F. Faure (ce volume).

En considérant une carte locale, il est clair que le vecteur $\partial H_M(x, \xi)/\partial \xi$ n'est autre que ξ . En particulier, par l'identification de $T_x M$ et $T_x^* M$ par $v \mapsto \xi_v = v \cdot$ (produit scalaire avec v), on a $\partial H_M(x, \xi_v)/\partial \xi = v$. Par cette identification on a aussi

$$H_M(x, \xi_v) = \frac{1}{2} \|P(x)(v)\|_{\mathbb{R}^n}^2.$$

L'équation des géodésiques (15) peut se réécrire comme un système d'équations portant sur la courbe $(x(t) = \gamma(t), \xi_{\gamma'(t)})$ dans T^*M , pour tout $u \in T_{\gamma(t)} M$:

$$(18) \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{dx}{dt} = \gamma'(t) = \frac{\partial H_M}{\partial \xi}(x, \xi_{\gamma'(t)}), \\ \frac{d\xi_{\gamma'(t)}}{dt}(u) = \frac{d}{dt}(\xi_{\gamma'(t)} \circ P(\gamma(t))(u)) \\ \quad = \frac{d}{dt}(\gamma'(t) \cdot P(\gamma(t))(u)) \\ \quad = \gamma''(t) \cdot P(\gamma(t))(u) + \gamma'(t) \cdot \frac{d}{dt}P(\gamma(t))(u) \\ \quad = 0 + \gamma'(t) \cdot \frac{d}{dt}P(\gamma(t))(u). \end{array} \right.$$

Ce dernier terme s'écrit

$$(19) \quad \sum_{i,j,k} \frac{\partial P_{ij}}{\partial x_k}(\gamma(t)) \cdot \gamma'(t)_i \cdot \gamma'(t)_k \cdot u_j.$$

Pour faire apparaître ceci comme une équation de Hamilton, il reste à voir que ce terme s'identifie à $-\partial H_M/\partial x(u)$, en particulier il faut comprendre ce que veut dire cette dérivée partielle en x « à ξ fixé ». Plaçons-nous au voisinage du temps $t = 0$ (par exemple) et identifions tous les T_x^*M avec $T_{\gamma(0)}M$, par l'application $v \in T_{\gamma(0)}M \mapsto \xi_v|_{T_x^*M}$. Une variation de x « à ξ constant » signifiera que l'élément v de $T_{\gamma(0)}M$ reste constant. Calculons alors, en $x_o = \gamma(0)$, $v = \gamma'(0)$,

$$\begin{aligned} -\frac{\partial H_M}{\partial x}(x_o, \xi_v)(u) &= -\sum_k u_k \frac{\partial H_M}{\partial x_k}(x_o, \xi_v) \\ &= -\sum_k u_k \cdot \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \|P(x)(v)\|_{x=x_o}^2 \\ &= -\sum_k u_k P(x_o)(v) \cdot \left(\frac{\partial P}{\partial x_k}(x_o)(v) \right). \end{aligned}$$

Puisque $v \in T_{x_o}M$, on a $P(x_o)(v) = v$, donc

$$P(x_o)(v) \cdot \left(\frac{\partial P}{\partial x_k}(x_o)(v) \right) = \sum_{i,j} \frac{\partial P_{ij}}{\partial x_k}(x_o) v_i v_j,$$

de sorte que, finalement,

$$(20) \quad -\frac{\partial H_M}{\partial x}(x_o, \xi_v)(u) = -\sum_{i,j,k} \frac{\partial P_{ij}}{\partial x_k}(x_o) \cdot v_i v_j u_k.$$

Par ailleurs, en $t = 0$, (19) s'écrit (en permutant la notation)

$$(21) \quad \sum_{i,j,k} \frac{\partial P_{ik}}{\partial x_j}(x_o) \cdot v_i v_j u_k.$$

L'identité voulue (21) = (20) n'est autre que l'identité (16) déjà observée. \square

Définition 3.4. Le *flot géodésique* est la famille de difféomorphismes $(\phi^t)_{t \in \mathbb{R}} : T^*M \rightarrow T^*M$ telle que, pour tout $(x_0, \xi_0) \in T^*M$, $t \mapsto \phi^t(x_0, \xi_0)$ est la solution du système d'équations différentielles (17) avec $\phi^0(x_0, \xi_0) = (x_0, \xi_0)$.

La propriété de *flot* signifie que

$$\phi^{t+s} = \phi^t \circ \phi^s$$

pour tous $t, s \in \mathbb{R}$, et ϕ^0 est l'identité; ceci provient simplement du fait que $(\phi^t)_{t \in \mathbb{R}}$ est le flot des solutions d'une équation différentielle à coefficients indépendants du temps.

Exemple 3.5. Supposons que $M = \mathbb{R}^d$. L'équation (15) s'écrit $\gamma''(t) = 0$, les géodésiques sont donc les droites parcourues à vitesse constante (on omet ici le cas trivial où la vitesse est nulle, et où bien sûr l'image géométrique de la courbe est réduite à un point). Le système (17) s'écrit

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \xi, \\ \frac{d\xi}{dt} = 0. \end{cases}$$

Le flot géodésique admet donc l'expression très simple

$$\phi^t(x, \xi) = (x + t\xi, \xi).$$

On reconnaît d'ailleurs l'expression que l'on a utilisée dans le cas du tore, après passage au quotient.

Exemple 3.6. Supposons que $M = \mathbb{S}^d$. Les courbes tracées sur \mathbb{S}^d , dont l'accélération est normale à \mathbb{S}^d , sont des cercles de rayon 1, parcourus à vitesse constante (on omet ici encore le cas trivial où la vitesse est nulle, et où l'image géométrique de la courbe est réduite à un point). Si $x \in \mathbb{S}^d$ et $\xi \neq 0$ est cotangent à \mathbb{S}^d en x , la géodésique issue de (x, ξ) est l'intersection de \mathbb{S}^d avec le plan contenant ξ et passant par l'origine. Sur la sphère, on voit donc que toutes les géodésiques sont des courbes fermées. Les variétés qui ont cette propriété s'appellent *variétés de Zoll*.

Forme volume et structure hilbertienne

Soit $\Omega \subset M$ un ouvert borné de M . Pour $\varepsilon > 0$, notons $\Omega^\varepsilon \subset \mathbb{R}^n$ l'ensemble des points qui sont à distance inférieure à ε de Ω . Pour ε assez petit, pour tout $x \in \Omega^\varepsilon$, il existe un unique $y \in M$ tel que $x - y \perp T_y M$ (si M est un sous-espace affine, y est le projeté orthogonal de x sur M , et si M est une sous-variété quelconque, cela se démontre grâce au théorème des fonctions implicites). On notera $y = P_M x$.

Soit f une fonction $M \rightarrow \mathbb{R}$, continue à support compact contenu dans Ω . Considérons la fonction $f_0 = f \circ P_M$ sur Ω^ε . On peut montrer que la limite

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon^{-(n-d)} \int_{\Omega^\varepsilon} f_0 d\ell^n$$

existe (avec $d\ell^n = dx_1 \cdots dx_n$ la mesure de Lebesgue n -dimensionnelle). Cette limite est notée

$$\int_M f(y) d\text{Vol}(y),$$

et $d\text{Vol}(y)$ s'appelle la mesure de volume riemannien sur M (dans le cas où M est une sphère, cet objet a été noté $d\sigma_d$ plus haut).

On introduit le produit scalaire hermitien

$$\langle f, g \rangle = \int_M \overline{f(x)} g(x) d\text{Vol}(x)$$

et la norme associée,

$$\|f\|_2 = \sqrt{\langle f, f \rangle}.$$

Le complété de $C^0(M)$ pour cette norme est noté $L^2(M)$, c'est un espace de Hilbert.

Laplacien

Il existe un unique opérateur différentiel Δ_M d'ordre 2 sur M tel que

$$\int_M \Delta_M f(x) g(x) d\text{Vol}(x) = - \int_M \nabla f(x) \cdot \nabla g(x) d\text{Vol}(x)$$

pour toutes fonctions f, g sur M , de classe C^2 et nulles en dehors d'un compact de M . On l'appelle le *laplacien* sur M ou *opérateur de Laplace-Beltrami*. La preuve de l'existence et de l'unicité peut se faire en calculant l'expression de Δ_M dans des cartes. Plus intuitivement, le laplacien peut aussi être défini ainsi : si f est à support compact, on pose $f_0 = f \circ P_M$, fonction définie sur un ouvert de \mathbb{R}^n , et $\Delta_M f$ est défini comme la restriction à M de la fonction $\Delta_{\mathbb{R}^n} f_0$.

Si f n'est pas à support compact, on peut définir en chaque $x \in M$ la valeur $\Delta_M f(x)$ comme étant $\Delta_M(\chi f)(x)$, où χ est une fonction C^∞ à support compact, constante égale à 1 au voisinage de x .

Théorème de diagonalisation du laplacien

Le théorème de diagonalisation du laplacien, que l'on a énoncé sur le tore et sur la sphère, en donnant explicitement les valeurs propres et les vecteurs propres, s'étend à toute variété compacte (voir, par exemple, [Eva10]) :

Théorème 3.7. *Soit M une variété riemannienne compacte. Alors les valeurs propres ordonnées de $-\Delta_M$ forment une suite (λ_n) de réels*

positifs tendant vers $+\infty$. De plus, il existe une famille $(\phi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de fonctions propres de $-\Delta_M$ qui forme une base hilbertienne de l'espace de Hilbert $L^2(M)$ (de manière équivalente, les combinaisons linéaires finies des $(\phi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ sont denses dans $C^0(M)$).

3.2. Le théorème d'ergodicité quantique pour les fonctions propres du laplacien

Dans le théorème ci-dessous, on note

$$N(E) = \#\{n \mid \lambda_n \leq E\}$$

le nombre de valeurs propres de Δ_M inférieures à E , comptées avec leur multiplicité. Pour $x \in M$, on note $S_x^*M \subset T_x^*M$ la sphère unité,

$$S_x^*M = \{\xi \in T_x^*M \mid \|\xi\| = 1\}$$

et $d\sigma_x$ la mesure de volume sur la sphère S_x^*M . À partir de maintenant on normalise $d\text{Vol}(x)$ et $d\sigma_x$ en les multipliant par des constantes positives, choisies de sorte que

$$\int_M d\text{Vol}(y) = 1 \quad \text{et} \quad \int_{S_x^*M} d\sigma_x(\omega) = 1$$

pour tout x . La mesure $d\text{Vol}(x)d\sigma_x(\omega)$ ($x \in M, \omega \in S_x^*M$), appelée mesure de Liouville, est la mesure uniforme sur les couples (x, ω) .

Théorème 3.8 ([Šni74, Zel87, CdV85]). *Soit M une variété riemannienne compacte, et soit Δ_M l'opérateur de Laplace-Beltrami sur M . Soit $(\phi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une base hilbertienne de $L^2(M)$ formée de fonctions propres du laplacien :*

$$\Delta\phi_n = -\lambda_n\phi_n$$

que l'on supposera ordonnée de sorte que $\lambda_n \leq \lambda_{n+1}$.

Soit $a \in C_c^\infty(T^*M)$. **Supposons le flot géodésique ergodique.** Alors

$$\lim_{E \rightarrow +\infty} \frac{1}{N(E)} \sum_{\substack{n \\ \lambda_n \leq E}} \left| \langle \phi_n, \text{Op}_{E^{-1/2}}(a)\phi_n \rangle - \int_{x \in M, \omega \in S_x^*M} a(x, E^{-1/2}\lambda_n^{1/2}\omega) d\text{Vol}(x)d\sigma_x(\omega) \right|^2 = 0.$$

L'hypothèse absolument cruciale de ce théorème est l'ergodicité du flot géodésique ; nous définirons ce terme dans un instant (rappelons aussi que des exemples de flots ergodiques ont été introduits dans le texte de F. Faure, au § 2, dans ce volume). Mais auparavant, essayons

de donner à cet énoncé une allure un peu plus sympathique. Pour cela, pour $\delta > 0$ fixé, on peut appliquer le théorème à une fonction \tilde{a} , à support dans l'ensemble

$$\{(x, \xi) \mid x \in M, \xi \in T_x^*M, \|\xi\| \in [1/2 - 2\delta, 3/2 + 2\delta]\},$$

et qui vérifie la propriété

$$\tilde{a}(x, t\omega) = a(x, \omega)$$

pour tout $t \in [1/2 - \delta, 3/2 + \delta]$ et ω de norme 1. Remarquons que les expressions se simplifient un peu :

$$\int \tilde{a}(x, E^{-1/2}\lambda_n^{1/2}\omega) d\text{Vol}(x) d\sigma_x(\omega) = \int a(x, \omega) d\text{Vol}(x) d\sigma_x(\omega)$$

dès que $E^{-1/2}\lambda_n^{1/2} \in [1/2 - \delta, 3/2 + \delta]$, et on pourrait montrer que

$$\langle \phi_n, \text{Op}_{E^{-1/2}}(\tilde{a})\phi_n \rangle = \langle \phi_n, \text{Op}_{\lambda_n^{-1/2}}(a)\phi_n \rangle + o(1)$$

dès que $E^{-1/2}\lambda_n^{1/2} \in [1/2, 3/2]$. Ainsi le théorème admet la variante suivante, peut-être plus agréable à lire :

Théorème 3.9 ([Šni74, Zel87, CdV85]). *Soit M une variété riemannienne compacte, et soit Δ_M l'opérateur de Laplace-Beltrami sur M . Soit $(\phi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une base hilbertienne de $L^2(M)$ formée de fonctions propres du laplacien :*

$$\Delta\phi_n = -\lambda_n\phi_n,$$

que l'on supposera ordonnée de sorte que $\lambda_n \leq \lambda_{n+1}$.

Soit $a \in C_c^\infty(T^*M)$. Supposons le flot géodésique ergodique. Alors

$$(22) \quad \lim_{E \rightarrow +\infty} \frac{1}{N(3E/2) - N(E/2)} \sum_{\substack{n \\ E/2 \leq \lambda_n \leq 3E/2}} \left| \langle \phi_n, \text{Op}_{\lambda_n^{-1/2}}(a)\phi_n \rangle - \int_{\substack{x \in M \\ \omega \in S_x^*M}} a(x, \omega) d\text{Vol}(x) d\sigma_x(\omega) \right|^2 = 0.$$

Comme cas particulier, en appliquant le théorème 3.9 à des symboles du type $a(x)\chi(\|\xi\|^2)$, on obtient :

Théorème 3.10. *Soit M une variété riemannienne compacte, et soit Δ_M l'opérateur de Laplace-Beltrami sur M . Soit $(\phi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une base hilbertienne de $L^2(M)$ formée de fonctions propres du laplacien :*

$$\Delta\phi_n = -\lambda_n\phi_n,$$

que l'on supposera ordonnée de sorte que $\lambda_n \leq \lambda_{n+1}$.

Soit $a \in C^\infty(M)$. Supposons le flot géodésique ergodique. Alors

$$\lim_{E \rightarrow +\infty} \frac{1}{N(E)} \sum_{\substack{n \\ \lambda_n \leq E}} \left| \langle \phi_n, a\phi_n \rangle - \int_M a(x) d\text{Vol}(x) \right|^2 = 0.$$

Nous définirons ici l'ergodicité par l'égalité (presque sûre) des moyennes temporelles et spatiales : pour $(x, \xi) \in T^*M$ et $T > 0$, définissons

$$\langle a \rangle_T(x, \xi) = \frac{1}{T} \int_0^T a(\phi^t(x, \xi)) dt.$$

On dira que le flot géodésique est ergodique si, pour *Lebesgue presque tout* $(x_0, \xi_0) \in T^*M$, et pour toute fonction a continue sur T^*M , on a

$$(23) \quad \lim_{T \rightarrow +\infty} \langle a \rangle_T(x_0, \xi_0) = \int_{\substack{x \in M \\ \omega \in S_x^*M}} a(x, \|\xi_0\| \omega) d\text{Vol}(x) d\sigma_x(\omega).$$

On remarque que l'intégrale (23) porte sur les vecteurs de même vitesse que la condition initiale ξ_0 , ce qui est naturel puisque les trajectoires de ϕ^t sont à vitesse constante.

On parle d'*unique ergodicité* quand l'identité (23) est valable pour tous les (x_0, ξ_0) tels que $\xi_0 \neq 0$. Cependant l'étude d'exemples montre que cette propriété plus forte n'est pas aussi intéressante qu'il n'y paraît : les systèmes dynamiques dits *chaotiques*, qui nous intéressent ici en premier lieu, ne sont pas uniquement ergodiques car ils possèdent une infinité de trajectoires périodiques.

La preuve du théorème 3.8 est à peu près identique à celle du théorème 1.4 une fois que l'on parle le langage des variétés. Contentons-nous d'en rappeler les principaux ingrédients. Ce sont les règles du calcul pseudo-différentiel qu'il faut adapter aux variétés, en particulier :

- le théorème d'Egorov reliant le laplacien Δ_M et le flot géodésique :

$$(24) \quad e^{itH/\hbar} \text{Op}_\hbar(a) e^{-itH/\hbar} = \text{Op}_\hbar(a \circ \phi^t) + O_t(\hbar),$$

où $H = -\hbar^2 \Delta/2$.

- le calcul fonctionnel : plus précisément, le fait que l'opérateur $\chi(-\hbar^2 \Delta_M)$, défini par

$$\chi(-\hbar^2 \Delta_M) \phi_n = \chi(\hbar^2 \lambda_n) \phi_n,$$

pour $\chi \in C_c^\infty(\mathbb{R})$, est un opérateur pseudo-différentiel qui coïncide avec $\text{Op}_\hbar(\chi(\|\xi\|^2))$ à $O(\hbar)$ près.

Remarquons la dépendance du reste $O_t(\hbar)$ dans le théorème d'Egorov. Dans le cadre euclidien, cette dépendance était linéaire $O_t(\hbar) = O(|t|\hbar)$. Sur une variété compacte quelconque, il faut plutôt s'attendre à une dépendance exponentielle, $O_t(\hbar) = O(e^{\lambda|t|\hbar})$, où $\lambda > 0$ est un *exposant de Lyapounov* qui mesure la sensibilité aux conditions initiales des solutions de l'équation des géodésiques (17). Cette dépendance exponentielle ne pose aucun problème dans notre preuve, car nous commençons par considérer la limite $\hbar \rightarrow 0$ à t fixé. Cependant, dès que l'on veut attaquer des questions plus fines, telles que la vitesse de convergence vers 0 dans le théorème d'ergodicité quantique, ou l'*unique ergodicité quantique* abordée plus bas, la dépendance exponentielle en temps des restes est un problème majeur.

On utilise encore les points suivants :

- Si $a \in C_c^\infty(T^*M)$, alors $\text{Op}_\hbar(a)$ est un opérateur de Hilbert-Schmidt et on a

$$(25) \quad \|\text{Op}_\hbar(a)\|_{\text{HS}}^2 \sim_{\hbar \rightarrow 0} (2\pi\hbar)^{-d} \int_{T^*M} |a(x, \xi)|^2 d\text{Vol}(x) d\ell_x(\xi),$$

où ℓ_x est la mesure de Lebesgue sur T_x^*M .

- (Loi de Weyl)

$$N(E) \sim_{E \rightarrow +\infty} (2\pi)^{-d} \text{Vol}(M) \text{Vol}_{\mathbb{R}^d}(B(0, 1)) E^{d/2}.$$

La loi de Weyl peut être obtenue comme corollaire de la formule (25), appliquée à $\text{Op}_\hbar(a) = \chi^2(-\hbar^2\Delta)$, avec $\hbar = E^{-1/2}$, et en raisonnant comme dans la remarque 1.3.

Une fois ces ingrédients réunis, la preuve des théorèmes 3.8 ou 3.9 est identique à celle du théorème 1.4, à ceci près qu'elle s'applique à des fonctions a dépendant à la fois de x et de ξ , parce que l'on a supposé l'ergodicité du flot géodésique (qui n'était pas vérifiée dans le cas du tore).

Remarque 3.11. On peut voir assez facilement qu'un énoncé tel que celui du théorème 3.9 est impossible sur le tore. Ceci est lié au fait que le laplacien commute avec les opérateurs $\partial/\partial x_j$ ($j = 1, \dots, d$). Considérons la base des fonctions $(e_k)_{k \in \mathbb{Z}^d}$ ($e_k(x) = e^{ik \cdot x}$), qui sont en fait des fonctions propres communes à tous les opérateurs $\partial/\partial x_j$ ($j = 1, \dots, d$). Les valeurs propres de $-\Delta_{\mathbb{T}^d}$ sont les $\lambda_n = \|k\|^2$, et donc $\lambda_n^{-1/2} = \|k\|^{-1}$. Comme $\text{Op}_\hbar(a)e_k(x) = a(x, \hbar k)e_k(x)$, on

constate que l'on a la formule exacte

$$\begin{aligned} \langle e_k, \text{Op}_{\|k\|^{-1}}(a(x, \xi))e_k \rangle &= \langle e_k, \text{Op}_{\|k\|^{-1}}(a(x, k/\|k\|))e_k \rangle \\ &= \int_{\mathbb{T}^d} a(x, k/\|k\|) dx. \end{aligned}$$

On n'a aucune chance de trouver une suite de vecteurs k_l tels que

$$\int_{\mathbb{T}^d} a(x, k_l/\|k_l\|) dx \longrightarrow \int a(x, \omega) dx d\sigma_x(\omega)$$

pour toute fonction a , où $\sigma_x = \sigma_{d-1}$ est la mesure de volume $(d-1)$ -dimensionnel sur \mathbb{S}^{d-1} . En effet, dès que $k_l/\|k_l\| \rightarrow k_\infty \in \mathbb{S}^{d-1}$, on a $\int_{\mathbb{T}^d} a(x, k_l/\|k_l\|) dx \rightarrow \int_{\mathbb{T}^d} a(x, k_\infty) dx$.

Cette remarque est aussi valable pour le laplacien sur la sphère \mathbb{S}^d . On remarque que $\Delta_{\mathbb{S}^d}$ commute avec tous les opérateurs $J_{kl} = \frac{1}{i}(x_l \partial/\partial x_k - x_k \partial/\partial x_l)$ ($k, l = 1, \dots, d+1, k \neq l$). Ces opérateurs sont ceux qui engendrent les rotations, au sens suivant : prenant par exemple $(k, l) = (1, 2)$, pour une fonction a de classe C^1 , on a

$$\begin{aligned} J_{12}a(x_1, x_2, x_3, \dots, x_{d+1}) \\ = \frac{\partial}{\partial \theta} \Big|_{\theta=0} a(\cos \theta x_1 + \sin \theta x_2, -\sin \theta x_1 + \cos \theta x_2, x_3, \dots, x_{d+1}). \end{aligned}$$

L'opérateur J_{12} est celui qui correspond à l'observable classique

$$J_{12}(x, \xi) = x_2 \xi_1 - x_1 \xi_2 \quad (x = (x_1, \dots, x_{d+1}), \xi = (\xi_1, \dots, \xi_{d+1})).$$

Prenons alors pour (ϕ_n) une suite de fonctions propres communes à $\Delta_{\mathbb{S}^d}$ et à J_{12} :

$$-\Delta_{\mathbb{S}^d} \phi_n = \lambda_n \phi_n, \quad J_{12} \phi_n = \mu_n \phi_n.$$

On montre que $\mu_n/\sqrt{\lambda_n}$ est une quantité bornée, à partir du fait que la fonction $(x, \xi) \mapsto J_{12}(x, \xi)/\|\xi\|$ est bornée pour $x \in \mathbb{S}^d, \xi \in T_x^* \mathbb{S}^d$. Ainsi, en extrayant une sous-suite, on peut supposer que $\mu_n/\sqrt{\lambda_n}$ a une limite quand $n \rightarrow +\infty$.

Par ailleurs, si a et b sont deux fonctions qui coïncident au voisinage de l'ensemble

$$\{(x, \xi) \mid \|\xi\| = 1, J_{12}(x, \xi) = \mu_n/\sqrt{\lambda_n}\},$$

on montre pour la suite (ϕ_n) introduite ci-dessus que

$$\langle \phi_n, \text{Op}_{\lambda_n^{-1}}(a)\phi_n \rangle_{L^2(\mathbb{S}^d)} = \langle \phi_n, \text{Op}_{\lambda_n^{-1}}(b)\phi_n \rangle_{L^2(\mathbb{S}^d)} + o(1)_{n \rightarrow +\infty}.$$

Ceci suffit à conclure qu'on ne peut pas extraire de sous-suite telle que

$$\langle \phi_n, \text{Op}_{\lambda_n^{-1}}(a)\phi_n \rangle_{L^2(\mathbb{S}^d)} \longrightarrow \int a(x, \omega) d\text{Vol}(x) d\sigma_x(\omega)$$

pour tout a .

4. La conjecture d'unique ergodicité quantique

4.1. Énoncé de la conjecture et des résultats de Lindentrauss

Grâce à l'argument déjà utilisé pour démontrer le corollaire 1.5 dans le cas du tore, le théorème 3.9 peut se reformuler en disant qu'il existe un sous-ensemble $S \subset \mathbb{N}$ tel que

- $\frac{\#\{n \in S \mid \lambda_n \leq E\}}{N(E)} \xrightarrow{E \rightarrow +\infty} 1$.
- Si l'on pose $h_n = \lambda_n^{-1/2}$, on a

$$\lim_{n \rightarrow +\infty, n \in S} \langle \phi_n, \text{Op}_{h_n}(a)\phi_n \rangle = \int_{\substack{x \in M \\ \omega \in S_x^* M}} a(x, \omega) d\text{Vol}(x) d\sigma_x(\omega).$$

Un procédé d'extraction diagonale permettrait en fait de choisir l'ensemble S indépendant de la fonction a .

Une question tout-à-fait naturelle est de savoir si

$$(26) \quad \lim_{n \rightarrow +\infty} \langle \phi_n, \text{Op}_{h_n}(a)\phi_n \rangle = \int a(x, \omega) d\text{Vol}(x) d\sigma_x(\omega)$$

pour tout a (sans avoir à extraire de sous-suite), ou, au contraire, s'il existe des suites croissantes d'entiers (n_k) telles que $\langle \phi_{n_k}, \text{Op}_{h_{n_k}}(a)\phi_{n_k} \rangle$ converge vers une limite autre. Il est certain que la réponse dépend des caractéristiques géométriques de la variété M , et en particulier de propriétés du flot géodésique plus fines que l'ergodicité, mais on est loin d'une compréhension satisfaisante de cette question.

On parle d'*unique ergodicité quantique* si la limite (26) a lieu sans avoir à extraire de sous-suite. Selon la conjecture de Rudnick et Sarnak (*conjecture d'unique ergodicité quantique*), cette propriété devrait être satisfaite quand M est une variété compacte de courbure négative [RS94]. L'intuition sur laquelle s'appuie cette conjecture? Ce seraient les très fortes propriétés de mélange du flot géodésique (voir le § 2.2 du texte de F. Faure, dans ce volume) qui empêcheraient les fonctions d'ondes de se localiser dans de petites régions de l'espace

des phases. Cet argument reste vague : le problème est que la propriété d'Egorov (24), qui fait le lien entre la dynamique quantique et le flot géodésique, n'est pas uniforme en temps, et que l'utilisation de la propriété de mélange nécessiterait l'interversion des deux limites $h \rightarrow 0$ et $t \rightarrow +\infty$.

Tout le monde n'est en fait pas convaincu de la validité de cette conjecture, qui reste ouverte à l'heure actuelle. Une avancée importante est due à Elon Lindenstrauss (médaille Fields 2010) dans le cas des *surfaces de congruences arithmétiques* [Lin06]. C'est ce cas particulier de la conjecture qui avait motivé Rudnick et Sarnak, spécialistes de théorie analytique des nombres plutôt que de systèmes dynamiques et d'équations aux dérivées partielles.

Nous nous contenterons d'évoquer superficiellement les travaux de Lindenstrauss [Lin06], qui utilisent des techniques tout autres que l'analyse micro-locale développée dans ce texte. Ceci illustre bien la richesse de ce sujet, motivé par la mécanique quantique et situé à la confluence de domaines très variés des mathématiques. Les surfaces de congruences arithmétiques sont des surfaces de courbure constante -1 , obtenues en quotientant le *demi-plan de Poincaré* par des groupes d'isométries très particuliers, construits à partir d'algèbres de quaternions sur \mathbb{Q} (on renvoie au livre récent de N. Bergeron [Ber11] pour la construction explicite, et pour une introduction plus détaillée aux techniques utilisées par Lindentrauss). Ces surfaces arithmétiques peuvent être compactes ou non compactes (c'est le cas notamment de la surface modulaire). Dans ce texte, nous avons traité uniquement le cas des variétés compactes, mais les questions se posent aussi, avec des difficultés différentes, dans le cas non compact.

Les surfaces arithmétiques présentent la particularité de posséder une famille dénombrable d'opérateurs *de Hecke* (T_p), indexée par les nombres premiers p , agissant sur $L^2(M)$ de façon auto-adjointe, qui commutent entre eux ainsi qu'avec Δ_M . L'opérateur T_p est en fait le laplacien associé à la structure p -adique sur M qui vient de sa construction arithmétique. Tous ces opérateurs commutent entre eux, on peut restreindre l'étude de l'ergodicité quantique aux fonctions propres communes à toute la famille. C'est pour de telles fonctions propres que Lindenstrauss a démontré (26) (c'est ce qu'on appelle

l'unique ergodicité quantique arithmétique). Plus récemment, Brooks et Lindenstrauss ont affaibli les hypothèses en supposant simplement que les ϕ_n sont fonctions propres de Δ_M et d'un seul opérateur T_p .

Ceci pose de nouveau la question de la multiplicité des valeurs propres de Δ_M . Si la multiplicité est 1, toute fonction propre de Δ_M est automatiquement fonction propre des opérateurs de Hecke, et il n'est pas restrictif de considérer des fonctions propres communes. Mais si la multiplicité des valeurs propres n'est pas bornée, on peut imaginer qu'en changeant de base de fonctions propres on observe un comportement différent de la limite (26). La meilleure borne connue sur la multiplicité est

$$m(\lambda) = O\left(\frac{\sqrt{\lambda}}{\log \lambda}\right),$$

borne générale pour les surfaces de courbure négative; pour les surfaces arithmétiques on ne sait guère mieux.

Le lecteur intéressé par le cas des surfaces de courbure négative, et tout particulièrement par les aspects arithmétiques, pourra consulter les articles de survol [Sar03, Sar11] de Peter Sarnak.

4.2. Résultats plus généraux

Soit M une variété riemannienne compacte, et soit (ϕ_n) une suite de fonctions propres de Δ_M , normalisées dans $L^2(M)$. Un argument de compacité permet d'affirmer, quitte à extraire une sous-suite, que la limite de $\langle \phi_{n_k}, \text{Op}_{h_{n_k}}(a)\phi_{n_k} \rangle$ existe pour tout $a \in C_c^\infty(T^*M)$ et qu'elle est de la forme

$$\int a(x, \omega) \mu(dx, d\omega),$$

où μ est une mesure de probabilité sur

$$S^*M = \{(x, \omega) \mid x \in M, \omega \in S_x^*M\}.$$

Dans la littérature, ces mesures μ sont désignées, selon les auteurs, par le terme de *mesures semi-classiques*, *mesures de Wigner*, *mesures de défaut*, *limites quantiques* associées à la suite de fonctions propres (ϕ_{n_k}) . Certaines de leurs propriétés ont été discutées au § 4.3 du texte de C. Fermanian (ce volume).

Le théorème d'Egorov, associé à la remarque selon laquelle

$$\langle \phi_n, \text{Op}_{h_n}(a)\phi_n \rangle = \langle \phi_n, e^{-ith_n\Delta_M/2} \text{Op}_{h_n}(a) e^{ith_n\Delta_M/2} \phi_n \rangle$$

pour tout t , implique que

$$\int a \circ \phi^t(x, \omega) \mu(dx, d\omega) = \int a(x, \omega) \mu(dx, d\omega)$$

pour tout a et pour tout t . Autrement dit, le mesure μ est *invariante* par transport par le flot géodésique. Selon la conjecture d'unique ergodicité quantique, sur une variété compacte de courbure négative, la seule mesure μ qu'on puisse obtenir de la sorte est la mesure uniforme, $d\text{Vol}(x)d\sigma_x(\omega)$. Mais sans nécessairement chercher à démontrer la conjecture, on peut simplement vouloir comprendre certaines propriétés de ces mesures μ . Par exemple, il y a beaucoup de géodésiques périodiques, est-ce que μ peut-être concentrée sur une telle géodésique? Cette question, qui reste bien en deçà de la conjecture d'unique ergodicité quantique, était ouverte jusqu'en 2005.

Les travaux de Anantharaman et Nonnenmacher [Ana08, AN07] démontrent que l'entropie de Kolmogorov-Sinai d'une telle mesure μ est nécessairement non nulle, ce qui a pour conséquence que μ ne peut pas être concentrée sur un ensemble de dimension de Hausdorff 1. Par exemple, μ ne peut pas être concentrée sur une géodésique périodique (notre résultat donne en fait une borne inférieure explicite sur la dimension du support de μ).

Dans son texte, F. Faure a exposé le modèle du *chat*⁽²⁾ qui constitue le prototype du système dynamique chaotique ; du point de vue de la dynamique classique, ce système partage beaucoup de propriétés avec le flot géodésique des variétés de courbure négative : la principale différence réside dans le fait que c'est un modèle à temps discret, alors que le flot géodésique est un modèle à temps continu. Afin de tester les conjectures sur un modèle simple, plusieurs auteurs ont construit une version quantique du *chat* et ont montré une version du théorème d'ergodicité quantique dans ce cas (voir par exemple [BDB96]). Faure, Nonnenmacher et De Bièvre [FNDB03] ont démontré que, pour ce modèle, la conjecture d'unique ergodicité quantique n'est pas satisfaite : ils ont pu exhiber des suites de fonctions propres explicites dont la répartition asymptotique n'est pas donnée par la mesure uniforme. Il est intéressant de constater que, sur ces contre-exemples, la

⁽²⁾Ce nom fantaisiste n'a rien à voir avec l'expérience du chat de Schrödinger. Il vient d'un dessin paru dans le livre d'Arnold et Avez [AA67], qui représente l'action de ce système dynamique sur une tête de chat.

mesure μ possède une entropie qui est exactement la borne inférieure du théorème de Anantharaman-Nonnenmacher [AN07].

Finalement, comment concilier le contre-exemple de Faure, Nonnenmacher et De Bièvre [FNDB03] et l'envie de croire à la conjecture de Rudnick et Sarnak ? On peut dire que la construction du modèle quantique du *chat* paraît un peu spéciale, et croire que la conjecture est valable pour des systèmes *génériques*, ce qui autorise des exceptions un peu spéciales.

4.3. Retour sur le cas du tore

Résumons la situation : sur la sphère on a une suite de fonctions propres qui se concentre sur l'équateur. Sur une surface de courbure négative une suite de fonctions propres ne peut pas se concentrer complètement sur une géodésique fermée [AN07], et sur le tore une suite de fonctions propres ne peut pas se concentrer du tout sur une géodésique fermée.

Pour revenir au le cas du tore traité au § 1, on rappelle qu'on a énoncé un théorème de type *ergodicité quantique*, valable seulement pour des observables $a(x)$ (théorème 1.4). Ce théorème nous donne un comportement limite pour « la plupart » des fonctions propres de $\Delta_{\mathbb{T}^d}$. On peut à côté de cela poser la question de la description du comportement asymptotique de suites *quelconques* de fonctions propres : soit (ϕ_n) une suite quelconque de fonctions propres, vérifiant donc $\Delta_{\mathbb{T}^d}\phi_n = -\lambda_n\phi_n$, $\lambda_n \rightarrow +\infty$, normalisées de sorte que $\int_{\mathbb{T}^d} |\phi_n(x)|^2 dx = 1$. Un argument de compacité permet de trouver une suite croissante d'entiers n_k , et une mesure de probabilité ν sur \mathbb{T}^d , tels que

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \langle \phi_{n_k}, a\phi_{n_k} \rangle = \int_{\mathbb{T}^d} a(x) d\nu(x)$$

pour toute fonction $a \in C^0(\mathbb{T}^d)$. Que peut-on dire d'une telle mesure ν ? est-ce que ν est nécessairement la mesure uniforme dx ?

La réponse est non : il suffit pour le voir de considérer des fonctions propres de la forme

$$\phi(x) = \frac{e^{ik \cdot x} + e^{i(k-m) \cdot x}}{\sqrt{2}}$$

avec m fixé, $\|k\| \rightarrow +\infty$, $\|k\| = \|k-m\|$ (par exemple, si l'on choisit k dont la première coordonnée est 1, ces relations sont vérifiées avec

$m = (2, 0, 0, \dots, 0)$). On a $|\phi(x)|^2 = 1 + \cos(m \cdot x)$ qui ne dépend pas de k , et donc la mesure ν correspondant à une telle famille est $d\nu(x) = (1 + \cos(m \cdot x))dx$.

Bourgain et Jakobson [Jak97] ont démontré plus généralement qu'une telle mesure ν avait nécessairement une densité,

$$d\nu(x) = \rho(x)dx,$$

où ρ est une fonction positive d'intégrale 1. De plus, si l'on note $\hat{\rho}(k)$ les coefficients de Fourier de ρ , on a

$$\sum_k |\hat{\rho}(k)|^{d-2} < +\infty.$$

Ainsi, en dimension $d = 2$, ρ est un polynôme trigonométrique, en dimension $d = 3$, ρ est une fonction continue... De plus, un résultat de Jaffard dit que $\int_{\Omega} \rho(x)dx > 0$ pour tout ouvert non vide $\Omega \subset \mathbb{T}^d$. Ces résultats reposent sur la décomposition en série de Fourier (2) et une étude fine des propriétés des points entiers sur les sphères. Les articles [Mac10, AM14] donnent une nouvelle preuve de ces résultats, qui s'appuie sur l'analyse micro-locale.

En dimension $d = 2$, il est assez aisé de démontrer l'existence d'une densité $\rho \in L^2(\mathbb{T}^d)$ telle que $d\nu(x) = \rho(x)dx$. Nous donnons ci-dessous l'argument, dû à Zygmund [Zyg74]. Repartons de l'expression (2) des fonctions propres :

$$(27) \quad f(x) = \sum_{\substack{k \in \mathbb{Z}^d \\ \|k\|^2 = \lambda}} c_k e^{ik \cdot x},$$

avec ici $d = 2$. On a alors

$$|f(x)|^2 = \sum_{\substack{k, m \in \mathbb{Z}^2 \\ \|k\|^2 = \|m\|^2 = \lambda}} \bar{c}_k c_m e^{i(m-k) \cdot x}.$$

Rappelons la notation

$$\|f\|_2 = \left(\int_{\mathbb{T}^d} |f(x)|^2 dx \right)^{1/2}$$

et introduisons aussi

$$\|f\|_4 = \left(\int_{\mathbb{T}^d} |f(x)|^4 dx \right)^{1/4} = \| |f|^2 \|_2^{1/2}.$$

On a

$$\|f\|_4^4 = \| |f|^2 \|_2^2 = \sum_{j \in \mathbb{Z}^2} \left| \sum_{\substack{(k,m) \in \mathbb{Z}^2 \times \mathbb{Z}^2 \\ m-k=j \\ \|k\|^2 = \|m\|^2 = \lambda}} \overline{c_k} c_m \right|^2$$

en appliquant la formule de Parseval à la fonction $x \mapsto |f(x)|^2$. Or, on remarque qu'à $j \neq 0$ donné, l'ensemble

$$\{(k, m) \in \mathbb{Z}^2 \times \mathbb{Z}^2 \mid m - k = j, \|k\|^2 = \|m\|^2 = \lambda\}$$

a au plus deux éléments, et ceci quel que soit λ . L'inégalité de Cauchy-Schwarz donne alors

$$\|f\|_{L^4}^4 \leq \left| \sum_{\substack{k \in \mathbb{Z}^2 \\ \|k\|^2 = \lambda}} \overline{c_k} c_k \right|^2 + 2 \sum_{j \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{0\}} \sum_{\substack{(k,m) \in \mathbb{Z}^2 \times \mathbb{Z}^2 \\ m-k=j \\ \|k\|^2 = \|m\|^2 = \lambda}} |\overline{c_k} c_m|^2,$$

le premier terme provenant du cas $j = 0$. Enfin, toujours par Parseval

$$\left| \sum_{\substack{k \in \mathbb{Z}^2 \\ \|k\|^2 = \lambda}} \overline{c_k} c_k \right|^2 = \|f\|_{L^2}^4$$

$$\text{et } 2 \sum_{j \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{0\}} \sum_{\substack{(k,m) \in \mathbb{Z}^2 \times \mathbb{Z}^2 \\ m-k=j \\ \|k\|^2 = \|m\|^2 = \lambda}} |\overline{c_k} c_m|^2 \leq 2 \left(\sum_{k \in \mathbb{Z}^2} |c_k|^2 \right)^2 = 2 \|f\|_{L^2}^4.$$

On a ainsi prouvé que, pour toute fonction propre f du laplacien sur \mathbb{T}^2 , on a

$$\|f\|_4^4 \leq 3 \|f\|_2^4.$$

Supposons, comme d'habitude, que (ϕ_n) est une suite de fonctions propres normalisées dans L^2 : $\|\phi_n\|_{L^2} = 1$. Les fonctions $(|\phi_n|^2)$ sont alors elles-mêmes de norme L^2 inférieure à $3^{1/4}$, de sorte que, par l'inégalité de Cauchy-Schwarz,

$$\left| \int_{\mathbb{T}^2} a(x) |\phi_n(x)|^2 dx \right| \leq 3^{1/4} \left(\int_{\mathbb{T}^2} |a(x)|^2 dx \right)^{1/2}$$

pour toute fonction a continue. Ainsi, si

$$\int_{\mathbb{T}^2} a(x) |\phi_n(x)|^2 dx \longrightarrow \int_{\mathbb{T}^2} a(x) d\nu(x),$$

où ν est une mesure positive sur \mathbb{T}^2 , on obtient par passage à la limite l'inégalité

$$\left| \int_{\mathbb{T}^2} a(x) d\nu(x) \right| \leq 3^{1/4} \left(\int_{\mathbb{T}^2} |a(x)|^2 dx \right)^{1/2}$$

pour toute fonction a continue. Ceci implique (théorème de Riesz) qu'il existe une fonction ρ telle que $d\nu(x) = \rho(x)dx$, qui vérifie de plus

$$\int_{\mathbb{T}^2} |\rho(x)|^2 dx \leq 3^{1/2}.$$

La preuve du résultat de Bourgain et Jakobson [Jak97], selon lequel ρ est en fait un polynôme trigonométrique, passe par des arguments de théorie des nombres autrement plus élaborés.

4.4. Le stade

Terminons par quelques images de fonctions propres du *stade*, sous-ensemble de \mathbb{R}^2 formé d'un rectangle auquel on accole deux demi-disques. Pour les ouverts bornés de \mathbb{R}^d , dont le bord est suffisamment régulier (et plus généralement, pour les variétés riemanniennes compactes à *bord*), le théorème 3.7 de diagonalisation reste valable, mais il faut imposer une condition aux limites. Les plus courantes sont la condition de Dirichlet,

$$\phi_n|_{\partial M} = 0$$

(on demande aux fonctions de s'annuler sur le bord de M) ou la condition de Neumann

$$\partial_\nu \phi_n|_{\partial M} = 0$$

(on demande à la dérivée normale de s'annuler sur le bord de M).

Le théorème d'ergodicité quantique 3.9 a été étendu à cette situation par Gérard et Leichtnam [GL93]. Pour un ouvert de \mathbb{R}^d , le flot géodésique est le flot géodésique euclidien $((x, \xi) \mapsto (x + t\xi, \xi))$ tant que la trajectoire ne touche pas le bord. Quand elle touche le bord, elle se réfléchit à angle égal : c'est ce qu'on appelle en mathématiques un *billard*. Des exemples de billards ergodiques, les billards dispersifs, ont été décrits au § 2.1 du texte de F. Faure (ce volume). Le billard en forme de stade n'est pas dispersif, néanmoins Sinai et Bunimovich ont pu démontrer à la fin des années 70 qu'il était ergodique. Ainsi, le théorème 3.9 s'y applique.

!htb

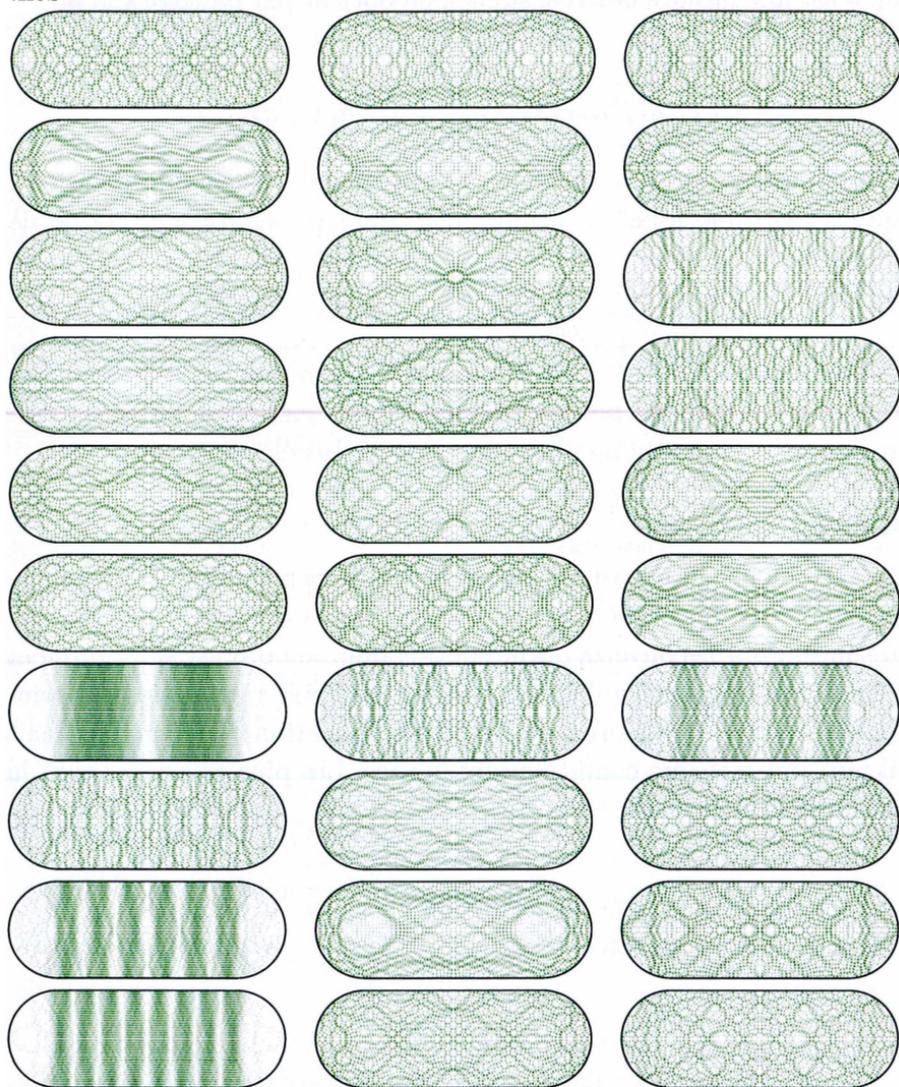


FIGURE 1. Représentation de $|\phi_n(x, y)|^2$ pour le stade avec symétrie impaire, pour 30 valeurs propres consécutives à partir de $n = 758$. Illustration produite par Arnd Bäcker.

Les images de la figure 1 ont été créées par Arnd Bäcker. Elles montrent trente fonctions propres impaires successives du stade (avec condition de Dirichlet), à partir de la 758ème valeur propre. En couleurs foncées, les endroits où le module de la fonction propre est

grand, en couleurs claires, là où il est petit. On y vérifie effectivement (du moins, visuellement) la conclusion du théorème 3.9 : la plupart des fonctions propres présentent une coloration à peu près uniforme. Cependant, il semble que l'on n'ait pas *unique ergodicité quantique* : certaines fonctions propres, rares certes, mais apparemment persistantes pour des fréquences arbitrairement grandes, ne présentent pas une distribution uniforme.

De manière surprenante (pour une géométrie aussi simple !), ceci est très difficile à démontrer, et ne l'est pas encore tout à fait à l'heure actuelle. Précisons qu'il n'est pas possible, même pour un exemple aussi simple, de calculer explicitement valeurs propres et fonctions propres. Il a fallu attendre 2008 pour le seul résultat rigoureux sur l'absence d'unique ergodicité quantique sur le stade. À cette date, Andrew Hassell a démontré qu'effectivement, il existe une suite de fonctions propres dont la distribution asymptotique n'est pas uniforme [Has10]. Mais il ne le démontre que pour *presque tout stade*. Qu'est-ce que cela veut dire ? Si l'on fixe le diamètre des demi-disques à 1, on peut encore faire varier l'autre longueur ℓ du rectangle. On a donc en fait toute une famille de stades. Hassell ne démontre son résultat que pour ℓ en dehors d'un ensemble de mesure nulle de \mathbb{R}^+ (non explicite toutefois). Cela veut dire que son résultat est démontré pour l'immense majorité des stades, mais que je ne peux pas vous dire s'il s'applique pour $\ell = 3$.

On renvoie à l'article en ligne [AB13] pour plus d'images.

Références

- [Ana08] N. ANANTHARAMAN – « Entropy and the localization of eigenfunctions », *Ann. of Math. (2)* **168** (2008), no. 2, p. 435–475.
- [AB13] N. ANANTHARAMAN & A. BÄCKER – « Quantum ergodicity and beyond – with a gallery of pictures », *IAMP News Bulletin* (April 2013).
- [AM14] N. ANANTHARAMAN & F. MACIÀ – « Semiclassical measures for the Schrödinger equation on the torus », *J. Eur. Math. Soc. (JEMS)* **16** (2014), no. 6, p. 1253–1288.
- [AN07] N. ANANTHARAMAN & S. NONNENMACHER – « Half-delocalization of eigenfunctions for the Laplacian on an Anosov manifold », *Ann. Inst. Fourier (Grenoble)* **57** (2007), no. 7, p. 2465–2523.
- [AA67] V. I. ARNOLD & A. AVEZ – *Problèmes ergodiques de la mécanique classique*, Monographies Internationales de Mathématiques Modernes, No. 9, Gauthier-Villars, Éditeur, Paris, 1967.
- [BG92] M. BERGER & B. GOSTIAUX – *Géométrie différentielle : variétés, courbes et surfaces*, 2^e éd., Presses Universitaires de France, Paris, 1992.

- [Ber11] N. BERGERON – *Le spectre des surfaces hyperboliques*, Savoirs Actuels, EDP Sciences, Les Ulis; CNRS Éditions, Paris, 2011.
- [BDB96] A. BOUZOUINA & S. DE BIÈVRE – « Equipartition of the eigenfunctions of quantized ergodic maps on the torus », *Comm. Math. Phys.* **178** (1996), no. 1, p. 83–105.
- [Eva10] L. C. EVANS – *Partial differential equations*, 2^e éd., Graduate Studies in Mathematics, vol. 19, American Mathematical Society, Providence, RI, 2010.
- [Far08] J. FARAUT – *Analysis on Lie groups. An introduction*, Cambridge Studies in Advanced Mathematics, vol. 110, Cambridge University Press, Cambridge, 2008.
- [FNDB03] F. FAURE, S. NONNENMACHER & S. DE BIÈVRE – « Scarred eigenstates for quantum cat maps of minimal periods », *Comm. Math. Phys.* **239** (2003), no. 3, p. 449–492.
- [GL93] P. GÉRARD & É. LEICHTNAM – « Ergodic properties of eigenfunctions for the Dirichlet problem », *Duke Math. J.* **71** (1993), no. 2, p. 559–607.
- [Has10] A. HASSELL – « Ergodic billiards that are not quantum unique ergodic », *Ann. of Math. (2)* **171** (2010), no. 1, p. 605–619.
- [Hej76] D. A. HEJHAL – *The Selberg trace formula for $PSL(2, R)$. Vol. I*, Lecture Notes in Mathematics, Vol. 548, Springer-Verlag, Berlin-New York, 1976.
- [Hux02] M. N. HUXLEY – « Integer points, exponential sums and the Riemann zeta function », in *Number theory for the millennium, II (Urbana, IL, 2000)*, A K Peters, Natick, MA, 2002, p. 275–290.
- [Jak97] D. JAKOBSON – « Quantum limits on flat tori », *Ann. of Math. (2)* **145** (1997), no. 2, p. 235–266.
- [Lin06] E. LINDENSTRAUSS – « Invariant measures and arithmetic quantum unique ergodicity », *Ann. of Math. (2)* **163** (2006), no. 1, p. 165–219.
- [Mac10] F. MACIÀ – « High-frequency propagation for the Schrödinger equation on the torus », *J. Funct. Anal.* **258** (2010), no. 3, p. 933–955.
- [Nas56] J. NASH – « The imbedding problem for Riemannian manifolds », *Ann. of Math. (2)* **63** (1956), p. 20–63.
- [RS94] Z. RUDNICK & P. SARNAK – « The behaviour of eigenstates of arithmetic hyperbolic manifolds », *Comm. Math. Phys.* **161** (1994), no. 1, p. 195–213.
- [Sar03] P. SARNAK – « Spectra of hyperbolic surfaces », *Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.)* **40** (2003), no. 4, p. 441–478.
- [Sar11] ———, « Recent progress on the quantum unique ergodicity conjecture », *Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.)* **48** (2011), no. 2, p. 211–228.
- [Šni74] A. I. ŠNIREL'MAN – « Ergodic properties of eigenfunctions », *Uspehi Mat. Nauk* **29** (1974), no. 6(180), p. 181–182.
- [CdV85] Y. COLIN DE VERDIÈRE – « Ergodicité et fonctions propres du laplacien », *Comm. Math. Phys.* **102** (1985), no. 3, p. 497–502.
- [Zel87] S. ZELDITCH – « Uniform distribution of eigenfunctions on compact hyperbolic surfaces », *Duke Math. J.* **55** (1987), no. 4, p. 919–941.
- [Zyg74] A. ZYGMUND – « On Fourier coefficients and transforms of functions of two variables », *Studia Math.* **50** (1974), p. 189–201.

Achévé d'imprimer en novembre 2014. Dépôt légal : 4^e trimestre 2014
ISBN 978 – 2 – 7302 – 1631 – 9. *Imprimé en France*

Journées mathématiques X-UPS 2014

Chaos en mécanique quantique

En mécanique classique, les trajectoires issues de lois déterministes mais possédant une forte sensibilité aux conditions initiales semblent imprévisibles : **Frédéric Faure** présente ainsi le chaos déterministe, déjà observé par Henri Poincaré à la fin du XIX^e siècle. Mélange et ergodicité en sont deux propriétés essentielles.

Le formalisme de la mécanique quantique découvert au début du XX^e siècle décrit la matière par des ondes qui évoluent selon l'équation de Schrödinger, et les paquets d'ondes sont assimilables à des particules. Cette nouvelle description de la physique apparaît à première vue comme une rupture. Mais **Clotilde Fermanian Kammerer** explicite le passage de la mécanique classique à la mécanique quantique avec les formules de quantification et l'utilisation du calcul symbolique pour les opérateurs, aboutissant à une correspondance entre les évolutions dynamiques des ondes et des particules.

Le chaos quantique concerne la dynamique des ondes quantiques dans un système dont les particules suivent une dynamique classique chaotique. **Nalini Anantharaman** interprète ce chaos quantique comme une délocalisation complète des fonctions d'ondes stationnaires : c'est le théorème d'ergodicité quantique, qu'elle met en relation avec des travaux qui ont valu la médaille Fields à E. Lindenstrauss en 2010.

Les journées X-UPS sont un stage de formation organisé par le Centre de Mathématiques Laurent Schwartz de l'École polytechnique à l'intention des professeurs des classes préparatoires. L'objectif est double : d'une part satisfaire l'intérêt des professeurs des classes préparatoires pour l'actualité de la recherche en mathématiques, d'autre part leur apporter des connaissances utilisables dans leur enseignement.

Illustration de couverture:
Arnd Bäcker



ISBN 978-2-7302-1631-9



9 782730 216319