

Cours de théorie quantique des champs: des processus stochastiques à la renormalisation

Eric Dumonteil¹, Cédric Mezrag¹, and Hervé Moutarde¹

¹Institut de Recherche sur les Lois Fondamentales de l'Univers, CEA
Université Paris-Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France

Résumé

Ce document est une note de synthèse de l'enseignement de "théorie quantique des champs : des processus stochastiques à la renormalisation", dispensé en dernière année de cycle ingénieur à l'Ecole CentraleSupélec. Ce cours est sous la tutelle du Département de Mathématiques de l'Ecole et vise à introduire la théorie quantique des champs en insistant notamment sur certaines questions de mathématiques associées à la discipline.

Sommaire

I	Du mouvement brownien à la théorie des champs	2
1	Processus stochastiques et phénomènes critiques	4
1.1	Processus stochastiques	4
1.2	Processus Markoviens	5
1.3	Equation Maîtresse	6
1.4	Processus de Galton-Watson	7
1.5	Equation de Fokker-Planck	8
1.6	Vers le mouvement Brownien branchant	9
1.7	Conclusion	10
2	Marches aléatoires et mouvement Brownien	11
2.1	Marche aléatoire asymétrique	11
2.2	Marche aléatoire continue et génératrice des cumulants	13
2.3	Conclusions	16

3	Classe d'universalité et groupe de renormalisation	17
3.1	Coarse graining et symétrie d'échelle	17
3.2	Classe d'universalité du mouvement linéaire ($w_1 \neq 0$)	18
3.2.1	Points fixes	18
3.2.2	Stabilité	19
3.3	Classe d'universalité du mouvement Brownien ($w_1 = 0$)	20
3.3.1	Points fixes	20
3.3.2	Stabilité	20
3.3.3	Remarques	21
3.4	Conclusions	21
4	Mesure de Wiener et intégration fonctionnelle	22
4.1	Un peu de mathématiques : l'intégrale fonctionnelle	22
4.2	Particule Brownienne libre ($\neq V$) "moyenne"	24
4.2.1	Fonctionnelle à 1 point	24
4.2.2	Fonctionnelle à 2 points	24
4.2.3	Fonctionnelle à N points	25
4.3	Particule Brownienne libre ($\neq V$) en (x, t)	26
4.4	Particule Brownienne dans un potentiel V	27
4.5	Conclusions	30
5	Mécanique quantique et intégrales de chemin	32
5.1	Equation de Schrödinger et formule de Feynman-Kac (1ère approche)	33
5.2	Equation de Schrödinger et formule de Feynman-Kac (2ème approche)	35
5.3	Exemples d'application des intégrales de chemin de Feynman	42
5.3.1	L'oscillateur harmonique quantique	42
5.3.2	L'effet Aharonov-Bohm	43
5.4	Limite classique	43
5.5	Conclusion :	44
6	Succès et limites de la mécanique quantique	46
6.1	Rappels historiques et succès de la mécanique quantique	46
6.2	Construction du processus stochastique équivalent	46
6.3	Aspects numériques : l'algorithme Diffusion Monte Carlo	50
6.3.1	Équation de Schrödinger à temps imaginaire et recherche du mode fon-	
	damental	50
6.3.2	Formalisme en intégrale de chemin	51
6.3.3	Algorithme	52
6.3.4	Quelques exemples à l'aide de Jupyter	54
6.4	Limites de la mécanique quantique : relativité restreinte, et théorie quantique	
	du champ	56
6.5	Conclusions	58
II	Méthode perturbative et diagrammes de Feynman	60

7	De la fonction d'onde aux champs	60
7.1	Description microscopique d'un solide	60
7.2	Quantification d'une chaîne d'oscillateurs harmoniques	61
7.3	Vers un nombre infini de degrés de libertés quantiques	64
7.3.1	Limite du continuum $a \rightarrow 0$	64
7.3.2	Limite de volume infini $L \rightarrow \infty$	65
8	Intégrale fonctionnelle	67
8.1	Retour à la représentation Lagrangienne	67
8.2	Des chemins aux configurations	68
8.2.1	Transition entre deux états	68
8.2.2	Relativité et formule LSZ	70
8.2.3	Fonctions de corrélation et intégrale de champs	71
9	Champs en interaction	73
9.1	Fonction de partition et théorème de Wick	73
9.2	Termes de source et fonctions de Green	82
10	Théorie des perturbations en théorie ϕ^4	92
10.1	Corrections quantique de masse à une boucle	92
10.2	Diagramme de Feynman dans l'espace des positions	102
10.3	Règles de Feynman dans l'espace des impulsions	111
III	Introduction à la renormalisation	127
11	Renormalisation Perturbative de la théorie ϕ^4	127
11.1	Lagrangien nu, Lagrangien renormalisé et contre-termes	127
11.2	Renormalisation de ϕ^4 à une boucle	129
11.2.1	Introduction à la régularisation dimensionnelle	129
11.2.2	Renormalisation de la fonction à quatre points	130
11.2.3	Renormalisation de la fonction à deux points	133
12	Groupe de Renormalisation	134
12.1	Conditions de Renormalisation	134
12.2	Équation de Callan-Symanzik	134
12.3	Les fonctions β et γ	135
12.4	Solution de l'équation de Callan-Symanzik	137
12.5	Des constantes aux fonctions de couplage	137
12.5.1	Cas de la théorie ϕ^4	137
12.5.2	Fonction β et fonction de couplage	138
12.5.3	Emergence de Λ_{QCD} via le groupe de renormalisation	139
13	Dernier Chapitre à déterminer	141
IV	Annexe : Devoir à la maison 2023-2024	142

V	Annexe : Devoir Surveillé 2023-2024	145
1	Effet Aharonov-Bohm	145
2	Théorie scalaire ϕ^3	148
2.1	Généralités	148
2.2	Renormalisation et amplitudes	149

Organisation des cours

Partie I

Cours 1 : Processus stochastiques et phénomènes critiques

Cours 2 : Marches aléatoires et mouvement Brownien

Cours 3 : Mesure de Wiener et intégration fonctionnelle

Cours 4 : La mécanique quantique via l'intégrale de Feynman-Kac

Cours 5 : Equation de Schrödinger et processus stochastique associé

Partie II

Cours 6 : Des fonctions d'ondes aux champs

Cours 7 : Formule LSZ et fonctions de correlations

Cours 8 : Théorème de Wick

Cours 9 : Théorie des perturbations en ϕ^4

Cours 10 : Diagrammes de Feynman en TQC

Partie III

Cours 11 : Renormalisation Perturbative de la théorie ϕ^4 (I)

Cours 12 : Renormalisation Perturbative de la théorie ϕ^4 (II)

Cours 13 : Groupe de renormalisation (I)

Cours 14 : Groupe de renormalisation (II)

Examen sur table : Durée prévue 3h sans document.

Première partie

Du mouvement brownien à la théorie des champs

Depuis la découverte du mouvement Brownien par Robert Brown en 1827 (qui pensait que le mouvement erratique des particules de pollen dans l'eau était lié à la vie), ce concept s'est invité à la table de toutes les grandes avancées de la physique théorique du XXe siècle. En 1905 -la fameuse annus mirabilis où il publie également un article sur la relativité restreinte et un autre sur les quanta de lumière- Einstein formalise ainsi dans un article le mouvement Brownien et la théorie de la diffusion, de manière indépendante et simultanée avec Smoluchowski. 15 ans plus tard, dans une série de papiers dédiés, Wiener s'appuie sur cette formulation du mouvement Brownien pour établir une mesure d'intégration portant aujourd'hui son nom. Ces travaux, repris par Feynman et Kac après 1940, mènent alors à une formulation singulière de la mécanique quantique -dite par intégrales de chemins- extrêmement fertile du point de vue de la physique théorique, puisqu'utilisés successivement comme colonne vertébrale :

- de la mécanique quantique pour décrire le transport des particules quantiques et certains effets difficilement solubles via l'équation de Schrödinger
- de la théorie quantique des champs, pour décrire les fluctuations des champs quantiques (Feynman, Schwinger,...)
- de théories plus spéculatives, comme la gravité quantique par exemple, dès 1980, pour décrire directement l'espace-temps (Witten, ...).

L'objectif de cette première partie est par conséquent de reformuler la mécanique quantique, que l'on aborde usuellement via sa formulation Hamiltonienne, à l'aide d'intégrales dites "de chemin" et de souligner le rôle joué dans ce contexte par le mouvement Brownien (qui représentera le propagateur "libre" des particules fondamentales). C'est en effet cette formulation qui sera généralisée, en deuxième partie du présent ouvrage, aux champs quantiques. Pour ce faire, et dans l'optique de varier les points de vue, on présentera 3 approches différentes pour la construction du mouvement Brownien. La première approche, développée au chapitre 1, utilisera la notion d'équation maîtresse -pour la probabilité- et montrera comment cette dernière permet à la fois d'établir les fluctuations d'une population sujette à une équation de réaction diffusion et également de démontrer l'équation de Fokker-Planck pour un processus de transport continu en espace et en temps. Le second chapitre proposera une construction classique du mouvement Brownien, vu comme une équation de Fokker-Planck sans drift, à partir d'une marche aléatoire microscopique discrète en espace et en temps, et permettra ainsi de donner un point de vue intuitif sur le lien entre approche microscopique et macroscopique. Ce passage du microscopique au macroscopique invitera, au troisième chapitre, à s'interroger sur le comportement du système sous les opérations de changement d'échelle, et à regarder ainsi le mouvement Brownien comme la limite 'à gros grain' d'une large variété de marches aléatoires à variance finie. Le chapitre 4 explicitera alors le lien entre mouvement Brownien et mesure de Wiener et abordera la notion d'intégration fonctionnelle et d'intégrale de chemin. Ces intégrales de chemin seront utilisées au chapitre 5 pour présenter une reformulation de la mécanique quantique développée dans la thèse de doctorat de Richard Feynman en 1942, et utilisée comme point de départ pour la formulation contemporaine de nombreux problèmes de physique de la matière condensée et de physique fondamentale, et notamment à la base

du Modèle Standard de la physique des particules. Le chapitre 6 discutera finalement des certains aspects numériques pour la résolution de l'équation de Schrödinger. Il mettra en évidence les limitations de cette dernière justifiant ipso facto la nécessité d'une théorie plus large, où l'intégrale sur les chemins est remplacée par une intégrale sur les champs, ouvrant ainsi sur la seconde partie de l'ouvrage.

1 Processus stochastiques et phénomènes critiques

Les objectifs de ce premier chapitre sont de rappeler les notions et notations associés aux processus stochastiques et Markoviens, puis d'introduire l'équation maîtresse permettant de modéliser l'évolution temporelle de la probabilité d'un processus stochastique. Trois exemples particuliers d'intérêt dans la suite du cours seront alors discutés : les processus de Galton-Watson (permettant de décrire les fluctuations statistiques d'une population d'individus sujette à des naissances et des disparitions), l'équation de Fokker-Planck (permettant de décrire les fluctuations spatiales d'individus sujet à du transport et du drift) et le mouvement Brownien branchant (permettant de décrire la combinaison des deux précédents processus). On gardera en mémoire ce dernier processus qui sera utilisé en fin de partie pour interpréter et résoudre numériquement les équations de la mécanique quantique. Dans cette première section, les processus sont supposés continus en x et t , et sont très généraux : on peut se figurer des particules, des individus, des virus, etc.

1.1 Processus stochastiques

On note $t \in \mathbb{R}^+$ le paramètre continu et on considère la subdivision ordonnée $t_1 < \dots < t_n$. $X(t = t_i)$ est noté x_i . Pour des intervalles infinitésimaux $I_1, I_2, \dots, I_n$ de taille $dx_1, dx_2, \dots, dx_n$ on définit la densité de probabilité de la trajectoire ou du chemin d'une "particule" [\[1\]](#) :

$$\begin{aligned} p(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) dx_1 \dots dx_n &\equiv p(X(t_1) \in I_1, \dots, X(t_n) \in I_n) \\ &= \lim_{\text{nb réalisations} \rightarrow \infty} \left(\frac{\text{nb réalisations passant par } I_1, \dots, I_n}{\text{nb total de réalisations}} \right) \end{aligned}$$

Cette grandeur est la densité de probabilité associée à la trajectoire en question, et est représentée Fig [\[1\]](#) Elle satisfait :

$$\begin{aligned} &\rightarrow p(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) \geq 0 \\ &\rightarrow \int p(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) dx_n \dots dx_1 = 1 \\ &\rightarrow \int p(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) dx_n = p(x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) \end{aligned}$$

On peut également définir la densité de probabilité conditionnelle :

$$\begin{aligned} p(x_{n+1}, t_{n+1} \mid x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) &\equiv p(X(t_{n+1}) \in I_{n+1} \mid X(t_1) \in I_1; \dots; X(t_n) \in I_n) \\ &= \frac{p(X(t_1) \in I_1, \dots, X(t_{n+1}) \in I_{n+1})}{p(X(t_1) \in I_1, \dots, X(t_n) \in I_n)} dx_{n+1} \end{aligned}$$

Comme t est continu, on a : $\lim_{t_2 \rightarrow t_1} p(x_2, t_2 \mid x_1, t_1) = \delta(x_2 - x_1)$.

1. la définition d'une particule est laissée intentionnellement vague à ce stade car les trajectoires peuvent décrire en toute généralité l'évolution de différents objets dans différents espaces paramétriques

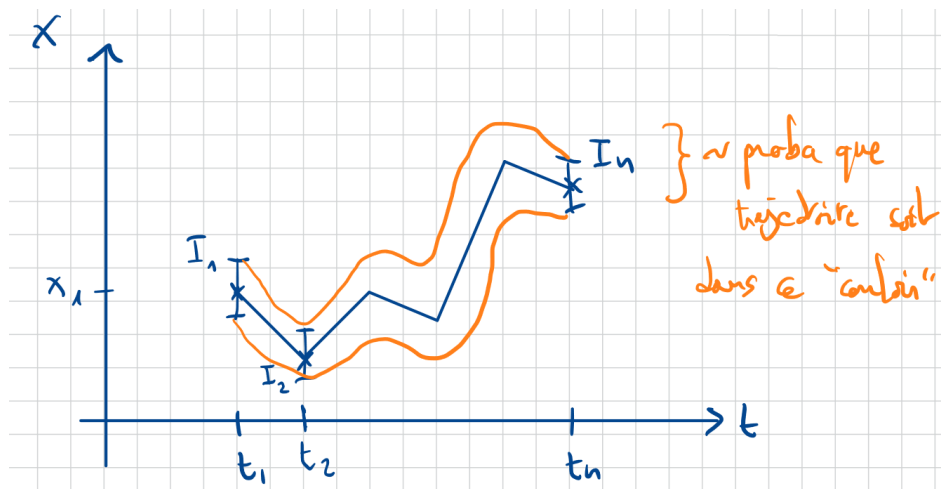


FIGURE 1 – Représentation de la trajectoire (ou "chemin") associée au processus stochastique.

1.2 Processus Markoviens

La définition des processus de Markov s'appuie sur cette notion de probabilité conditionnelle :

$$p(x_{n+1}, t_{n+1} \mid \underbrace{x_n, t_n; \dots; x_1, t_1}) = p(x_{n+1}, t_{n+1} \mid \underbrace{x_n, t_n})$$

⇒ le futur ne dépend que de l'état présent
et pas du passé

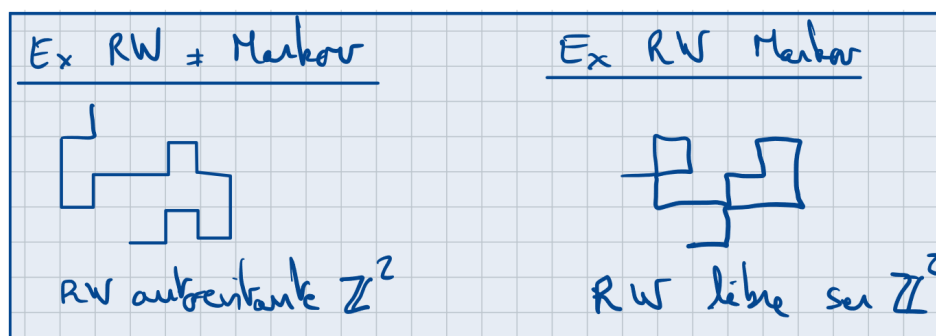


FIGURE 2 – Exemples de marches aléatoires.

De cette définition découle la propriété suivante (à démontrer) :

$$p(x_3, t_3; x_2, t_2; x_1, t_1) = p(x_3, t_3 \mid x_2, t_2)p(x_2, t_2 \mid x_1, t_1)p(x_1, t_1)$$

Ainsi la donnée de $\left\{ \begin{array}{l} p(x_1, t_1) \text{ condition initiale} \\ p(x_k \mid x_{k-1}) \text{ probabilité de transition} \end{array} \right\}$ détermine un processus de Markov.

Le théorème de Chapman-Kolmogorov s'appuie sur la définition d'une probabilité conditionnelle et prend la forme (à démontrer) suivante :

$$p(x_3, t_3 | x_1, t_1) = \int dx_2 p(x_3, t_3 | x_2, t_2) p(x_2, t_2 | x_1, t_1)$$

Cette équation est importante car elle permettra d'établir l'intégrale au sens de Wiener, qui elle même permettra d'établir l'intégrale au sens de Feynman-Kac. On remarque également que le théorème de Chapman-Kolmogorov ressemble étrangement à la relation identité en mécanique quantique.

1.3 Equation Maître

L'équation maîtresse est une équation permettant de calculer l'évolution temporelle de la probabilité de trouver notre particule en x ^[2]. Si la probabilité de transition est stationnaire, c'est-à-dire que $p(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}) = p(x_n, t_n - t_{n-1} | x_{n-1})$, alors

$$\begin{aligned} p(x_2, \Delta t | x_1) &= \left\{ \begin{array}{c} \text{proba se passe} \\ \text{rien en } \Delta t \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} \text{proba } x_1 \rightarrow x_2 \\ \text{en } \Delta t \end{array} \right\} \\ &= (1 - \lambda \Delta t) \delta(x_2 - x_1) + \Delta t W(x_2 | x_1) + O(\Delta t) \end{aligned}$$

où $W(x_2 | x_1)$ est la probabilité $p(x_1 \rightarrow x_2)$ par unité de temps. Par normalisation de

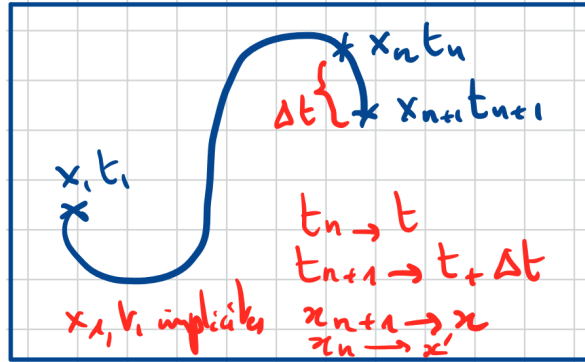


FIGURE 3 – Représentation d'une trajectoire décomposée en deux sous parties.

cette équation (intégration sur dx_2 des 2 côtés), on a la définition : $\lambda \equiv \int W(x_2 | x_1) dx_2$. En s'appuyant sur la Figure 3 pour les notations, on établit alors l'équation maîtresse en décomposant une trajectoire en deux parties :

$$\begin{aligned} p(x_{n+1}, t_{n+1} - t_1 | x_1) &= \int p(x_{n+1}, t_{n+1} - t_n | x_n) p(x_n, t_n - t_1 | x_1) dx_n \\ \Rightarrow p(x_{n+1}, t + \Delta t | x_1) &= \int p(x_{n+1}, \Delta t | x_n) p(x_n, t | x_1) dx_n \\ p(x_{n+1}, t | x_1) + \Delta t \partial_t p(x_{n+1}, t | x_1) &= \int ((1 - \lambda \Delta t) \delta(x_{n+1} - x_n) + \Delta t W(x_n | x_n)) p(x_n, t | x_1) dx_n \end{aligned}$$

2. x représentant la variable d'espace ou un espace paramétrique plus général

avec $\lambda = \int W(x_{n+1} | x_n) dx_{n+1} = \int W(x_0 | x_n) dx_0$, car x_{n+1} est muet. L'intégrale avec $\delta(x_{n+1} - x_n)$ va changer x_n de λ en x_{n+1} .

$$\begin{aligned} \cancel{p(x_{n+1}, t | x_1)} + \Delta t \partial_t p(x_{n+1}, t | x_1) &= \cancel{p(x_{n+1}, t | x_1)} - \Delta t \int W(x_0 | x_{n+1}) p(x_{n+1}) dx_0 \\ &\quad + \Delta t \int W(x_{n+1} | x_n) p(x_n) dx_n \end{aligned}$$

Soit, en simplifiant par Δt puis en remplaçant le x_0 muet par x' et le x_{n+1} par x :

$$\partial_t p(x, t) = \int dx' (W(x | x') p(x') - W(x' | x) p(x))$$

Cette équation signifie que la variation temporelle de la probabilité est égale à tout ce qui se situe en x' et qui arrive en x , moins tout ce qui se situe en x et qui sort n'importe où. On peut encore écrire, en passant de la variable x continue à la variable N discrète :

$$\partial_t p(N, t) = \sum_{N'} W(N' \rightarrow N) p(N') - W(N \rightarrow N') p(N)$$

La notation "sachant que" $|$ utilisée ici pour le processus stochastique continu devient $\rightarrow$ pour le processus discret. Ce type d'équation est dit "forward" car la variable de la densité de probabilité $p(x, t)$ est le paramètre x final. Le même type d'équation "backward" peut également être établi où l'on s'intéresse à la densité de probabilité associée à la condition initiale x_0 permettant de réaliser une mesure donnée (les rôles de la source et du détecteur sont inversés).

1.4 Processus de Galton-Watson

On s'intéresse à présent à la capacité de l'équation maîtresse à calculer des fluctuations statistiques et des corrélations (spatiales ou temporelles) à partir de cette équation. Pour ce faire, on se donne un processus stochastique de Galton-Watson en considérant :

- un espace de dimension 0
- une population initiale N_0
- un taux de création de particules α
- un taux de disparition de particules μ

On peut par exemple penser à des bactéries qui, aléatoirement, tantôt se reproduisent et tantôt meurent dans une boîte de Pétri. Les noyaux de transition sont ainsi donnés par

$$\begin{aligned} W(N \rightarrow N+1) &= \alpha N \\ W(N \rightarrow N-1) &= \mu N \end{aligned}$$

Comme l'équation maîtresse discrète s'écrit :

$$\partial_t p = \sum_{N'} (W(N' \rightarrow N) p(N') - W(N \rightarrow N') p(N)),$$

il vient :

$$\partial_t p = W(N-1 \rightarrow N) p(N-1) + W(N+1 \rightarrow N) p(N+1) - W(N \rightarrow N-1) p(N) - W(N \rightarrow N+1) p(N),$$

ou encore :

$$\partial_t p = \alpha(N-1)p(N-1) + \mu(N+1)p(N+1) - \mu Np(N) - \alpha Np(N).$$

Les deux premiers moments de la distribution de probabilité peuvent alors être extraits via :

$$\langle N \rangle = \sum Np(N) \quad \langle N^2 \rangle = \sum N^2 p(N).$$

Pour le premier moment on montre (le faire) que l'évolution temporelle de la moyenne du nombre de particules est donné par $\langle N(t) \rangle = N_0 e^{(\alpha-\mu)t}$.

Pour le deuxième moment on montre (le faire) que lorsque le processus est critique, c'est à dire $\alpha = \mu$, alors la variance s'écrit :

$$V = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = 2\alpha N_0 t$$

1.5 Equation de Fokker-Planck

L'équation maîtresse continue appliquée aux processus de transport s'écrit

$$\partial_t p(x, t) = \int dx' (W(x | x') p(x') - W(x' | x) p(x))$$

On note $r = x - x'$ la taille des sauts. Alors,

$$\partial_t p = \int dr (W_r(x-r) p(x-r, t) - W_{-r}(x) p(x, t))$$

On se place sous trois hypothèses : $r \rightarrow 0$, variation lente et sauts symétriques. On obtient alors le développement de Kramers-Moyal en $x - r$:

$$\partial_t p = \int dr \left(\cancel{W_r(x) p(x, t)} - r \partial_x (W_r(x) p(x)) + \frac{r^2}{2} \partial_x^2 (W_r(x) p(x)) + \dots - \cancel{W_{-r}(x) p(x, t)} \right)$$

L'équation résultante, dite de Fokker-Planck, prend manifestement la forme d'une équation de diffusion sous drift de l'espèce considérée :

$$\partial_t p(x, t) = -\partial_x (a(x) p(x, t)) + \frac{1}{2} \partial_x^2 (b(x) p(x, t)),$$

avec $\left\{ \begin{array}{l} a(x) = \int dr r W_r(x) = \text{nb sauts par unité de temps,} \\ b(x) = \int dr r^2 W_r(x) = \text{moment d'ordre 2,} \end{array} \right\}$ Considérons l'équation ci-dessus

avec des termes a et b constants. Sa solution s'obtient alors par transformée de Fourier :

$$\begin{aligned} D \partial_x^2 p - v \partial_x p = \partial_t p & \xrightarrow{\mathcal{F}} D(ik)^2 \tilde{p} - vik \tilde{p} = \partial_t \tilde{p} \\ & \downarrow \\ p(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dk^2 t - vikt} \frac{e^{ikx}}{2\pi} dk & \xleftarrow[p(x,0)=\delta(x) \Rightarrow A(k)=1]{\mathcal{F}^{-1}} \tilde{p}(k, t) = A(k) e^{-(Dk^2 + vik)t} \end{aligned}$$

Exactement comme un mouvement Brownien pur avec $x \rightarrow x - vt$. Ce qui permet finalement d'écrire

$$p(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{(x-vt)^2}{4Dt}} \quad (1)$$

1.6 Vers le mouvement Brownien branchant

Lorsqu'on combine un processus aléatoire de transport en espace de type mouvement Brownien à un processus aléatoire de branchement de type Galton-Watson -les deux derniers processus étudiés- on obtient le processus dit mouvement Brownien branchant (BBM, pour branching Brownian motion en anglais). Ce type de processus est également connu sous le nom de processus de réaction diffusion en physique, et on s'intéresse ici uniquement au premier moment (la moyenne) du processus (il existe une généralisation de calcul via l'équation maîtresse permettant de calculer les moments d'ordre supérieur mais cela ne sera pas abordé ici).

Soit $c(x, t)$ la concentration d'une espèce soumise à une diffusion (coefficient D) et à une réaction linéaire caractérisée par des taux α (naissance) et μ (mort). Nous souhaitons établir

$$D \Delta c(x, t) + (\alpha - \mu) c(x, t) = \frac{\partial}{\partial t} c(x, t).$$

Pour ce faire on considère un volume arbitraire V du domaine, de frontière ∂V . Si $c(x, t)$ représente une densité de masse ou de particules, alors la masse totale dans V est $\int_V c(x, t) dx$. La variation temporelle de cette quantité est

$$\frac{d}{dt} \int_V c dx = \int_V \frac{\partial c}{\partial t} dx.$$

Le flux $\mathbf{J}(x, t)$ représente la quantité de matière traversant la surface ∂V . Le flux net sortant est

$$\int_{\partial V} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dS,$$

où $\mathbf{n}$ est le vecteur normal sortant. Par le théorème de la divergence,

$$\int_{\partial V} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dS = \int_V \nabla \cdot \mathbf{J} dx.$$

En l'absence de sources internes autres que la réaction, la conservation impose que la variation de masse dans V s'écrit

$$\int_V \frac{\partial c}{\partial t} dx + \int_V \nabla \cdot \mathbf{J} dx = \int_V (\alpha - \mu) c dx.$$

Comme V est arbitraire, on obtient localement l'équation de continuité :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = (\alpha - \mu) c.$$

Sous l'hypothèse de diffusion de type Fick,

$$\mathbf{J}(x, t) = -D \nabla c(x, t).$$

On remplace alors $\mathbf{J}$ dans l'équation de continuité :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (-D \nabla c) = (\alpha - \mu) c.$$

Si D est constant,

$$\nabla \cdot (-D \nabla c) = -D \Delta c,$$

ce qui donne en effet

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \Delta c + (\alpha - \mu) c.$$

Sous certaines conditions et limites, le mouvement Brownien branchant peut être généralisé en une classe de processus stochastique dite super-processus, étudiés notamment par Jean-Francois Le Gall en France. L'étude du BBM et des super-processus a trouvé des applications clés dans des domaines variés, tels que la neutronique, la biologie, l'étude des épidémies, ou la simulation numérique de l'équation de Schrödinger (voir la dernière section de cette première partie du document).

1.7 Conclusion

Dans cette partie, nous avons appris à construire des équations d'évolution pour la probabilité en établissant des équations maîtresses. Nous nous sommes ensuite intéressés à deux processus qui joueront un rôle important dans la suite : les fluctuations en population, modélisées par le processus de Galton-Watson, et les fluctuations en espace, décrites par l'équation de Fokker-Planck. La combinaison de ces deux processus nous permettra d'aborder l'équation de Schrödinger du point de vue des processus stochastiques et de mettre en œuvre l'algorithme Diffusion Monte Carlo pour sa résolution numérique (voir section 6). Par ailleurs, nous avons vu que la solution de l'équation de Fokker-Planck sans drift s'interprète naturellement comme le mouvement brownien. Dans la section suivante, nous établirons une seconde construction du mouvement brownien comme limite macroscopique d'une large classe de marche aléatoire considérée à l'échelle microscopique à l'aide des marches aléatoires.

Bibliographie

Cette section repose en partie sur un enseignement délivré par A. Mazzolo et E. Dumonteil à l'ENS Paris-Saclay et sur un enseignement délivré par B. Houchmandzadeh à l'UJF de Grenoble. Cette dernière référence pourra notamment être utilisée pour approfondir l'étude de phénomènes critiques et des processus de réaction diffusion. En fonction de l'intérêt du lecteur, une introduction mathématique à l'étude des superprocessus est également fournie.

- [1] Chapitre 1 du cours "Processus stochastiques et Neutronique", A. Mazzolo et E. Dumonteil, ENS Paris-Saclay
- [2] Cours "Processus stochastiques", B. Houchmandzadeh, UJF Grenoble
- [3] "An introduction to superprocesses", A. Etheridge, American Mathematical Society (2000)

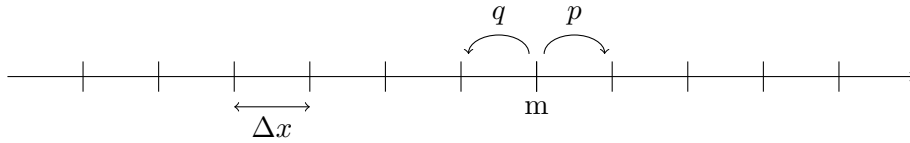
2 Marches aléatoires et mouvement Brownien

Dans la section précédente, nous nous sommes intéressés à un processus de transport continu en (x, t) . Nous allons à présent nous intéresser, en sous-section 2.1, à un processus de transport microscopique simple et discret, paramétrisé par $(\Delta x, n)$: la marche aléatoire. Introduite par Pearson en 1905 (décidément cette année fut mouvementée) dans la section des questions aux lecteurs du journal Nature [Pear], le problème de la marche aléatoire "de l'ivrogne" offre un exemple notable de mécanisme illustrant l'indépendance des lois microscopiques lors du passage au macroscopique. Dans la limite du continu en espace, c'est à dire lors de l'opération de la dilatation d'échelle d'observation, on montrera qu'en effet la loi de diffusion est retrouvée. Cela sera formalisé en sous-section 2.2 où l'étude de la marche aléatoire mixte (x, n) permettra de définir le concept de classe d'universalité et d'introduire l'utilisation du groupe de renormalisation.

2.1 Marche aléatoire asymétrique

On s'intéresse donc à la marche aléatoire à sauts fixes de taille Δx paramétrée par un indice discret de temps n telle que

$$\begin{cases} \Delta x & \longrightarrow \text{RW discrète en espace (ex : } \Delta x = \pm 1) \\ n & \longrightarrow \text{RW discrète en temps (ex : } n \in \mathbb{N}) \end{cases}$$



Avec :

- $n = \#$ sauts total
- $n_1 = \#$ sauts à droite
- $n_2 = \#$ sauts à gauche

En notant la position finale $m = n_1 - n_2$ en utilisant $n = n_1 + n_2$ on remarque que :

$$n_1 = \frac{n + m}{2} \quad ; \quad n_2 = \frac{n - m}{2}$$

Aussi, comme p^{n_1} est la probabilité de faire n_1 sauts à droite et q^{n_2} est la probabilité de faire n_2 sauts à gauche, on voit que $p^{n_1}q^{n_2}$ est la probabilité de réaliser une séquence ordonnée de n_1 sauts à droite et n_2 sauts à gauche. Comme il y a $C_{n_1}^n = \#$ séquences différentes avec n_1 sauts à droite et $n - n_1$ sauts à gauche, la probabilité de faire n_1 sauts à droite sur les n sauts en tout est donnée par

$$p(n_1, n) = C_{n_1}^n p^{n_1} q^{n-n_1}$$

Cette probabilité peut alternativement se réécrire en utilisant la position finale m de la manière suivante

$$p(m, n) = \frac{n!}{\left(\frac{n+m}{2}\right)! \left(\frac{n-m}{2}\right)!} p^{\frac{n+m}{2}} q^{\frac{n-m}{2}}$$

Dans l'expansion binomiale $(pu + q)^n = \sum_{n_1=0}^n C_{n_1}^n p^{n_1} u^{n_1} q^{n-n_1}$, on constate que le coefficient de l'expansion est $p(n_1, n)$. Il est donc possible d'extraire les moments d'ordre k en évaluant le terme $(u \frac{d}{du})^k$ et en imposant $u = 1$. En suivant cette approche on obtient successivement :

- la normalisation de la probabilité à 1 via $\sum_{n_1} p(n_1, n) = (p + q)^n = 1^n = 1$
- le nombre moyen de sauts à droite via

$$\langle n_1 \rangle = \sum_{n_1} n_1 p(n_1, n) = u \frac{d}{du} (pu + q)^n \Big|_{u=1} = np(p + 1 + q)^n = np$$

- le moment d'ordre 2 du nombre de sauts à droite et la variance via

$$\begin{aligned} \langle n_1^2 \rangle &= \sum_{n_1} n_1^2 p(n_1, n) = \left(u \frac{d}{du} \right)^2 (pu + q)^n \Big|_{u=1} = u \frac{d}{du} (np u (pu + q)^{n-1}) \Big|_{u=1} \\ &= np + n(n-1)p^2 \end{aligned}$$

$$\text{et par voie de conséquence } \text{Var}(n_1) = \sigma_{n_1}^2 = \langle n_1^2 \rangle - \langle n_1 \rangle^2 = np(1 - p) = npq$$

Ces résultats se translatent sur la position finale m via le calcul de la position finale moyenne

$$\langle m \rangle = 2\langle n_1 \rangle - n = 2np - n = n(2p - 1) = n(p - q)$$

et celle de son moment d'ordre 2

$$\langle m^2 \rangle = 4\langle n_1^2 \rangle = 4\langle n_1 \rangle n + n^2$$

Comme

$$n = 2\langle n_1 \rangle - \langle m \rangle \quad ; \quad n^2 = 4\langle n_1 \rangle^2 + \langle m \rangle^2 - 4\langle n_1 \times m \rangle$$

on peut calculer le moment d'ordre 2 de m uniquement en fonction de n_1 et m

$$\begin{aligned} \langle m^2 \rangle &= 4\langle n_1^2 \rangle - 8\langle n_1 \rangle^2 + \cancel{4\langle n_1 \rangle \langle m \rangle} + 4\langle n_1 \rangle^2 + m^2 - \cancel{4\langle n_1 \rangle \langle m \rangle} \\ &= 4(\langle n_1^2 \rangle - \langle n_1 \rangle^2) + \langle m \rangle^2 \\ &= 4\sigma_{n_1}^2 + \langle m \rangle^2 \end{aligned}$$

ce qui donne directement accès à la variance sur m

$$\sigma_m^2 = \langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 = 4\sigma_{n_1}^2 = 4npq$$

On en conclut que pour une marche symétrique

$$\left\{ \begin{array}{l} p = q = \frac{1}{2} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \langle m \rangle = 0 \Rightarrow \text{la marche aléatoire est centrée} \\ \sigma_m^2 = n \Rightarrow \text{sa variance augmente linéairement en temps } \propto n \propto "t" \end{array} \right. \\ \hookrightarrow \text{la particule est donc sujette à une diffusion libre} \end{array} \right.$$

On peut alors montrer (le faire) que, dans le cas général d'une marche aléatoire non symétrique, la probabilité de trouver la particule en m au temps n peut se mettre sous la forme de l'équation [1](#).

En utilisant les notations suivantes,
$$\begin{cases} x = m\Delta x, & t = n\Delta t, \\ D = 2pq \frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}, & \langle x \rangle = \underbrace{(p - q)n}_{v} = vt = \langle m \rangle \Delta x \end{cases}$$

cette expression discrète peut être "passée" à la limite continue en espace et en temps

$$\begin{cases} \sigma_m^2 = 4npq = 2 \left(2pq \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \right) n \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = 2D \frac{t}{\Delta x^2} \\ \frac{(m - \langle m \rangle)^2}{2\sigma_m^2} = \frac{\left(m \frac{\Delta x}{\Delta x} - \langle m \rangle \frac{\Delta x}{\Delta x} \right)^2}{4D \frac{t}{\Delta x^2}} = \frac{(x - \langle x \rangle)^2}{4Dt} \end{cases}$$

ce qui mène à la version continue de la densité de probabilité associée au Brownien

$$p(x, t) \simeq \frac{2\Delta x}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{4Dt}}$$

L'évolution temporelle de la densité est représentée Figure [4](#). Comme l'écart type augmente selon $\sqrt{t}$ et la moyenne linéairement en temps, le rapport des deux quantités tend vers 0 à grand temps. Ce type de comportement est dit "self averaging". Cela signifie notamment que lorsqu'on considère la marche aléatoire "vue de loin", c'est à dire sur des grandes échelles d'espace (ou "vue de loin"), les détails microscopiques et fluctuations ont tendance à être lissés et le comportement du processus de mieux en mieux décrit par sa moyenne. Cette notion d'"universalité" est discutée dans la sous-section suivante.

2.2 Marche aléatoire continue et génératrice des cumulants

Dans cette optique de généralisation, considérons une marche aléatoire continue en espace et décrite par son noyau de transition $W_n(x | x')$ (donnant la probabilité de transition par unité de temps, c'est à dire ici pour un "saut" de temps $n \rightarrow n + 1$). On a alors

$$p_{n+1}(x) = \int dx' W_n(x | x') p_n(x') \text{ avec } \begin{cases} \int dx W(x | x') = 1 \\ p_0(x) = \delta(x) \end{cases}$$

En faisant l'hypothèse que ce noyau de transition est invariant par translation en temps n et en espace x , on a

$$W_n(x | x') = W(x - x')$$

Par exemple, la probabilité d'être en x en deux sauts est donnée par

$$p_2(x) = \int dx' W(x - x') \underbrace{\int dx'' W(x' - x'') p_0(x'')}_{p_1(x')}$$

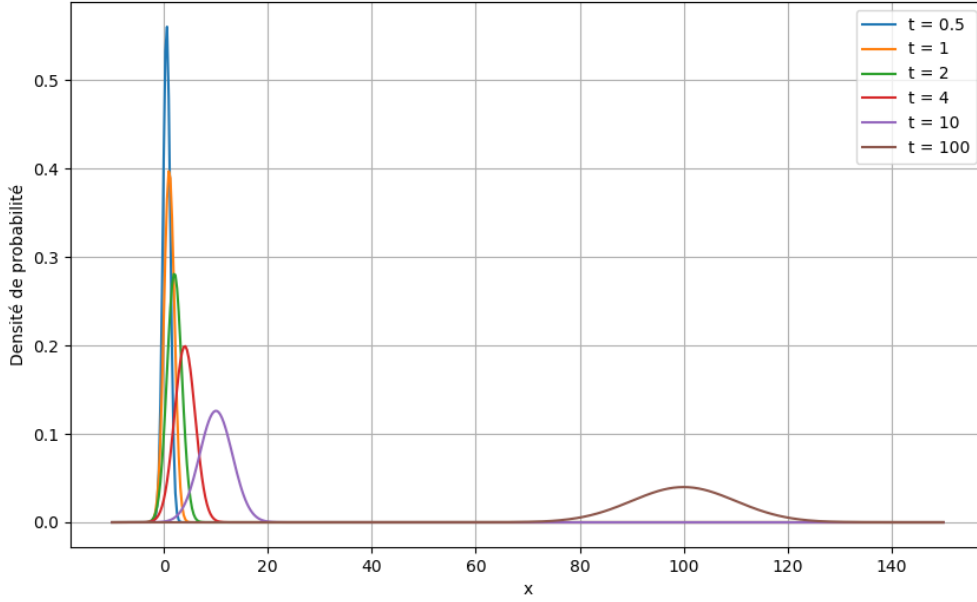


FIGURE 4 – Densité du Brownien avec drift à différents temps

Comme cette convolution dans l'espace direct devient un produit dans l'espace de Fourier cette expression peut se réécrire

$$\tilde{p}_2(k) = \tilde{W}^2(k)$$

avec $\tilde{W}(k) \equiv \int dx e^{-ikx} W(x)$ (on a $\tilde{p}_0(k) = 1$ puisque $p_0(x) = \delta(x)$). On note que la convention pour la transformée de Fourier choisie ici est de ne pas affecter de facteur $\frac{1}{2\pi}$ à la transformation directe $\mathcal{F}$ mais de rajouter ce facteur à la transformée inverse $\mathcal{F}^{-1}$, ce qui est nécessaire pour avoir un produit simple dans l'espace transformé (ce qui n'aurait pas fonctionné avec l'autre choix possible, c'est à dire un facteur $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ $\mathcal{F}$ et $\mathcal{F}^{-1}$). On note également que k , $p_n(k)$ et $\tilde{W}(k)$ sont dans $\mathbb{C}$. La généralisation pour n sauts est triviale :

$$\begin{aligned} \tilde{p}_n(k) &= \tilde{W}(k) \tilde{p}_{n-1}(k) \cdots \tilde{p}_0(k) = \tilde{W}^n(k) \\ &= e^{\ln(\tilde{W}^n(k))} \\ &= e^{nw(k)} \end{aligned}$$

avec $w(k) \equiv \ln(\tilde{W}(k))$ la fonction génératrice des cumulants. Certaines propriétés de $w(k)$ peuvent être explicitées par de considérations physiques/mathématiques. D'une part on a

$w(0) = 1$ par normalisation de la probabilité de la marche aléatoire puisque

$$w(k=0) = \ln \left(\tilde{W}(k=0) \right) = \ln \left(\overbrace{\int e^{\underbrace{ikx}_{=1} \underset{0}{}} W(x) dx}^{\substack{\text{\tiny f sur toutes les} \\ \text{\tiny positions de sortie possibles avec } x_0=0}} \right) = \ln(1) = 0$$

D'autre part, et de manière plus importante, on souhaite associer à notre marche aléatoire une hypothèse de localité : la probabilité de faire de larges sauts/vols doit être encadrée exponentiellement, c'est à dire $\exists a, b > 0 : W(x) \leq a e^{-bx}$. Cela mène à l'encadrement suivant

$$|\tilde{W}(k)| = \left| \int e^{-ikx} W(x) dx \right| \leq \left| \int a e^{-ikx-bx} dx \right|$$

Avec $k \in \mathbb{C}$ on a alors

$$\begin{aligned} |\tilde{W}(k)| &\leq \left| \int e^{-i\Re(k)x + (\Im(k)-b)x} dx \right| \\ &\leq \left| \underbrace{\int e^{-i\Re(k)x} dx}_{\text{module 1}} \times \underbrace{\int e^{-(b-\Im(k))x} dx}_{\in \mathbb{R}} \right| \end{aligned}$$

On peut voir donc voir que la convergence est contrôlée si et seulement si $|\Im(k)| < b$ puisqu'alors $e^{-(b-\Im(k))x} \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$: $\tilde{W}(k)$ est une fonction analytique dans la bande $|\Im(k)| < b$. Ainsi, à travers le jeu des variables de la transformation de Fourier, le comportement de $W(x)$ à grand x (localité) est relié au comportement de $\tilde{W}(k)$ à petit k (analyticité, c'est à dire "développabilité" en série de Taylor). En effet, $\tilde{W}(k)$ étant la transformée de Fourier de $W(x)$, elle est la génératrice de ses moments :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Moment (1)} = i \frac{\partial}{\partial k} \tilde{W}(k) \Big|_{k=0} = \int dx e^{-ikx} x W(x) \Big|_{k=0} = \langle x \rangle \\ \text{Moment (2)} = \left(i \frac{\partial}{\partial k} \right)^2 \tilde{W}(k) \Big|_{k=0} = \int dx e^{-ikx} x^2 W(x) \Big|_{k=0} = \langle x^2 \rangle \\ \vdots \end{array} \right.$$

Cette analyticité de $\tilde{W}(k)$ se transfère à la génératrice des cumulants $w(k)$

$$\left. \begin{array}{l} \text{analyticité de } \tilde{W}(k) \\ \tilde{W}(k=0) = 1 \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} \text{analyticité de } w(k) = \ln(\tilde{W}(k)) \\ w(k=0) = 0 \end{array} \right\}$$

On a donc établi un lien entre localité du processus de transport (encadrement exponentiel du noyau de transition) et l'analyticité de sa génératrice des cumulants. Ce lien entre localité et analyticité est profond et trouvera son exact pendant en théorie des champs.

Quelques remarques :

$$\text{- Vocabulaire en physique statistique : } \left\{ \begin{array}{ccc} \text{génératrice moments} & \longleftrightarrow & \text{fonction caractéristique} \\ \updownarrow & & \updownarrow \\ \text{Laplace} & \xleftrightarrow{k \in \mathbb{R} \text{ ou } \mathbb{C}} & \text{Fourier} \end{array} \right.$$

- En mécanique quantique / théorie du champ, l'hypothèse de localité signifie que la particule / l'information reste contenue dans le cône de lumière passé ou futur. La causalité est restreinte au cône $t > 0$
- En théorie du champs le lien évoqué ci dessus sera entre la localité et l'analyticité de la fonction de Green $= G(x', t' | x, t)$ (qui généralise le noyau de transition $W(x' | x)$ pour un saut $n = 1$)

En utilisant une troncature de la fonction génératrice des cumulants, on peut également montrer (le faire) que la densité $p_n(x)$ prend la forme de l'équation [1](#) où w_1 et w_2 prennent des valeurs bien choisies.

2.3 Conclusions

On a montré que tous les processus stochastiques à variance finie (i.e. dont le noyau de transition est encadré par une exponentielle) lorsqu'ils sont observés après un passage à l'échelle macroscopique, semblent converger vers une même loi : le mouvement Brownien. Cette réflexion est une sorte de déclinaison des lois faibles et fortes des grands nombres aux processus de transport. On parle ainsi de l'émergence d'une classe d'universalité -celle du processus de diffusion continue. On a donc vu, dans ce contexte, que les deux premiers moments de la fonction génératrice des cumulants s'interprètent respectivement comme la vitesse et la variance du processus. Dans la suite on formalise ces aspects en introduisant de manière très sommaire et superficielle la notion de groupe de renormalisation.

Bibliographie

La première partie de cette section utilise des éléments de la publication de Paul et Baschnagel, et la seconde partie de cette section synthétise le chapitre idoine du livre de référence de J. Zinn-Justin sur la théorie de champs et les phénomènes critiques. On ne peut d'ailleurs suggérer au lecteur intéressé par un approfondissement que de visionner la vidéo associée à cet ouvrage. Tout ces éléments sont accessibles en suivant la courte bibliographie suivante.

- [1] [Article de K. Pearson dans la tribune des questions de la revue Nature, 1905](#)
- [2] W.Paul et J.Baschnagel "Stochastic processes from physics to finance", deuxième édition, Springer
- [3] J.Zinn-Justin, "QTF and Critical Phenomena", cinquième édition, Oxford Science publications
- [5] Vidéo et cours en ligne ["An introduction to Quantum Field Theory I by J. Zinn-Justin"](#)

3 Classe d'universalité et groupe de renormalisation

Cette section vise donc à généraliser l'approche mise en œuvre à la section précédente, en s'appuyant sur la notion de groupe de renormalisation. Pour ce faire on va chercher à identifier des classes d'universalité sans résoudre explicitement le problème que l'on se donne, mais uniquement en ne conservant que des solutions robustes vis à vis de changements d'échelles spatiotemporelles successives (on parle de coarse graining). Ces changements successifs d'échelle sont des renormalisations (on change la norme de l'espace et/ou du temps) et le but du jeu consiste à identifier, par ces renormalisations successives, des classes de processus stochastique invariantes d'échelle. Deux d'entre elles seront ici discutées : la classe d'universalité du mouvement linéaire et celle du mouvement Brownien. On introduira en fin de section la notion d'exposant critique.

3.1 Coarse graining et symétrie d'échelle

Une fonction f est dite **invariante d'échelle** si :

$$\forall \lambda, \exists \Delta / f(\lambda x) = \lambda^\Delta f(x).$$

Si on s'intéresse à un champ $\varphi(x, t)$, on doit avoir :

$$\varphi(\lambda x, \lambda t) = \lambda^\Delta \varphi(x, t).$$

Par exemple, les équations de Maxwell sans charge ni courant sont invariantes d'échelle, car elles ont la forme :

$$\Delta E = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2}, \quad \Delta B = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 B}{\partial t^2}.$$

Afin d'expliquer l'émergence de propriétés **d'universalité** (c'est-à-dire l'indépendance aux conditions initiales) manifestée par l'apparition d'une distribution Gaussienne limite, on s'intéresse aux propriétés d'échelle de notre marche aléatoire : l'idée va consister à diviser par 2 le nombre de pas de temps à chaque étape du processus, en les combinant deux à deux (on cherche à regarder à "gros grain" temporel c'est à dire à "shrinker" le temps) :

$$t \rightarrow t' = \frac{t}{2}$$

On supposera pour ce faire dans la suite que le nombre de pas initial n peut s'écrire $n = 2^m$. A cette étape, on n'a encore "rien fait" à l'échelle d'espace. À chaque itération on peut écrire

$$[\mathcal{T}W](x - x') = \int dx'' W(x - x'') W(x'' - x'),$$

où $\mathcal{T}$ appliquée à $W(x)$ est non-linéaire mais devient linéaire appliquée à $w(k)$, car :

$$[\mathcal{T}w](k) = \ln(\tilde{W}^2(k)) = 2 \ln(\tilde{W}(k)) = 2w(k),$$

(la convolution dans l'espace direct devient un produit dans l'espace de Fourier). Si l'on s'intéresse à $\mathcal{T}^m$ pour $m \rightarrow \infty$, il existe une distribution limite $w^*(k)$, c'est-à-dire un point fixe

$$[\mathcal{T}w^*](k) = 2w^*(k) = w^*(k),$$

(attention la notation $*$ n'est pas liée à la conjugaison complexe...). Le développement de w en puissances de k nous donne alors une unique solution triviale pour cette distribution limite :

$$w^*(k) = 0$$

ce qui n'est pas "passionnant".

3.2 Classe d'universalité du mouvement linéaire ($w_1 \neq 0$)

3.2.1 Points fixes

On s'intéresse maintenant à l'invariance d'échelle de notre processus et on autorise une **renormalisation de l'échelle de l'espace** :

$$x \rightarrow \lambda x$$

$$k \rightarrow k/\lambda$$

(avec $\lambda > 0$) car k est conjugué à x . On introduit la famille de transformations $\mathcal{T}_\lambda$ telle que :

$$[\mathcal{T}_\lambda w^*](k) = 2w^*(k/\lambda)\bar{w}^*(k).$$

Avec $w^*(k) = -iw_1k + \dots$ ($w_1 > 0$) il vient que

$$k/\lambda = k \implies \lambda = 2 \implies w_1 = 0 \quad \forall |k| > 1.$$

En prenant les termes supérieurs, on a en outre $w_l = 0 \quad \forall l > 1$. D'où :

$$w^*(k) = -iw_1k \implies W^*(x) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ikx - iw_1k} = \delta(x - w_1).$$

Et

$$\tilde{W}_n^*(k) = e^{nw^*(k)} \implies W_n^*(x) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ikx - inw_1k} = \delta(x_n - w_1n),$$

et en remplaçant n par t cette dernière équation n'admet manifestement de solution que pour

$$\boxed{\langle x_t \rangle = w_1 t}$$

ce qui révèle que notre point fixe est associé à un processus de drift linéaire de vitesse $v = w_1$. Ce résultat doit cependant être accompagné de quelques remarques. Tout d'abord, la vitesse obtenue ci dessus est celle de la moyenne spatiale du processus (ce n'est pas la vitesse de chacune des trajectoires considérées séparément). Ensuite, il convient d'observer ce résultat en "reculant d'un pas" : ce qui apparaît est que lorsqu'on combine les pas de temps de sorte à observer le processus "de plus loin" temporellement (on change la mesure -la norme- de notre chronomètre), alors il faut observer la processus "de plus loin" spatialement (et changer la mesure -le mètre/la norme- des grandeurs spatiales) dans les mêmes proportions (facteur λ également) pour que la moyenne spatiale de notre processus reste inchangée. On dit que x et t sont rescalés d'un même facteur. Enfin, cette procédure itérative indique un point fixe, mais il n'est pas certain que ce point fixe soit stable. On s'intéresse à présent à cette question.

3.2.2 Stabilité

Etudions une perturbation $w(k) = w^*(k) + \delta w(k)$. Comme $\mathcal{T}_\lambda$ est linéaire

$$[\mathcal{T}_{\lambda=2}\delta w](k) = 2\delta w(k/2).$$

Par régularité de $\delta w(k)$ on a :

$$\delta w(k) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-i)^l}{l!} \delta w_l k^l.$$

Et donc

$$\begin{aligned} [\mathcal{T}_2\delta w](k) &= 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-i)^l}{l!} \delta w_l \left(\frac{k}{2}\right)^l, \\ [\mathcal{T}_2\delta w](k) &= \sum_{l=1}^{\infty} \frac{2^{1-l}(-i)^l}{l!} \delta w_l k^l. \end{aligned} \tag{a}$$

Par ailleurs, en appliquant $\mathcal{T}_2$ sur la perturbation :

$$\begin{aligned} [\mathcal{T}_2\delta w](k) &= \mathcal{T}_2[\delta w(k)] = \mathcal{T}_2 \left[\sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-i)^l}{l!} \delta w_l k^l \right], \\ [\mathcal{T}_2\delta w](k) &= \sum_{l=1}^{\infty} \mathcal{T}_2 \left[\frac{(-i)^l}{l!} \delta w_l k^l \right]. \end{aligned} \tag{b}$$

Par identification entre (a) et (b) :

$$\mathcal{T}_2 \left[\frac{(-i)^l}{l!} \delta w_l k^l \right] = 2^{1-l} \frac{(-i)^l}{l!} \delta w_l k^l.$$

On reconnaît donc une équation aux valeurs propres :

$$[\mathcal{T}_2\delta w(k^l)] = f(l)\delta w(k^l).$$

Par linéarité de $\mathcal{T}_2$, cette dernière équation se simplifie :

$$\mathcal{T}_2(k^l) = 2^{1-l}k^l.$$

Et en itérant m fois :

$$\mathcal{T}_2^m(k^l) = 2^{m(1-l)}k^l.$$

— Pour $l = 1$ et $m \rightarrow +\infty$:

$$w(k) = w^*(k) + \delta w(k) = w^*(k) - i\delta w_1 k \quad \text{est aussi solution}$$

et ainsi

$$w_1 \rightarrow w_1 + \delta w_1 \text{ est un nouveau point fixe.}$$

$\implies$ Une **perturbation propre** de valeur propre 1 est dite **marginale** (terminologie du groupe de renormalisation)

— Pour $l > 1$ et $m \rightarrow +\infty$, on a :

$$\text{Valeur propre } 2^{m(1-l)} \rightarrow 0.$$

Une **perturbation propre** de valeur propre inférieure à 1 est dite **irrélevante ou inessentielle**

L'universalité, en théorie du groupe de renormalisation, émerge du fait que tous les vecteurs propres -sauf un certain nombre- sont irrélevants.

3.3 Classe d'universalité du mouvement Brownien ($w_1 = 0$)

3.3.1 Points fixes

En faisant l'hypothèse d'une distribution centrée, c'est à dire telle que $w_1 = 0$, on peut montrer que (le faire) :

$$W_n^*(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi w_2 n}} e^{-\frac{x^2}{2w_2 n}}.$$

En passant dans le continu (avec $n \rightarrow t$ et $w_2 \rightarrow D$) on reconnaît à nouveau la densité de probabilité associée au mouvement Brownien. Cette densité dicte les transformations d'échelle (renormalisations) suivante

$$\begin{cases} t \rightarrow t' = \frac{t}{2} & \Rightarrow & x \rightarrow x' = \frac{x}{\sqrt{2}}, \\ t \rightarrow t' = 2t & \Rightarrow & x \rightarrow x' = \sqrt{2}x. \end{cases}$$

ou plus généralement $x \propto \sqrt{t}$. La procédure consistant à recenser les puissances respectives affectées aux échelles d'espace et de temps du point fixe s'appelle "power counting". Dans ce contexte, le mouvement Brownien émerge comme un invariant asymptotique des opérations de rescaling (ou de renormalisation) : il est un point fixe de la procédure visant à lisser les détails et à considérer la marche aléatoire -définie à une échelle microscopique- sur une échelle macroscopique. Comme à la section précédente, cela se fait avec très peu d'hypothèses sur la marche aléatoire elle même (w_2 doit exister, c'est à dire la variance de la marche aléatoire doit être finie). Reste à statuer sur la stabilité de ce point fixe.

3.3.2 Stabilité

Une étude de stabilité similaire à celle mise en oeuvre pour le mouvement linéaire (la mener) aboutit à distinguer les 3 cas de figure ci dessous.

- $l = 1$ et $m \rightarrow +\infty$: la valeur propre diverge ce qui signifie que la perturbation va écartier le système du point fixe. Cette perturbation est dite **relevante ou essentielle**
- $l = 2$ et $m \rightarrow +\infty$: on a alors $w_2 \rightarrow w_2 + \delta w_2$, ce qui identifie un nouveau point fixe. La perturbation "propre" de valeur propre 1 est dite **marginale**
- $l > 2$ et $m \rightarrow +\infty$: la valeur propre $2^{m(1-\frac{l}{2})}$ tend vers 0. La perturbation "propre" de valeur propre de module < 1 est dite **irrélevante ou inessentielle**

3.3.3 Remarques

Quelques remarques sans lien :

- Le mouvement de drift (associé à w_1) est essentiel vis à vis du rescaling $\lambda = \sqrt{2}$ mais on a considéré un processus centré ($w_1 = 0$) en hypothèse de cette sous-section (la classe d'universalité du mouvement linéaire a déjà été discutée).
- Une hypothèse faite jusqu'à présent est de considérer que $w(k)$ était une fonction régulière. Si ce n'est pas le cas, on peut montrer qu'il existe des points fixes dans la procédure d'itération associés à $|k|^\mu$ avec $0 < \mu < 2$. C'est notamment le cas de processus stochastiques pour lesquels la variance n'est pas définie. La classe d'universalité associée est celle des sauts/vols de Levy (on pense par exemple à $W(x) = \frac{1}{1+x}$ qui n'admet ni variance ni même une moyenne). Pour ces processus néanmoins, la localité est perdue, et nous ne les considérerons par conséquent pas dans la suite.
- Les **exposants critiques** sont associés à l'invariance d'échelle autour des points fixes et permettent de caractériser le comportement de diverses grandeurs physiques à la "criticité"/transition de phase. Pour la classe d'universalité du Brownien, qui regroupe de très nombreux phénomènes de marche aléatoire et de diffusion, un de ces exposants critiques est l'exposant d'échelle temporelle z , apparaissant dans $\langle x^2(t) \rangle \sim t^{2/z}$, qui vaut par conséquent 2.

3.4 Conclusions

Peu de théories physiques sont invariantes d'échelle. L'approche proposée par le groupe de renormalisation (qui n'est stricto sensu pas un groupe mais plutôt un semi-groupe car on ne procède que par zoom-out et pas par zoom-in) consiste à observer le comportement du système lors des changements d'échelle (ici d'échelle de temps et d'espace, mais cela peut être d'énergie également). Cette approche s'est avérée puissante car elle a permis de montrer qu'une très large variété de processus semblaient se comporter de la même manière "vus de loin". Cette universalité du mouvement Brownien, qui a été en particulier étudiée dans cette section, explique sans doute son omniprésence dans la construction des théories physiques : peu importe finalement -dans une certaine mesure- les détails à très petite échelle si l'on dispose de lois valides à l'échelle spatiale ou énergétique d'intérêt. On va maintenant voir comment intégrer ces réflexions dans une théorie physique classique (c'est à dire non quantique) qui contient éventuellement un potentiel V (teaser : on verra que le mouvement Brownien est en fait le propagateur libre de très nombreuses théories physiques).

Bibliographie

Cette section s'appuie en grande partie sur les références suivantes.

- [Zin1] "QTF and Critical Phenomena" cinquième édition, J.Zinn-Justin, Oxford Science publications
- [Zin2] Vidéo et cours en ligne, "An introduction to Quantum Field Theory I by J. Zinn-Justin"

4 Mesure de Wiener et intégration fonctionnelle

Les travaux d'Einstein et de Smoluchowski publiés en 1905 et 1906 permirent de connecter l'équation de la diffusion au mouvement Brownien, lui même compris comme la loi générale de processus erratiques -stochastiques. Au delà de cette connexion, ces travaux établissent un constat puissant puisqu'ils proposent une équation pour les propriétés de transition des processus Markoviens. Cette équation, connue alors comme l'équation d'Einstein-Smoluchowski est connue aujourd'hui sous le nom d'équation de Chapman-Kolmogorov. En suivant scrupuleusement une approche proposée par Wiener dans une série de papiers publiés de 1920 à 1923, et ayant pour point de départ l'équation de Chapman-Kolmogorov, cette section a pour objectif de présenter au lecteur des éléments introductifs liés à l'intégrale de Wiener. L'intégration de Wiener est ici prise comme cas particulier d'une classe de mesure d'intégration généralisée, dite intégration fonctionnelle (on cherche à intégrer contre des fonctions), également discutée dans la présente section. On s'intéresse d'abord à la particule Brownienne "libre" (c'est à dire dans un potentiel $V = 0$) puis à la particule Brownienne évoluant dans un potentiel. On montrera notamment comment certaines approches diagrammatiques permettent d'utiliser les résultats établis pour la particule afin de les décliner à la particule confinée.

4.1 Un peu de mathématiques : l'intégrale fonctionnelle

Le point de départ est donc l'équation de Chapman-Kolmogorov, établie par Einstein et Smoluchowski,

$$p(x, t|x_0, t_0) = \int_{\mathbb{R}} p(x, t|x_1, t_1)p(x_1, t_1|x_0, t_0) dx_1.$$

Cette propriété des processus Markoviens est dite de semi-groupe (on a bien la fermeture et l'associativité mais pas d'élément neutre et d'inverse en raison de la flèche du temps). La construction de la mesure de Wiener prend pour point de départ une généralisation triviale de cette formule par itération sur N pas de temps successifs $t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_N$:

$$p(x, t|x_0, t_0) = \int_{\mathbb{R}^N} p(x, t|x_N, t_N)p(x_N, t_N|x_{N-1}, t_{N-1}) \dots p(x_1, t_1|x_0, t_0) \prod_{i=1}^N dx_i.$$

Dans le cas du mouvement brownien, chacune des probabilités intermédiaire est connue et donnée par :

$$p(x, t|x_0, t_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t-t_0)}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4D(t-t_0)}}.$$

Le problème que formule Wiener, et auquel il apporte une réponse, est illustré Figure 5 : existe-t-il une mesure d'intégration complète et additive μ -si oui, laquelle- telle qu'une particule Brownienne (i.e. dont l'évolution temporelle est donnée par l'équation 4.1) passe par l'ensemble des bornes d'intégration spécifiées sur la figure ? En reportant la nomenclature de la figure dans les bornes de l'intégrale, il est possible de sélectionner les chemins autorisés et d'écrire la probabilité qu'un chemin passe par ces points :

$$\mu_{t_1, A_1, B_1; t_2, A_2, B_2; \dots; t_N, A_N, B_N} = \int_{B_N}^{A_N} \dots \int_{B_1}^{A_1} \frac{e^{-\frac{(x-x_N)^2}{4D(t-t_N)}}}{\sqrt{4\pi D(t-t_N)}} \frac{e^{-\frac{(x_N-x_{N-1})^2}{4D(t_N-t_{N-1})}}}{\sqrt{4\pi D(t_N-t_{N-1})}} \dots \frac{e^{-\frac{(x_1-x_0)^2}{4D(t_1-t_0)}}}{\sqrt{4\pi D(t_1-t_0)}} dx_1 dx_2 \dots dx_N \quad (2)$$

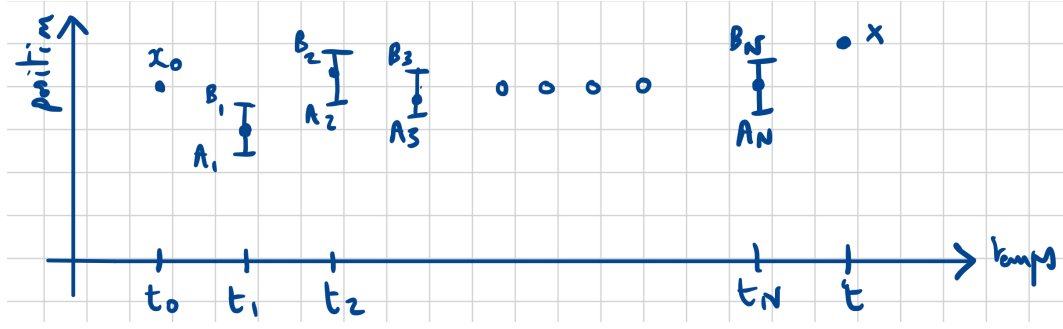


FIGURE 5 – Quelle est la probabilité qu’une particule Brownienne partant de x_0 et arrivant en x soit passée par l’ensemble des portes représentées ?

soit

$$\mu_{t_1, A_1, B_1; t_2, A_2, B_2; \dots; t_N, A_N, B_N} = \int_{B_N}^{A_N} \dots \int_{B_1}^{A_1} \prod_{i=1}^N \frac{dx_i}{\sqrt{4\pi D(t_i - t_{i-1})}} e^{-\sum_{i=1}^N \frac{(x_i - x_{i-1})^2}{4D(t_i - t_{i-1})}}. \quad (3)$$

Intégration fonctionnelle : quelques considérations mathématiques

On note :

$$\mathcal{F} = \{x : t \rightarrow x(t) / x \in C^0([t_0, +\infty[), x(t_0) = x_0\}$$

l’ensemble des x tels que $x(t)$ soit continue et $x(t_0) = x_0$. On définit les sous-ensembles I de $\mathcal{F}$ (dits ensembles cylindriques ou quasi-intervalles) tels que :

$$I_{t_1, A_1, B_1; \dots; t_N, A_N, B_N} = \{x \in \mathcal{F} / x(t_i) \in [A_i, B_i], \forall i \in \{1, \dots, N\}\}.$$

Et on associe la mesure de Wiener μ_W à chacun d’eux via :

$$\mu_W(I_{t_1, A_1, B_1; \dots; t_N, A_N, B_N}) = \mu_{t_1, A_1, B_1; \dots; t_N, A_N, B_N}.$$

Cette mesure permet alors de construire la σ -algèbre $\mathcal{F}$ engendrée par les ensembles cylindriques, définie comme le plus petit ensemble de $\mathcal{F}$ stable par intersection dénombrable et complémentaire. On est donc capable d’intégrer des fonctions de fonction (= fonctionnelles) par rapport à des fonctions. Ce calcul intégral sur un espace dimension ∞ se fait sur $\mathcal{F}$ (ensemble des trajectoires réalisables et la mesure μ_W). En termes de notations, si Φ est une fonctionnelle mesurable

$$\Phi : \left(\begin{array}{c} \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R} \\ x \mapsto \Phi(x) \end{array} \right)$$

alors on note :

$$\langle \Phi \rangle_W = \int_{\mathcal{F}} \Phi[x] d\mu_W[x].$$

4.2 Particule Brownienne libre ($\neq V$) "moyenne"

On cherche à utiliser ce formalisme pour calculer les propriétés de la particule Brownienne libre (c'est à dire en l'absence de potentiel V) et moyenne (c'est à dire qu'on intègre/moyenne sur les positions de sortie). Seule la contrainte sur la position de départ ($t_0 = 0, x_0 = 0$) est fixée. Considérons successivement le cas de la fonctionnelle à 1 point, puis à 2 points puis à N points.

4.2.1 Fonctionnelle à 1 point

Pour calculer la position moyenne $\langle x(t) \rangle$ de la particule, on considère comme fonction Φ la fonction d'évaluation au temps t

$$\Phi = \text{eval}_t : \left(\begin{array}{c} \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R} \\ x \mapsto x(t) \end{array} \right)$$

Cette **fonctionnelle à un point** s'écrit :

$$\langle \Phi \rangle_W = \int_{\mathcal{F}} e_t d\mu_W = \int a \times \text{mesure}\{x \in \mathcal{F} / x(t) \in [a; a + da]\}$$

ou de manière équivalente

$$\langle x(t) \rangle = \int a \frac{e^{-\frac{a^2}{4Dt}}}{\sqrt{4\pi Dt}}$$

Comme l'intégrale sur un domaine symétrique du produit d'une fonction paire et d'une fonction est nulle il vient

$$\langle x(t) \rangle = 0.$$

Ce résultat indique que la moyenne de la position d'une particule Brownienne démarrant au centre est nulle (un résultat raisonnable...). De même, la fonctionnelle à 1 point permet de calculer la dispersion caractéristique $\langle x^2(t) \rangle$ via

$$\Phi = \text{eval}_t^2 : \left(\begin{array}{c} \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R} \\ x \mapsto x^2(t) \end{array} \right)$$

puisque

$$\langle x^2(t) \rangle = \langle \Phi \rangle_W = \int a^2 \cdot \frac{e^{-\frac{a^2}{4Dt}}}{\sqrt{4\pi Dt}} da.$$

Et en reconnaissant le second moment d'une Gaussienne il vient

$$\langle x^2(t) \rangle = 2Dt.$$

4.2.2 Fonctionnelle à 2 points

En utilisant une **fonctionnelle à 2 points**, on peut aussi calculer la corrélation temporelle de Brownienne :

$$\Phi = \text{eval}_t \otimes \text{eval}_{t'} : \left(\begin{array}{c} \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R} \\ x \mapsto x(t)x(t') \end{array} \right)$$

D'où :

$$\langle x(t)x(t') \rangle = \langle \Phi \rangle_W = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx dx' x x'}{\sqrt{4\pi D t} \sqrt{4\pi D (t' - t)}} e^{-\frac{x^2}{2Dt} - \frac{(x' - x)^2}{2D(t' - t)}}.$$

ce qui mène à

$$\langle x(t)x(t') \rangle = 2Dt$$

(faire la démonstration)

4.2.3 Fonctionnelle à N points

Enfin, il est possible de construire une **fonctionnelle à N points** :

$$\Phi_N : \left(\begin{array}{c} \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R} \\ x \mapsto \Phi_N(x(t_1), \dots, x(t_N)) \end{array} \right)$$

qui s'écrit

$$\langle \Phi_N \rangle_W = \int \prod_{i=1}^N \frac{dx_i}{\sqrt{4\pi D(t_i - t_{i-1})}} e^{-\sum \frac{(x_i - x_{i-1})^2}{4D(t_i - t_{i-1})}} \Phi_N(x(t_1), \dots, x(t_N)).$$

qu'on peut voir comme une simple généralisation de [3]. En passant cette équation à la limite $N \rightarrow \infty$, on construit des **fonctionnelles à une infinité de points** :

$$\langle \Phi \rangle_W = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \Phi_N \rangle_W = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{i=1}^N \frac{dx_i}{\sqrt{4\pi D(t_i - t_{i-1})}} e^{-\sum \frac{(x_i - x_{i-1})^2}{4D(t_i - t_{i-1})}} \Phi_N(x(t_1), \dots, x(t_N)).$$

Si on note $\Delta t = \frac{t}{N}$ alors quand $\Delta t \rightarrow 0$ le terme à l'intérieur de l'exponentielle prend la forme d'un terme cinétique puisque

$$-\frac{\Delta t}{4D} \sum_N \frac{(x_i - x_{i-1})^2}{\Delta t^2} \rightarrow -\frac{1}{4D} \int_0^t \dot{x}^2(\tau) d\tau$$

Notons également

$$\int_{x(0)=0} \mathcal{D}x(\tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{i=1}^N \frac{dx_i}{\sqrt{4\pi D(t_i - t_{i-1})}}$$

l'intégrale sur tous les chemins possibles, dite **intégrale de chemin**. L'utilisation combinée de ces notations permet d'aboutir à l'intégrale de chemin d'une fonction Φ quelconque via

$$\langle \Phi_N \rangle_W = \int_{x(0)=0} \mathcal{D}x(\tau) e^{-\frac{1}{4D} \int_0^t \dot{x}^2(\tau) d\tau} \Phi(x(\tau)).$$

On voit donc que l'intégrale de Wiener est une intégrale de chemins, et que le mouvement Brownien aboutit au terme cinétique à l'intérieur de l'action associée à cette intégrale de chemin. Cela donne des idées quant à la manière d'ajouter un potentiel V ! Une autre réflexion intéressante est que le terme cinétique est le deuxième ordre du développement limité de l'énergie relativiste. Le mouvement Brownien est donc naturellement cantonné à des théories non relativistes (cela apparaît trivialement par analyse dimensionnelle de l'équation de la chaleur, différentielle en temps et doublement différentielle en espace).

4.3 Particule Brownienne libre ($\neq V$) en (x, t)

On restreint à présent $\mathcal{F}$ à l'ensemble des fonctions telles que $x(t_0) = x_0$ et $x(t) = x$, ce qui revient à conditionner à la fois les points de départ et d'arrivée (pont Brownien). On note alors $G_0(x, t|x_0, t_0)$ le propagateur de cette théorie, qui exprime la probabilité que la particule aille de (x_0, t_0) à (x, t) . Ce propagateur s'écrit donc (la fonctionnelle Φ vaut 1 car on souhaite uniquement mesurer la probabilité sans pondérer par une quelconque fonction)

$$G_0(x, t|x_0, t_0) = \int_{x(0)=x_0}^{x(t)=x} \mathcal{D}x(\tau) e^{-\frac{1}{4D} \int_0^t \dot{x}^2(\tau) d\tau}. \quad (4)$$

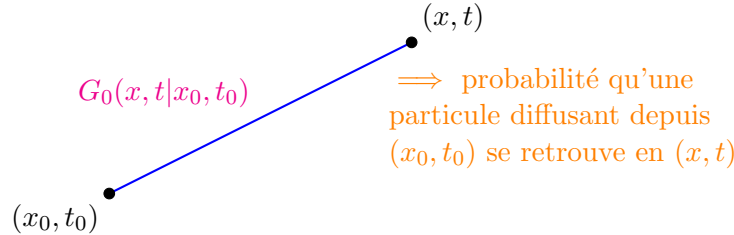
Cette intégrale se calcule facilement, puisque :

$$G_0(x, t|x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \frac{\prod_{i=1}^N dx_i}{\prod_{i=1}^{N+1} \sqrt{4\pi D(t_i - t_{i-1})}} e^{-\sum_{i=1}^{N+1} \frac{(x_i - x_{i-1})^2}{4D(t_i - t_{i-1})}} \quad (5)$$

(attention on intègre pas sur la position finale d'où le décalage des indices au numérateurs et au dénominateur) peut être réduite via l'application itérative de l'équation de Chapman-Kolmogorov, d'où :

$$G_0(x, t|x_0, t_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t - t_0)}} e^{-\frac{(x - x_0)^2}{4D(t - t_0)}}. \quad (6)$$

(en fait on vient de refaire la démarche proposée par Wiener dans le sens opposé, le résultat était donc trivial). Or, cette fonction est également la solution de l'équation diffusion en dimension 1 avec une condition initiale $G_0(x, t = t_0) = \delta(x - x_0)$ (ce qui explique l'attrait de la notation G faisant référence à une fonction de Green). Si cette nouvelle représentation du mouvement Brownien sous forme d'intégrale de chemin est longue à écrire, on peut la représenter simplement sous forme d'un diagramme associé au propagateur G_0 :



En résumé, comme représenté figure [6](#), on vient de finaliser une troisième représentation du mouvement Brownien, à l'aide d'intégrales de chemin. La question qui se pose à présent est de savoir comment ces approches se généralisent lorsque la particule évolue dans un potentiel V . Du point de vue de l'équation de Fokker-Planck, l'ajout d'un potentiel vient ajouter un terme linéaire vis à vis de la fonction de Green, ce qui généralise l'équation à la classe des processus de réaction-diffusion discuté en première section. Du point de vue de la marche aléatoire, ce potentiel agit comme une probabilité de capture dépendant de l'espace. La sous-section suivante va quand à elle s'intéresser à l'effet du potentiel sur l'approche par intégrale de chemin.

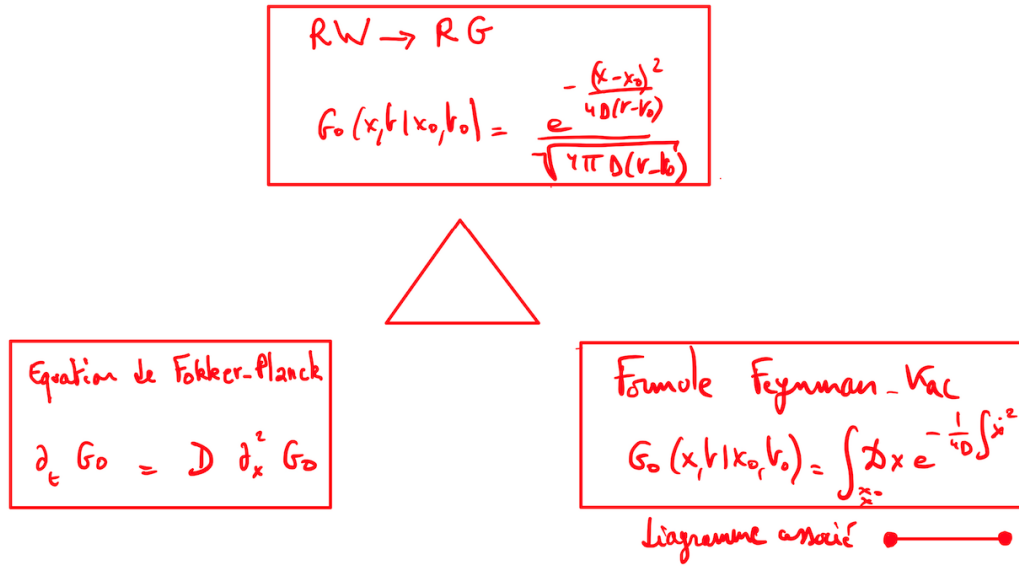


FIGURE 6 – 3 représentations de la diffusion et du mouvement Brownien (via l'équation de Fokker-Planck, via les marches aléatoires et le groupe de renormalisation et via les intégrales de chemin

4.4 Particule Brownienne dans un potentiel V

Dans le cas où la particule diffuse dans un potentiel V , l'équation de la diffusion s'écrit :

$$\partial_t G_V = D \Delta G_V - V(x) G_V \quad (+\text{c.i.}) \quad (7)$$

G_V est la fonction de Green associée à cette équation dans le potentiel V , avec la condition initiale $G_V(x, t = t_0) = \delta(x - x_0)$. Le terme $-V(x)G_V$ avec $V(x) > 0$ peut être interprété comme un taux de capture de la particule. Si $V = 0$, la particule est libre. Si $V(x) < 0$ alors le système "créé" de la masse (ex : processus de branchement comme en épidémiologie ou en neutronique, cf Eq.??).

On souhaite à présent démontrer que le propagateur d'une particule sujette à l'équation de diffusion précédente peut s'écrire à l'aide de la formule suivante, dite **formule de Feynman-Kac** :

$$G_V(x, t | x_0, 0) = \left\langle e^{-\int_0^t V(x(\tau)) d\tau} \right\rangle_W = \int_{x(0)=x_0}^{x(t)=x} \mathcal{D}x(\tau) e^{-\int_0^t \left[\frac{1}{4D} \dot{x}^2(\tau) + V(x(\tau)) \right] d\tau}$$

Pour ce faire on développe l'exponentielle

$$\begin{aligned}
\left\langle e^{-\int_0^t V(x(\tau))d\tau} \right\rangle_W &= \left\langle \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \left(\int_0^t V(x(\tau))d\tau \right)^k \right\rangle_W \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \left\langle \frac{\left(\int_0^t V(x(\tau))d\tau \right)^k}{k!} \right\rangle_W \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k G_k(x, t|x_0, 0)
\end{aligned}$$

où le propagateur G_k à l'ordre k a été introduit. G_0 est ainsi donné par

$$G_V(x, t|x_0, 0) = \langle 1 \rangle_W = \int_{x(0)=x_0}^{x(t)=x} \mathcal{D}x(\tau) e^{-\frac{1}{4D} \int_0^t \dot{x}^2(\tau) d\tau}.$$

Le calcul de G_k pour k quelconque a été réalisé par Marc Kac dans un article séminal de 1957, intitulé "*Wiener and Integration in function spaces*". Le calcul qu'il développe prend en effet pour point de départ les travaux d'Einstein et Smoluchowski (1905), formalisés quelques années plus tard par Wiener (1920). Les travaux de Kac présentés ici ont mené à la démonstration de la formule dite de Feynman-Kac car, parallèlement -et un peu plus tôt- Richard Feynman avait mis au point, dans le contexte de sa thèse de doctorat, une intégrale de chemin similaire pour la mécanique quantique. Celle ci sera discutée en section suivante. Le calcul de Kac s'appuie sur l'observation suivante :

$$\int_0^t d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_1 V(x(\tau_2))V(x(\tau_1)) = \int_0^t d\tau_2 V(x(\tau_2)) \left[\int_0^{\tau_2} V(x(\tau_1))d\tau_1 \right].$$

Avec $\mathcal{V} = \int V(x(\tau))d\tau$ cette intégrale se réécrit :

$$\int_0^t d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_1 V(x(\tau_2))V(x(\tau_1)) = \int_0^t d\tau_2 V(x(\tau_2)) [\mathcal{V}(\tau_2) - \mathcal{V}(0)] = \frac{1}{2} [\mathcal{V}^2(x(\tau_2))]_0^t$$

et prend finalement la forme

$$= \frac{1}{2} \left[\int_0^t V(x(\tau))d\tau \right]^2.$$

Par récurrence sur G_k on obtient ainsi :

$$\begin{aligned}
G_k(x, t|x_0, 0) &= \left\langle \frac{1}{k!} \left(\int_0^t V(x(\tau))d\tau \right)^k \right\rangle_W \\
&= \left\langle \int_0^t d\tau_k \int_0^{\tau_k} d\tau_{k-1} \dots \int_0^{\tau_2} V(x(\tau_k))V(x(\tau_{k-1})) \dots V(x(\tau_1))d\tau_1 \right\rangle_W
\end{aligned}$$

soit, à l'ordre 1 :

$$G_1(x, t|x_0, 0) = \left\langle \int_0^t V(x(\tau_1))d\tau_1 \right\rangle_W$$

ou, en permutant l'intégrale de Wiener et l'intégrale en t :

$$G_V(x, t|x_0, 0) = \int_0^t \langle V(x(\tau_1)) d\tau_1 \rangle_W$$

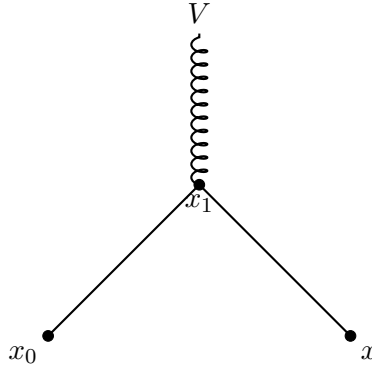
Le terme à l'intérieur de cette intégrale est une **fonctionnelle à 1 point** car on intègre uniquement sur tous les x au temps τ_1 donc

$$\begin{aligned} G_1(x, t|x_0, 0) &= \int_0^t d\tau_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \frac{e^{-\frac{(x-x_1)^2}{4D(t-\tau_1)}}}{\sqrt{4\pi D(t-\tau_1)}} V(x_1) \frac{e^{-\frac{(x_1-x_0)^2}{4D(t_1-t_0)}}}{\sqrt{4\pi D(t_1-t_0)}} \\ &= \int_0^t d\tau_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 G_0(x, t|x_1, \tau_1) V(x_1) G_0(x_1, \tau_1|x_0, 0) \end{aligned}$$

où :

- $x_1 = x(\tau_1)$
- le terme $\frac{e^{-\frac{(x-x_1)^2}{4D(t-\tau_1)}}}{\sqrt{4\pi D(t-\tau_1)}}$ est un terme supplémentaire (respectivement au papier original de Kac) permettant de contraindre la position de sortie en (x, t)
- $V(x_1) \frac{e^{-\frac{(x_1-x_0)^2}{4D(t_1-t_0)}}}{\sqrt{4\pi D(t_1-t_0)}}$ est l'évaluation de la fonctionnelle à 1 point faite en début de la présente section

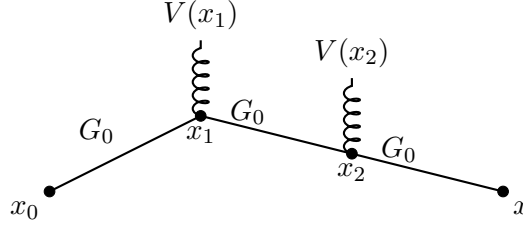
On peut alors introduire une diagrammatique proposée par Feynman permettant de judicieusement et succinctement représenter cette intégrale, à l'aide de lignes droites associées au propagateur libre G_0 et de lignes ondulées représentant l'interaction avec le potentiel V :



A l'ordre 2, on a une **fonctionnelle à deux points** :

$$G_2(x, t|x_0, 0) = \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 G_0(x, t|x_2, t_2) V(x_2) G_0(x_2, t_2|x_1, t_1) V(x_1) G_0(x_1, t_1|x_0, 0).$$

Comme avant, cette intégrale peut être représentée par un diagramme figurant des propagations libres et deux interactions successives avec le potentiel V :



Finalement, à l'ordre k , la **fonctionnelle à k points** s'écrit :

$$G_k(x, t|x_0, 0) = \int_0^t d\tau_k \int_0^{\tau_k} d\tau_{k-1} \dots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_k \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \prod_{i=1}^k dx_i \\ G_0(x, t|x_k, \tau_k) V(x_k) G_0(x_k, \tau_k|x_{k-1}, \tau_{k-1}) \dots V(x_1) G_0(x_1, \tau_1|x_0, 0).$$

Cette formule se contracte en utilisant la récurrence :

$$G_k(x, t|x_0, 0) = \int_0^t d\tau_k \int_{-\infty}^{\infty} dx_k G_0(x, t|x_k, \tau_k) V(x_k) G_{k-1}(x_k, \tau_k|x_0, 0).$$

Or, la fonction de Green de l'équation de la diffusion dans un potentiel s'écrit :

$$G_V(x, t|x_0, 0) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k G_k(x, t|x_0, 0)$$

d'où

$$G_V(x, t|x_0, 0) = G_0(x, t) + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k G_k(x, t|x_0, 0) \\ = G_0(x, t) + \int d\tau \int d\xi G_0(x, t|\xi, \tau) V(\xi) \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k G_{k-1}(\xi, \tau|x_0, 0)$$

Or le changement de variable $k-1 \rightarrow k'$ permet de montrer que la dernière somme de cette expression vaut $-G_V(\xi, \tau|x_0, 0)$. Par conséquent

$$G_V = G_0 - \int d\tau \int d\xi G_0 V G_V.$$

En fait, cette dernière égalité peut se retrouver à l'aide des diagrammes de Feynman (**retrouver la formule par une diagrammatique appropriée**)

Cela achève la démonstration de la formule de Feynman-Kac (**finaliser la démonstration**)

4.5 Conclusions

Dans cette section, on a introduit l'intégration fonctionnelle, puis on a vu comment utiliser cette dernière pour démontrer la formule de Feynman-Kac, en présentant au passage la

formulation diagrammatique permettant de calculer le propagateur de notre particule Brownienne libre ou dans un potentiel V . Ces outils statistiques sont puissants car ils permettent d'accéder au "champ moyen" mais également aux corrélations (temporelles, spatiales) et aux autres moments associées à notre théorie. Dans la section suivante, on va voir que cette théorie statistique est en fait intimement liée à la mécanique quantique, et permet d'en établir une reformulation féconde vis à vis de la physique théorique.

Bibliographie

Cette section s'appuie en très grande partie sur l'enseignement suivant.

- [1] Kirone Mallick (CEA/DRF/IPhT), "La formule de Feynman-Kac", mini-cours donné à l'Ecole Polytechnique en 2005



FIGURE 7 – Photographie (badge LANL) de Richard Feynman

5 Mécanique quantique et intégrales de chemin

La formulation en intégrales de chemin de la mécanique quantique, développée par Richard Feynman, s'inscrit dans un contexte scientifique riche au milieu du 20^e siècle. Richard Feynman (1918-1988), physicien américain, obtient son doctorat en 1942 sous la direction de John Wheeler à Princeton. Son travail portait sur l'électrodynamique quantique (QED) mais surtout posait déjà les bases d'une nouvelle approche pour formuler la mécanique quantique, en développant la méthode des intégrales de chemin. Cette idée repose sur une reformulation de la théorie quantique, inspirée des travaux antérieurs de Paul Dirac. Dirac avait envisagé la possibilité d'exprimer la mécanique quantique à l'aide de nombres complexes, en rapprochant cette formulation de principes issus de la mécanique classique. Feynman, sans nécessairement maîtriser toutes les subtilités mathématiques des intégrales de Wiener, discutées en section précédente, a eu l'intuition d'utiliser un formalisme basé sur la somme sur tous les chemins possibles empruntés par une particule entre deux points. Ce formalisme, souvent appelé aujourd'hui "le formalisme de Feynman", permet d'évaluer des amplitudes de transition à partir de contributions infinies des chemins possibles, pondérées par des phases déterminées par l'action classique. Après l'obtention de son doctorat, Feynman fut recruté en 1943 par le laboratoire américain de Los Alamos (Figure 7) pour participer au projet Manhattan, dont l'objectif était de développer la première arme atomique. Son rôle dans ce contexte consistait principalement à modéliser des phénomènes physiques complexes nécessaires à la conception de l'arme, ainsi qu'à simuler numériquement ces phénomènes. Également en thèse sous la direction de Wheeler quelques années plus tard, Hugh Everett s'appuya sur les travaux de Feynman pour proposer une interprétation de la mécanique quantique connue sous le nom des "mondes multiples". Cette interprétation cherche à résoudre le problème de la mesure en supposant que toutes les issues possibles d'une expérience quantique se réalisent dans des univers parallèles distincts. L'approche par intégrales de chemin de Feynman n'est pas seulement une reformulation élégante, mais se révèle être centrale dans la formulation contemporaine de la théorie quantique des champs qui sera présentée en seconde partie de ces notes de cours. On la présente donc dans cette section qui s'inscrit dans la continuité de la section précédente ou

on avait vu que

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Équation diffusion} \\ \text{dans un potentiel } V(x) \end{array} \right\} \Longleftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{Formule de Feynman-Kac} \\ \text{(intégrale de Wiener)} \end{array} \right\}$$

On va à présent montrer par deux approches différentes que

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Équation de Schrödinger} \\ \text{dans un potentiel } V(x) \end{array} \right\} \Longleftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{Intégrale de chemin} \\ \text{de Feynman} \end{array} \right\}$$

La première "démonstration" s'appuie sur la proximité entre l'équation de Schrödinger et l'équation de la chaleur. La seconde approche proposée sera celle mise en oeuvre par Feynman dans sa thèse de doctorat. Cette dernière permettra de passer en revue différents concepts qui seront mis en oeuvre de manière très similaire en théorie du champ (formalisme Lagrangien, formule de Trotter, intégration Gaussienne, principe de moindre action). En fin de section on s'intéressera à la limite classique de l'intégrale de chemin de Feynman, dans l'approximation de la phase stationnaire.

5.1 Equation de Schrödinger et formule de Feynman-Kac (1ère approche)

On a vu précédemment que l'équation de la diffusion d'une particule Brownienne dans un potentiel V s'écrivait :

$$\partial_t G = D\Delta G - V(x)G \quad (8)$$

Si on fait le changement de variables :

$$D \rightarrow \frac{\hbar}{2m}, \quad V \rightarrow \frac{V}{\hbar}, \quad G \rightarrow K$$

et la rotation de Wick $t \rightarrow it$, cette équation se réécrit :

$$\frac{\hbar}{2m}\Delta K - \frac{V}{\hbar}K = i\hbar\partial_t K$$

qui mène donc à l'équation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta K + V(x)K = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}K \quad (9)$$

Or on a montré que l'équation [8](#) est équivalente à :

$$G(x, t|x_0, t_0) = \int_{x(t_0)=x_0}^{x(t)=x} \mathcal{D}x(\tau) e^{-\int_{t_0}^t d\tau \left(\frac{1}{4D}\dot{x}^2(\tau) + V(x(\tau)) \right)} \quad (10)$$

Par conséquent, sans trop se poser de questions, le même changement de variables laisse penser que la solution de l'équation de Schrödinger [9](#) s'écrit également sous forme d'une intégrale de chemins :

$$K(x, t|x_0, t_0) = \int_{x(t_0)=x_0}^{x(t)=x} \mathcal{D}x(\tau) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \left(\frac{m}{2}\dot{x}^2(\tau) - V(x(\tau)) \right)} \quad (11)$$

De la même manière que $G(x, t|x_0, t_0)$ était désigné sous le nom de propagateur dans le contexte de la mécanique statistique, la fonction $K(x, t|x_0, t_0)$ porte également le nom de

propagateur dans le contexte de la mécanique quantique (ou de noyau de propagation, ou de fonction de Green de l'équation de Schrödinger). Elle représente l'amplitude de probabilité que la particule passe de x à x entre les instants t et t' . Afin d'interpréter ces résultats, introduisons les notations suivantes.

Aparté sur le formalisme lagrangien

On considère un lagrangien $L(x, \dot{x})$ et on définit :

$$p \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \quad (\text{moment})$$

et le hamiltonien :

$$H(x, p) \equiv p\dot{x} - L$$

Par exemple, si $L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)$ alors :

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$$

et :

$$H = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x) \right)$$

$$H = m\dot{x}^2 + V(x)$$

Enfin, on définit l'action :

$$S \equiv \int_{t_0}^t L(x, \dot{x}) dt$$

En utilisant ces notations, de la même manière qu'on avait :

$$D\Delta G - V(x)G = \partial_t G \iff G(x, t) = \int \mathcal{D}x e^{-\int d\tau H(x, \dot{x})} \quad (12)$$

on a maintenant :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta K + V(x)K = i\hbar\partial_t K \iff K(x, t) = \int \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar}\int d\tau L(x, \dot{x})} \quad (13)$$

La démonstration mathématique de la convergence de l'intégrale de chemin apparaissant Eq.12 a été faite par Kac en 1959. Cette démonstration fut facilitée par l'exponentielle décroissante de l'action S . La convergence de l'intégrale oscillante apparaissant Eq.13 fut en revanche peu discutée par Feynman et Wheeler en 1942, et reste encore aujourd'hui un sujet d'interrogations. Certains travaux de Cécile DeWitt-Morette portent sur cette question. La formule :

$$K(x, t) = \int \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar}S} \quad (14)$$

est en fait une "nouvelle manière" de formuler la mécanique quantique, qui servira de socle à l'établissement de la QED (électrodynamique quantique) puis de la QCD (chromodynamique

quantique), les deux théories dont résulte le modèle standard de la physique des particules. Cette "intégrale de chemin" est également appelée "intégrale de configuration", car elle implique une somme sur toutes les trajectoires possibles de la particule qui sont autant de configurations possibles du système. L'ensemble de ces configurations doit être pris en compte pour calculer concrètement les observables d'intérêt. Cette réflexion a d'ailleurs amené Hugh Everett (1930-1982, PhD en 1957) à postuler une existence physique à ces configurations via l'interprétation "Many Worlds" de la mécanique quantique, suite à ses travaux dirigés par Wheeler : pour peu que l'on soit prêt à accepter l'existence "réelle" de tous ces possibles, cette interprétation résout le problème de la mesure en épargnant la nécessité de recourir à l'effondrement de la fonction d'onde. Au delà des questions d'interprétation, les intégrales de chemin offrent une prescription formelle permettant de quantifier un système : elles constituent le socle mathématique sur lequel sera établie la théorie quantique des champs et ses extensions au-delà du modèle standard (gravité quantique, théorie des cordes). Pour achever ce paragraphe sur la vision "stochastique" de la mécanique quantique, il reste à construire le lien entre K et la probabilité de présence $p(x, t)$ de la particule en (x, t) , en prenant notamment en compte les conditions initiales. Cela se fait via

$$p(x, t) = \Psi(x, t)\Psi^*(x, t).$$

où $\Psi(x, t)$ est solution de :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V\Psi = i\hbar\partial_t\Psi \\ \Psi(x, t=0) = \Psi_0(x) \quad (\text{c.i.}) \end{cases}$$

La fonction d'onde Ψ est donnée par la convolution de K et de la condition initiale Ψ_0 :

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, t|x_0, 0) \Psi_0(x_0) dx_0,$$

où K est solution de l'équation 14 avec $K(x, t=0) = \delta(x - x_0)$.

5.2 Equation de Schrödinger et formule de Feynman-Kac (2ème approche)

En fait l'approche proposée ci-dessus ne constitue pas une démonstration de l'équivalence Schrödinger/intégrales de chemin à proprement parler, mais plutôt une construction directe de la mécanique quantique dans un cadre interprétatif les adossant à une approche stochastique (on part de la formule démontrée de Feynman-Kac puis on réalise un changement de variable, une rotation de Wick et l'on propose une interprétation aux grandeurs physiques). Pour démontrer littéralement l'équivalence entre l'équation de Schrödinger et les intégrales de chemin, on peut procéder plus directement et partir de l'équation de Schrödinger. C'est ce qui est proposé dans cette sous-section, après un rappel des notations couramment utilisées en mécanique quantique. On discutera, au passage, de la formule de Trotter et d'intégrales Gaussiennes.

Notations

La fonction d'onde $\Psi(x)$ devient un élément (ket) $|\Psi\rangle$ de l'espace de Hilbert des fonctions/états $L^2(\mathbb{R})$ (carré intégrable). On fait évoluer un état dans le temps via l'équation de

Schrödinger :

$$i\hbar\partial_t |\Psi_t\rangle = \hat{H} |\Psi_t\rangle,$$

où :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$$

est un opérateur auto-adjoint sur L^2 . La résolution de cette équation donne :

$$|\Psi_t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |\Psi_0\rangle,$$

avec :

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \in U(N),$$

le groupe des opérateurs unitaires ($U^\dagger U = UU^\dagger = \mathbb{I}$ préservant le produit scalaire), où N dépend du système avec par exemple :

- $N = 1$: particule sans spin en dimension d'espace quelconque ;
- $N = 2$: particule de Dirac (spin 1/2) en dimensions 1 et 2) ;

Pour calculer une grandeur physique, on lui associe un opérateur $\hat{O}$, défini par :

$$\langle \hat{O} \rangle = \int \Psi^*(x) \hat{O} \Psi(x) dx = \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle.$$

Par exemple, pour $\hat{O} = \hat{x}$ (opérateur position) :

$$\langle x \rangle = \int x |\Psi(x)|^2 dx.$$

Avec ces notations :

$$\Psi_t(x) = \Psi(x, t) = \langle x | \Psi_t \rangle = \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} | \Psi_0 \rangle.$$

et en insérant la relation identité :

$$\Psi_t(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} | x_0 \rangle \langle x_0 | \Psi_0 \rangle.$$

avec :

$$K(x, t | x_0, t_0) = \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} | x_0 \rangle, \quad \text{et } \Psi_0(x_0) = \langle x_0 | \Psi_0 \rangle.$$

On cherche donc, dans ces notations, à démontrer que :

$$K(x, t | x_0, t_0) = \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} | x_0 \rangle = \int \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar}S[x(\tau)]}$$

Démonstration de Feynman

Pour ce faire, partitionnons le temps en divisant l'intervalle $[0, t]$ en N parties, avec $\Delta t = \frac{t}{N}$, comme indiqué Figure 8. L'opérateur exponentiel s'écrit alors :

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \left(e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t} \right)^N.$$

Si on utilise $N - 1$ fois la résolution de l'identité $\mathbb{I} = \int dx_i |x_i\rangle \langle x_i|$ (qui est l'équivalent en

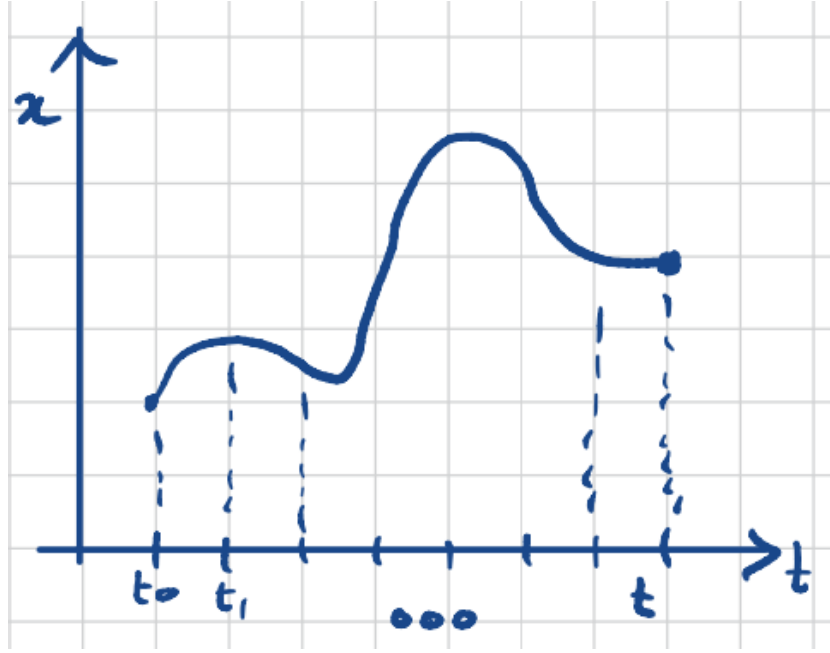


FIGURE 8 – Partition temporelle

mécanique quantique de la relation de Chapman-Kolmogorov pour les processus stochastiques) alors on a

$$\langle x_N | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | x_0 \rangle = \int dx_1 dx_2 \cdots dx_{N-1} \langle x_N | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} | x_{N-1} \rangle \cdots \langle x_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} | x_0 \rangle .$$

Chacun des termes $\langle x_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} | x_j \rangle$ peut être calculé via la relation de Baker-Campbell-Hausdorff :

$$e^{\frac{\hat{X}}{N}} e^{\frac{\hat{Y}}{N}} \approx e^{\frac{\hat{X} + \hat{Y}}{N} + \frac{1}{2} \left[\frac{\hat{X}}{N}, \frac{\hat{Y}}{N} \right] + \dots}$$

qui mène, pour $N \gg 1$, au premier ordre en N (en négligeant les crochets) et en introduisant $\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}$, à la formule de Trotter :

$$\begin{aligned} \langle x_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} | x_j \rangle &\approx \langle x_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{K} \Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{V} \Delta t} | x_j \rangle \\ &\approx e^{-\frac{i}{\hbar} V(x_j) \Delta t} \langle x_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{K} \Delta t} | x_j \rangle \end{aligned} \quad (15)$$

Comme $\hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ est naturellement exprimé dans la base complète des moments propres $|p\rangle$, on réécrit :

$$\begin{aligned} \langle x_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{K} \Delta t} | x_j \rangle &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \langle x_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m} \Delta t} | p \rangle \langle p | x_j \rangle \\ &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \Delta t} \langle x_{j+1} | p \rangle \langle p | x_j \rangle \end{aligned} \quad (16)$$

où l'introduction du facteur $2\pi\hbar$ est discutée dans l'aparté ci dessous concernant la convention du facteur de Fourier choisie.

Aparté : Transformée de Fourier

Louis Victor de Broglie (1892-1987) est un physicien français récipiendaire du prix Nobel de physique en 1929 pour sa découverte de la nature ondulatoire des électrons. Il associe ainsi pour la première fois une onde plane $e^{i\frac{p}{\hbar}x}$ aux particules de matière. Les variables x et p se retrouvent alors être des variables conjuguées de Fourier, ce qui découle sur le principe d'incertitude $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$. En termes de conventions de Fourier, la convention usuelle en physique est de faire accompagner les impulsions du facteur $\sqrt{2\pi\hbar}$:

$$\begin{aligned} |x\rangle &= \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px} |p\rangle, \\ |p\rangle &= \int dx e^{+\frac{i}{\hbar}px} |x\rangle. \end{aligned} \quad (17)$$

Avec ces conventions, les relations suivantes sont satisfaites :

$$\begin{aligned} \langle x|x'\rangle &= \delta(x-x') \\ \langle p|p'\rangle &= \int dx e^{-\frac{i}{\hbar}px} \int dx' e^{-\frac{i}{\hbar}p'x'} \langle x|x'\rangle = \int dx e^{i(p-p')x} = 2\pi\hbar\delta(p-p') \\ \langle x|p\rangle &= \int dx' e^{\frac{i}{\hbar}px'} \langle x|x'\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}px} \end{aligned} \quad (18)$$

En utilisant ces conventions il s'en suit que

$$\langle x_{j+1}| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{K}\Delta t} |x_j\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\Delta t} \langle x_{j+1}|p\rangle \langle p|x_j\rangle.$$

Substituons $\langle x_{j+1}|p\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}px_{j+1}}$ et $\langle p|x_j\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}px_j}$:

$$\langle x_{j+1}| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{K}\Delta t} |x_j\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\Delta t} e^{\frac{i}{\hbar}px_{j+1}} e^{-\frac{i}{\hbar}px_j}.$$

Donc en factorisant les termes exponentiels, on obtient :

$$\langle x_{j+1}| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{K}\Delta t} |x_j\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\Delta t} e^{\frac{i}{\hbar}p(x_{j+1}-x_j)}.$$

Cela met en évidence une intégrale Gaussienne dont la résolution sera utile pour le développement en intégrale de chemin. Elle est discutée dans l'aparté suivant.

Aparté : Intégration Gaussienne

On cherche à calculer l'intégrale gaussienne suivante :

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2}} dx.$$

En considérant I^2 :

$$I^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2} - \frac{y^2}{2}} dx dy,$$

on passe en coordonnées polaires avec $x = r \cos \theta$, $y = r \sin \theta$:

$$I^2 = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{+\infty} r e^{-\frac{r^2}{2}} dr.$$

En résolvant, on trouve :

$$I = \sqrt{2\pi}.$$

Le calcul de ce type d'intégrale est central et récurrent en théorie quantique des champs, où l'on cherchera fréquemment à conditionner les intégrales de type :

$$\int dx e^{-S[x]}$$

sous forme d'intégrales Gaussiennes.

Introduction d'une constante dans l'exponentielle En suivant le même raisonnement on montre que pour $a > 0$, on a :

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a\frac{x^2}{2}} dx = \sqrt{\frac{2\pi}{a}}.$$

Or, pour une expression quadratique générale $-a\frac{x^2}{2} + bx + c$, on peut réécrire :

$$-a\frac{x^2}{2} + bx + c = -\frac{a}{2} \left(x^2 - \frac{2b}{a}x - \frac{2c}{a} \right),$$

ce qui donne, après complétion du carré :

$$-a\frac{x^2}{2} + bx + c = -\frac{a}{2} \left(x - \frac{b}{a} \right)^2 + \frac{b^2}{2a} + c.$$

Ainsi, l'intégrale devient :

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a\frac{x^2}{2} + bx + c} dx = e^{\frac{b^2}{2a} + c} \sqrt{\frac{2\pi}{a}}.$$

Cette formule sera utilisée dans la suite de cette section. Néanmoins, on poursuit le raisonnement pour gagner en généralité, et parce que les résultats de la suite de cet aparté seront repris en 2ème partie du cours.

Aparté : Intégration Gaussienne (suite)

Cas à deux variables On peut considérer l'intégrale gaussienne de la forme

$$I = \int_{\mathbb{R}^2} \exp(-a_1 x^2 - a_2 y^2) \, dx \, dy.$$

Grâce à la séparation des variables, on a :

$$I = \left(\int_{\mathbb{R}} \exp(-a_1 x^2) \, dx \right) \times \left(\int_{\mathbb{R}} \exp(-a_2 y^2) \, dy \right).$$

Or, on sait que pour une variable,

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-ax^2} \, dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}},$$

d'où

$$I = \sqrt{\frac{\pi}{a_1}} \sqrt{\frac{\pi}{a_2}} = \frac{\pi}{\sqrt{a_1 a_2}}.$$

Dans un langage de formes quadratiques, on peut réécrire l'exposant sous la forme

$$-\frac{1}{2} \begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2a_1 & 0 \\ 0 & 2a_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix},$$

qui met en évidence la matrice associée, et généralise bien aux dimensions supérieures.

Cas à N variables On considère maintenant une forme quadratique en dimension N :

$$I = \int_{\mathbb{R}^N} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{x}^T A \mathbf{x}\right) \, d^N \mathbf{x},$$

où A est une matrice réelle, symétrique et définie positive de taille N .

Diagonalisation. Puisque A est symétrique réelle et définie positive, il existe une base orthonormée dans laquelle A est diagonale. Autrement dit, il existe une matrice orthogonale O telle que

$$O^T A O = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_N \end{pmatrix} = \Delta,$$

avec $\lambda_i > 0$ pour tout i .

Changement de variable. Si l'on pose $\mathbf{y} = O^T \mathbf{x}$, le Jacobien de la transformation orthogonale vaut 1 (car $\det O = \pm 1$), de sorte que $d^N \mathbf{x} = d^N \mathbf{y}$. Alors l'exposant devient

$$-\frac{1}{2} \mathbf{x}^T A \mathbf{x} = -\frac{1}{2} (O\mathbf{y})^T A (O\mathbf{y}) = -\frac{1}{2} \mathbf{y}^T (O^T A O) \mathbf{y} = -\frac{1}{2} \mathbf{y}^T \Delta \mathbf{y} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i^2.$$

Aparté : Intégration Gaussienne (suite et fin)

Factorisation de l'intégrale. On obtient alors

$$I = \int_{\mathbb{R}^N} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i^2\right) d^N \mathbf{y} = \prod_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2} \lambda_i y_i^2\right) dy_i.$$

Chaque intégrale unidimensionnelle vaut

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2} \lambda_i y_i^2\right) dy_i = \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_i}}.$$

Le produit sur i s'écrit alors :

$$I = \prod_{i=1}^N \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_i}} = \sqrt{(2\pi)^N} \frac{1}{\sqrt{\lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_N}} = \sqrt{\frac{(2\pi)^N}{\lambda_1 \cdots \lambda_N}}.$$

Or, $\lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_N = \det(A)$. On en déduit la fameuse formule :

$$I = \int_{\mathbb{R}^N} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{x}^T A \mathbf{x}\right) d^N \mathbf{x} = \sqrt{\frac{(2\pi)^N}{\det(A)}}.$$

Remarques :

- Cette formule généralise le cas de la gaussienne classique (cas $N = 1$) où l'on retrouve $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2} a x^2} dx = \sqrt{\frac{2\pi}{a}}$, ainsi que sa généralisation à 2 variables, toutes deux vues ci dessus.
- On aurait pu généraliser directement le cas $N = 2$ à N quelconque sans ce dernier développement...
- Le changement de variable linéaire orthogonal ne modifie pas la mesure (Jacobien = 1).
- L'hypothèse de A symétrique définie positive est essentielle pour garantir la convergence de l'intégrale.

Comme dans la farce médiévale de maître Pathelin, "revenons en à nos moutons", forts de cette dernière digression :

$$\langle x_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m} \Delta t} | x_j \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \Delta t} e^{\frac{i}{\hbar} p(x_{j+1} - x_j)}.$$

Avec les substitutions :

$$\frac{a}{2} = \frac{i}{2m\hbar} \Delta t, \quad b = \frac{i}{\hbar} (x_{j+1} - x_j), \quad c = 0,$$

et en utilisant la formule de l'intégrale gaussienne généralisée, on trouve :

$$\langle x_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{K} \Delta t} | x_j \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2\pi m \hbar}{i \Delta t}} e^{\frac{im}{2\hbar \Delta t} (x_{j+1} - x_j)^2}.$$

Ainsi :

$$\langle x_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} | x_j \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\Delta t} - \frac{i}{\hbar} V(x_j) \Delta t}$$

En notant $x_N \equiv x$:

$$\begin{aligned} \langle x_N | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} | x_0 \rangle &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\Delta t} - \frac{i}{\hbar} V(x_j) \Delta t} \\ &= \int dx_{N-1} dx_{N-2} \dots dx_1 \\ &\langle x_N | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} | x_{N-1} \rangle \langle x_{N-1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} | x_{N-2} \rangle \dots \langle x_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} | x_0 \rangle \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{N/2} \int \left(\prod_{k=1}^{N-1} dx_k \right) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{m}{2} \sum_{j=1}^{N-1} \left(\frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\Delta t} \right) - V(x_j) \right] \Delta t \right\} \end{aligned}$$

Après le passage à la limite $N \rightarrow +\infty$, cette somme devient l'intégrale de chemin :

$$\langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | x_0 \rangle \longrightarrow \int_{x(0)=x_0}^{x(t)=x} \mathcal{D}x(\tau) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t \left[\frac{1}{2} m \dot{x}(\tau)^2 - V(x(\tau)) \right] d\tau \right\}$$

ce qui achève la démonstration.

5.3 Exemples d'application des intégrales de chemin de Feynman

Ce formalisme d'intégrales de chemin est utilisé alternativement à l'équation de Schrödinger, permettant souvent d'obtenir des résultats analytiques dans des contextes d'approches perturbatives pour le traitement du potentiel V en utilisant par exemple des techniques diagrammatiques comme celle présentée en section précédente. C'est de plus ce formalisme qui se prêtera à une généralisation à la théorie des champs, comme on le verra plus tard dans cet ouvrage. Afin d'illustrer sa mise en œuvre, on propose ici de s'intéresser aux deux applications suivantes.

5.3.1 L'oscillateur harmonique quantique

On s'intéresse à l'équation de Schrödinger décrivant l'évolution d'une particule de masse m dans un potentiel quadratique unidimensionnel caractérisé par sa pulsation ω , qui s'écrit

$$HK(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m}{2} \omega^2 \right] K(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K(x, t), \quad (19)$$

à laquelle on associe la condition initiale

$$K(x, t = 0) = \delta(x - x_0). \quad (20)$$

L'objectif est de calculer le propagateur $K(x, t | x_0, t_0)$. **Faire ce calcul en suivant les étapes proposées par l'énoncé d'examen [IV](#).**

5.3.2 L'effet Aharonov-Bohm

David Bohm (1917-1992) et Yakir Aharonov (né en 1932) ont introduit en 1959 l'effet connu sous le nom aujourd'hui d'effet Aharonov-Bohm, une découverte qui a marqué l'histoire de la mécanique quantique. David Bohm, connu pour ses travaux sur l'interprétation de la mécanique quantique, vit au début des années 50 sa carrière perturbée par l'ère mac-carthyste, l'obligeant à quitter les États-Unis pour enseigner au Brésil. Il fut alors amené à collaborer avec Yakir Aharonov, un jeune doctorant israélien. Tous deux imaginèrent une expérience de pensée où une particule quantique, telle qu'un électron, peut être influencée par un champ électromagnétique dans une région où ce champ est nul. Leur idée s'appuie sur la réalité physique des potentiels électromagnétiques, jusque-là considérés comme de simples outils mathématiques. Dans leur dispositif, des électrons passent de part et d'autre d'un solénoïde où circule un courant. Pour ce faire, on positionne le solénoïde juste en aval d'un dispositif de franges d'interférence. Bien que le champ magnétique soit strictement confiné à l'intérieur du solénoïde, la prédiction de Aharonov et Bohm était que les électrons ressentiraient tout de même son influence via le potentiel vecteur, ce qui entraînerait un décalage mesurable des franges d'interférence. Initialement accueilli avec scepticisme, ce travail trouva une confirmation expérimentale en 1986 par Tonomura et al, qui utilisèrent un film supraconducteur afin d'exclure strictement le champ magnétique du trajet classique des électrons. **On se propose d'aborder la modélisation par intégrales de chemin de ce phénomène en suivant les étapes proposées par l'énoncé d'examen [V](#) (partie 1).**

5.4 Limite classique

Il est à présent intéressant de se poser la question de savoir comment l'on retrouve la limite classique (i.e. non quantique) à partir de cette intégrale de chemin. Dans l'expression :

$$\langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | x_0 \rangle = \int_{x(0)=x_0}^{x(t)=x} \mathcal{D}x(\tau) e^{\frac{i}{\hbar} S[x(\tau)]}$$

on voit qu'à la limite $\hbar \rightarrow 0$, les contributions dominantes à l'intégrale fonctionnelle sont celles pour lesquelles la phase est stationnaire, c'est-à-dire :

$$\delta S[x(\tau)] = 0 \quad (\text{cf méthode de la phase stationnaire})$$

Ce régime est recouvert par des trajectoires de particules qui minimisent $S[x(\tau)]$. Notons $\bar{x}(t)$ ces trajectoires et $h(t)$ les fluctuations autour de celles-ci, avec $h(t_i) = h(t_f) = 0$. On a :

$$S[\bar{x} + h] = \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\frac{1}{2} m (\dot{\bar{x}} + \dot{h})^2 - V(\bar{x} + h) \right]$$

En développant et en négligeant les contributions du second ordre pour h et $\dot{h}$:

$$S[\bar{x} + h] = \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\frac{1}{2} m \dot{\bar{x}}^2 + m \dot{\bar{x}} \dot{h} + \mathcal{O}(\dot{h}^2) - V(\bar{x}) - h V'(\bar{x}) + \mathcal{O}(h^2) \right]$$

On sépare les contributions :

$$S[\bar{x} + h] = \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\frac{1}{2} m \dot{\bar{x}}^2 - V(\bar{x}) \right] + \int_{t_i}^{t_f} dt \left[m \dot{\bar{x}} \dot{h} - h V'(\bar{x}) \right] + \mathcal{O}(h^2) + \mathcal{O}(\dot{h}^2)$$

Le premier terme correspond à $S[\bar{x}]$, et les autres termes incluent les contributions des fluctuations $h(t)$.

$$S[\bar{x} + h] - S[\bar{x}] = [m\dot{\bar{x}}h]_{t_i}^{t_f} - \int_{t_i}^{t_f} dt \left(m\ddot{\bar{x}}h + V'(\bar{x})h + \mathcal{O}(h^2) + \mathcal{O}(\hbar^2) \right)$$

Or, $h(t_i) = h(t_f) = 0$, donc :

$$S[\bar{x} + h] - S[\bar{x}] = - \int_{t_i}^{t_f} dt \left(m\ddot{\bar{x}} + V'(\bar{x}) \right) h$$

Comme $\bar{x}$ a été choisi pour minimiser S , on a $S[\bar{x} + h] - S[\bar{x}] = 0 \quad \forall h$, ce qui implique :

$$\int_{t_i}^{t_f} dt \left(m\ddot{\bar{x}} + V'(\bar{x}) \right) h = 0$$

En appliquant le lemme fondamental du calcul des variations, on trouve :

$$m\ddot{\bar{x}} = -V'(\bar{x}) \quad (2^{\text{ème}} \text{ loi de Newton})$$

On a donc montré qu'à la limite $\hbar \rightarrow 0$, l'intégrale de chemin de Feynman permettait de retrouver principe fondamental de la dynamique.

Aparté : Équations d'Euler-Lagrange (coordonnées lagrangiennes, sans champs)

Les équations d'Euler-Lagrange s'écrivent :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) = \frac{\partial L}{\partial x}$$

où, avec $L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)$:

$$\frac{\partial L}{\partial x} = -V', \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$$

Ainsi, les équations d'Euler-Lagrange deviennent :

$$m\ddot{x} = -V'$$

En réalité, les équations d'Euler-Lagrange sont déduites en appliquant le principe de moindre action, ce qui connecte directement l'approche lagrangienne à notre dérivation de la limite classique.

5.5 Conclusion :

L'intégrale de chemin de Feynman est équivalente à l'équation de Schrödinger. Du point de vue physique, cela signifie que la mécanique quantique peut être vue comme une somme sur

toutes les trajectoires possibles, où chaque trajectoire contribue identiquement au résultat. A distance de la trajectoire classique, les interférences sont cependant destructives, ce qui explique que l'on retrouve la physique classique à l'échelle macroscopique. Ce n'est néanmoins pas toujours le cas et des effets quantiques peuvent subsister à notre échelle, comme la supraconductivité par exemple. Du point de vue mathématique, l'intégrale de chemin permet d'étudier certains effets, tel que l'effet Aharonov-Bohm, avec plus de facilité que l'équation de Schrödinger. Ce phénomène montre que la trajectoire d'une particule chargée est influencée même en dehors des régions où le potentiel vecteur associé au champ magnétique est non nul, ce qui est manifeste dans l'intégrale de chemin (le potentiel vecteur apparaît directement comme un facteur de phase dans l'action).

Bibliographie

Cette section s'appuie en très grande partie sur les cours et enseignements suivant.

- [1] Kirone Mallick (CEA/DRF/IPhT), "La formule de Feynman-Kac", mini-cours donné à l'Ecole Polytechnique en 2005
- [2] Hervé Moutarde, Cours Théorie Quantique du Champs à l'Ecole CentraleSupélec (2023)
- [3] Antoine Bourget, Cours de vulgarisation sur les intégrales Gaussiennes, [Chaîne YouTube Scientia Egregia](#)

6 Succès et limites de la mécanique quantique

6.1 Rappels historiques et succès de la mécanique quantique

Du point de vue chronologique, la mécanique quantique naît en 1900 avec la quantification du rayonnement du corps noir par Max Planck, puis se voit renforcée en 1905 lorsque Albert Einstein explique l'effet photoélectrique grâce aux quanta de lumière. Entre 1925 et 1927, elle prend sa forme moderne avec la mécanique des matrices de Werner Heisenberg et la mécanique ondulatoire d'Erwin Schrödinger, rapidement suivies de l'équation relativiste de Paul Dirac en 1928. Ces avancées permettent d'expliquer la stabilité de la matière, la structure de l'atome et les spectres d'émission, tout en introduisant des principes fondamentaux comme celui d'exclusion (Wolfgang Pauli, 1925) et le principe d'incertitude (Heisenberg, 1927). La diffraction des électrons (1927) confirme la dualité onde-particule, tandis que l'électrodynamique quantique s'érige dans les années 1940 sous l'impulsion de Richard Feynman, Julian Schwinger et Sin-Itiro Tomonaga, offrant des prédictions expérimentales d'une précision inégalée. Les années 1930 et 1950 sont marquées par des débats conceptuels, comme celui de l'intrication (le paradoxe EPR en 1935) et plus tard l'inégalité de Bell (1964), qui consacrent la nature non locale de la théorie. La mécanique quantique est donc une théorie validée expérimentalement dans une mesure n'ayant aucun équivalent : l'estimation que la théorie quantique du champ a offerte du moment magnétique de l'électron a été confirmée expérimentalement sur 13 ordres de grandeurs, faisant d'elle la théorie la plus précise connue à ce jour. Mais beaucoup de ces succès ont vu le jour grâce à des développements numériques visant à la mettre en œuvre dans des contextes réalistes (où les solutions analytiques sont difficiles à obtenir). On propose ainsi dans la suite de cette section d'évoquer certaines approches numériques ayant permis ces succès de la mécanique quantique via des prédictions à confronter aux expériences. Pour ce faire, on fera en premier lieu un retour sur les processus stochastiques en soulignant leur connexion avec l'équation (d'onde) de Schrödinger. Cela permettra dans un second temps de décrire l'algorithme dit "Diffusion Monte Carlo" mis en œuvre régulièrement pour les calculs d'états fondamentaux de systèmes quantiques et d'utiliser cet algorithme. En dernière sous section on discutera finalement des limites de la mécanique quantique ce qui ouvrira sur la deuxième partie du document.

6.2 Construction du processus stochastique équivalent

Transformation de Nagasawa-Schrödinger

Fondamentalement, la fonction de Green du mouvement Brownien dans un potentiel $V(x)$ offre une vision très intuitive du transport des particules via la représentation en marche aléatoire. En effet l'équation

$$\frac{\partial}{\partial t} G = D\Delta G - V(x)G$$

avec $V(x) > 0$ est associée à une marche aléatoire Brownienne dans un potentiel représentant un bassin local de capture d'autant plus élevé que V est important. Cette équation se simule donc facilement et est régulièrement utilisé dans le contexte de simulation de la phase stochastique des épidémies et celui de la neutronique qui est utilisée dans le contexte de la physique des réacteurs nucléaires. Dans ce dernier contexte, le potentiel V est donc la différence entre les termes de capture des neutrons (par différents éléments absorbants dans le réacteur) et

les termes de production des neutrons (par fission de noyaux lourds induite par d'autres neutrons). Schrödinger avait observé la forte similitude entre son équation et cette équation de diffusion dans un potentiel dès 1928, et a cherché plusieurs années à établir un pont entre elles deux. Ces travaux, sans avoir littéralement abouti à une formulation stochastique de la mécanique quantique, ont néanmoins permis d'offrir des méthodes numériques largement utilisées aujourd'hui. Afin de les comprendre, reprenons la formulation Hamiltonienne associée à l'équation de la diffusion de particules Browniennes dans un potentiel absorbant V . Nous avons montré que cette équation était associée à l'intégrale de Wiener :

$$G(x, t | x_0, t_0) = \int_{x(t_0)=x_0}^{x(t)=x} \mathcal{D}x(t) e^{-\int_{t_0}^t H(x, \dot{x}) dt}$$

avec

$$H = \frac{1}{4D} \dot{x}^2 + V(x).$$

Par la suite, la rotation de Wick $t \rightarrow it$ a mappé cette équation maîtresse sur l'équation de Schrödinger, dont le noyau

$$K(x, t | x_0, t_0) = \int_{x(t_0)=x_0}^{x(t)=x} \mathcal{D}x(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \mathcal{L}(x, \dot{x}) dt}$$

avec

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x).$$

ne permettait plus facilement de donner un sens physique à la fonction d'onde :

$$\Psi = \int K \Psi_0.$$

On avait cependant constaté que la multiplication de la fonction d'onde par son conjugué complexe via $p(x) = \Psi(x) \bar{\Psi}(x)$ permettait d'achever la correspondance entre l'équation de la diffusion et l'équation de Schrödinger. Afin de pousser ce raisonnement plus loin, Schrödinger avait intuité qu'il était possible d'associer un processus stochastique à son équation via la décomposition polaire :

$$\Psi = R e^{\frac{i}{\hbar} S}.$$

On a alors :

$$\begin{aligned} \nabla \Psi &= \left(\frac{\nabla R}{R} + \frac{i}{\hbar} \nabla S \right) \Psi \\ \Delta \Psi &= \left[\frac{\Delta R}{R} + \frac{i}{\hbar} \Delta S - \left(\frac{\nabla S}{\hbar} \right)^2 + \frac{2i}{\hbar} \frac{\nabla R}{R} \nabla S \right] \Psi \\ \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \left[\frac{\partial R}{\partial t} \frac{1}{R} + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \right] \Psi \end{aligned}$$

Si l'on remplace ces expressions dans l'équation de Schrödinger et qu'on en extrait les parties réelles et imaginaires, il vient :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \implies \\ \text{Re : } -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\nabla^2 R}{R} - \left(\frac{\nabla S}{\hbar}\right)^2\right] + V = -\frac{\partial S}{\partial t} \\ \text{Im : } -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\Delta S}{\hbar} + \frac{2}{\hbar}\frac{\nabla R}{R}\nabla S\right] = \hbar\frac{\partial R}{\partial t}\frac{1}{R} \end{cases} \quad (21)$$

La même démarche peut être mise en œuvre sur une équation de diffusion pour un champ réel ϕ en postulant que ce dernier puisse s'écrire sous la forme :

$$\phi = Re^{\frac{S}{\hbar}},$$

ce qui mène à :

$$\begin{aligned} \nabla\phi &= \left(\frac{\nabla R}{R} + \frac{\nabla S}{\hbar}\right)\phi \\ \Delta\phi &= \left[\frac{\Delta R}{R} + \frac{\Delta S}{\hbar} + \left(\frac{\nabla S}{\hbar}\right)^2 + 2\frac{\nabla R}{R}\frac{\nabla S}{\hbar}\right]\phi \\ \frac{\partial\phi}{\partial t} &= \left[\frac{\partial R}{\partial t}\frac{1}{R} + \frac{1}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t}\right]\phi. \end{aligned}$$

En postulant qu'on puisse effectivement établir une correspondance entre l'équation de Schrödinger et une équation de diffusion avec un coefficient $c(x, t)$ à déterminer, on a

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi - c(x, t)\phi = \hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} \implies \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\Delta R}{R} + \left(\frac{\nabla S}{\hbar}\right)^2 + 2\frac{\nabla R}{R}\frac{\nabla S}{\hbar}\right] - C = \frac{\hbar}{R}\frac{\partial R}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial t} \end{cases} \quad (22)$$

Il vient alors, en soustrayant l'équation associée à la partie réelle de [21](#) de l'équation [22](#)

$$-\frac{\hbar^2}{m}\left[\frac{\Delta S}{\hbar} + 2\frac{\nabla R}{R}\frac{\nabla S}{\hbar}\right] - C - V = \frac{\hbar}{R}\frac{\partial R}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial t}.$$

Puis en soustrayant l'équation associée à la partie imaginaire de [21](#) de cette dernière équation, on relie $c(x, t)$ et $V(x, t)$:

$$\begin{aligned} -\frac{(\nabla S)^2}{m} - c(x, t) - V(x, t) &= 2\frac{\partial S}{\partial t} \\ c(x, t) &= -V(x, t) - 2\frac{\partial S}{\partial t} - \frac{(\nabla S)^2}{m} \end{aligned} \quad (23)$$

Cette expression peut être alternativement réécrite, en utilisant la partie réelle de [21](#) :

$$c(x, t) = V(x, t) - \frac{\hbar^2}{m}\frac{\Delta R}{R}. \quad (e)$$

A la fois $c(x, t)$ et son signe ont été introduits arbitrairement. Comme V est par convention défini positif, si le laplacien de R est négatif (on verra dans la suite que cela peut advenir) alors c peut être positif (en fonction de x et de t). C'est une remarque importante : dans ce cas de figure cela signifie que le système "crée" des configurations. On a montré que l'équation de Schrödinger était équivalente à l'équation pour la moyenne d'un processus stochastique branchant, telle que discuté en première section (mouvement Brownien branchant, ou branching Brownian motion -BBM- en anglais). La littérature sur ce type de processus est abondante. Une autre remarque importante est que c dépend de R qui est vu comme une partie de la solution de Schrödinger ou de l'équation de la diffusion : du point de vue mathématique, cela rend la recherche des solutions de cette équation de diffusion branchante complexe puisque celle-ci est non-linéaire (un de ses coefficients dépend de la solution).

Systèmes stationnaires et conservation du nombre de particules

Considérons par exemple le cas des problèmes stationnaires, définis par une dépendance linéaire de la phase S en fonction du temps :

$$S(t) = -E_0 t,$$

où E_0 est une constante portant les dimensions d'une énergie, de sorte que l'équation [23](#) se réécrit :

$$c = -V + 2E_0.$$

Pour ces états, l'équation de diffusion se simplifie alors grandement puisqu'elle s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi + (V - 2E_0)\phi = \hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(Re^{-\frac{E_0}{\hbar}t}\right),$$

soit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi + V\phi = E_0\phi \tag{24}$$

Ce résultat est remarquable à plusieurs égards :

- la linéarité de cette équation de diffusion est restaurée (c ne dépend plus de la solution de l'équation)
- il montre que, pour les états stationnaires, il y a une équivalence entre l'équation de Schrödinger et cette équation de diffusion associée à un processus de branchement/capture (cf discussion précédente sur le signe de c) ayant comme coefficient

$$c(x) = 2E_0 - V(x)$$

Dans les régions où $2E_0 > V(x)$ la marche aléatoire diffusive devient **branchante** : le système **crée des configurations**. Dans les régions où $2E_0 < V(x)$ la marche aléatoire diffusive devient **capturante** : le système **absorbe des configurations**.

- il devient par conséquent possible de proposer des approches numériques pour le calcul des états stationnaires, et particulièrement de l'état fondamental d'énergie E_0 . Une de ces approches, dite "**Diffusion Monte Carlo**" utilise ainsi des marches aléatoires branchantes et est discutée dans la suite.

6.3 Aspects numériques : l'algorithme Diffusion Monte Carlo

La méthode Monte-Carlo apparaît simultanément aux premiers ordinateurs numériques (dont l'ENIAC) à la fin des années 1940, à l'issue d'un travail collectif entre Fermi, Metropolis et Ulam. Plus tard, en 1975, J. Anderson utilise cette méthode avec succès pour calculer l'état fondamental de l'atome H_3^+ , en reprenant l'argument d'une simple rotation de Wick pour transformer l'équation de Schrödinger en une équation de diffusion se prêtant à une résolution numérique. L'algorithme présenté dans la suite est détaillé par Kosztin, Faber et Schulten au milieu des années 1990. La solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps peut être écrite comme une superposition linéaire d'états stationnaires dont la dépendance en temps est donnée par un facteur de phase $\exp(-iE_n t/\hbar)$, avec E_n le n -ième niveau d'énergie du système quantique en question. Pour mettre en œuvre le DMC, on considère la solution de l'équation avec un temps imaginaire, en effectuant la transformation $\tau \rightarrow it$ (cet argument mène de facto à la transformation de l'équation de Schrödinger en une équation de diffusion, comme vu précédemment, mais l'argument est plus court). La solution est donc donnée par une somme de transitoires de la forme $\exp(-E_n \tau/\hbar)$ avec $n = 0, 1, \dots$. La méthode se base sur le fait que le transitoire qui durera le plus longtemps est celui correspondant à l'état fondamental, étant donné que $E_0 < E_n, n = 1, 2, \dots$. En faisant évoluer le système dans le temps (imaginaire) assez longtemps, il devient possible de déterminer à la fois son énergie fondamentale E_0 et sa fonction d'onde fondamentale Ψ_0 , quelque soit son état initial. La formulation algorithmique utilise alors l'écriture de la solution de l'équation de Schrödinger sous forme d'intégrales de chemin : l'espérance du processus stochastique sous jacent est estimée par la méthode Monte Carlo. Dans la suite de cette section, on précisera ce formalisme et on développera la procédure mise en place par Kosztin et al.

6.3.1 Équation de Schrödinger à temps imaginaire et recherche du mode fondamental

Après avoir effectué la rotation de Wick sur le temps, on obtient l'équation (??). Il faut maintenant procéder à un changement d'échelle au niveau de l'énergie en remplaçant $V \rightarrow V - E_R$ et $E_n \rightarrow E_n - E_R$, où E_R est appelé "énergie de référence". Cette opération, ne devant pas changer la dynamique de la particule, est cruciale pour la méthode. On a

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - (V(x) - E_R) \Psi = \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} \quad (25)$$

dont la solution est

$$\Psi(x, \tau) = \sum_{n=0}^{+\infty} c_n \phi_n(x) e^{-(E_n - E_R) \frac{\tau}{\hbar}} \quad (26)$$

En se rappelant que les énergies propres E_n sont croissantes, on en déduit le comportement asymptotique pour $\tau \rightarrow \infty$:

- si $E_R > E_0$, $\lim_{\tau \rightarrow \infty} \Psi(x, \tau) = \infty$: la fonction d'onde diverge de façon exponentielle,
- si $E_R < E_0$, $\lim_{\tau \rightarrow \infty} \Psi(x, \tau) = 0$: la fonction d'onde décroît de façon exponentielle,
- si $E_R = E_0$, $\lim_{\tau \rightarrow \infty} \Psi(x, \tau) = c_0 \phi_0(x)$: la fonction d'onde converge vers la fonction d'onde fondamentale à une constante près.

Le but sera de mettre en œuvre une méthode itérative où, lors de chaque itération, la valeur de E_R sera progressivement ajustée pour converger vers la solution stable (critique) du problème. Cette solution stable sera donc associée au mode fondamental. On peut remarquer que cette approche consistant à formuler la solution pour le mode fondamental à l'aide d'une rotation de Wick est équivalente à la transformation de Nagasawa-Schrödinger discutée à la section précédente. En effet, pour $E_R = E_0$, la dérivée en temps dans l'équation (25) est nulle. L'équation devient donc $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - V(x)\Psi = -E_0\Psi$. Elle est donc identique à la solution obtenue via la transformation de Nagasawa-Schrödinger à la stationnarité (cf équation (24)).

6.3.2 Formalisme en intégrale de chemin

La solution de l'équation de Schrödinger à temps imaginaire (25) peut s'écrire de la façon suivante :

$$\Psi(x, \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 K(x, \tau | x_0, 0) \Psi(x_0, 0),$$

où le propagateur $K(x, \tau | x_0, 0)$ s'exprime en fonction de l'intégrale de chemin

$$K(x, \tau | x_0, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{N-1} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\Delta\tau} \right)^{N/2} \\ \times \exp \left(-\frac{\Delta\tau}{\hbar} \sum_{j=1}^{+N} \left[\frac{m}{2\Delta\tau^2} (x_j - x_{j-1})^2 + V(x_j) - E_R \right] \right).$$

Ici, $\Delta\tau = \frac{\tau}{N}$ est un pas de temps. En fixant $x_n = x$, la fonction d'onde peut s'écrire :

$$\Psi(x, \tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\prod_{j=0}^{N-1} dx_j \right) \prod_{n=1}^N W(x_n) \times P(x_n, x_{n-1}) \Psi(x_0, 0), \quad (27)$$

où on pose :

$$P(x_n, x_{n-1}) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar\Delta\tau} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{m(x_n - x_{n-1})^2}{2\hbar\Delta\tau} \right), \quad (28)$$

et

$$W(x_n) = \exp \left(-\frac{[V(x_n) - E_R]\Delta\tau}{\hbar} \right).$$

La fonction $P(x_n, x_{n-1})$ est reliée au terme d'énergie cinétique du Hamiltonien (donc au mouvement de la particule) et donne le noyau de la marche aléatoire diffusive. Elle peut être vue comme une densité de probabilité gaussienne pour la variable aléatoire x_n avec une moyenne égale à x_{n-1} et un écart-type valant $\sqrt{\frac{\hbar\Delta\tau}{m}}$. En diffusion brownienne à temps réel, la densité de probabilité de passer d'un état x_{n-1} à un état x_n s'écrit

$$P(x_n, x_{n-1}) = \left(\frac{1}{4\pi D\Delta t} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{(x_n - x_{n-1})^2}{4D\Delta t} \right). \quad (29)$$

Comme discuté dans les sections précédentes, cette équivalence entre les formules (28) et (29) permet de simuler la mécanique quantique à l'aide d'une marche aléatoire Brownienne pourvue

d'un coefficient de diffusion donné par $D \equiv \frac{\hbar}{2m}$: la méthode Monte Carlo va servir à calculer l'intégrande de l'équation (27). Chacune des trajectoires doit cependant être pondérée par une fonction de "pondération" $W(x_n)$ qui dépend à la fois de l'énergie potentielle du Hamiltonien et de l'énergie de référence introduite précédemment. Cette fonction de pondération est relative au taux de branchement/capture associée aux réalisations du processus stochastique. En terme d'interprétation, elle indique donc les régions de l'espace ayant tendance à "créer" des configurations possibles du système ou ayant tendance à les faire disparaître. Cela justifie une surprenante **analogie entre la mécanique quantique et la neutronique**, mettant en regard la notion de configuration possible de système en mécanique quantique avec les neutrons en neutronique. La marche aléatoire diffusive des neutrons est en effet branchante : ceux-ci induisent des fissions sur certains noyaux lourds qui produisent alors un nombre variable de neutrons en sortie. Ces neutrons peuvent également être absorbés par différents noyaux et disparaître. Les algorithmes mis en oeuvre en physique des réacteurs sont alors exactement les mêmes que ceux de la méthode Diffusion Monte Carlo en mécanique quantique.

6.3.3 Algorithme

Pour déterminer simultanément l'énergie fondamentale E_0 et la fonction d'onde fondamentale ϕ_0 , on va créer une distribution initiale de N_0 particules et générer autant de marches aléatoires qui vont évoluer dans le temps. On va donc suivre le mouvement pas de temps par pas de temps de toutes les particules en même temps, au lieu de les suivre une par une jusqu'à la fin de leur vie. Cela va permettre de reconstruire l'évolution de la fonction d'onde dans le temps et d'ajuster après chaque pas de temps la valeur de l'énergie de référence E_R , afin d'atteindre la convergence. On va maintenant décrire ce qui se passe concrètement pour les particules à chaque pas de temps.

1. État initial

Au début de la simulation, les particules sont placées selon une distribution $\Psi(x_0, 0) = \delta(x - x_0)$, où x_0 est dans une région dans laquelle on s'attend à ce que la fonction d'onde du système soit non nulle. Chaque particule sera dans la suite référencée par sa position $x_n^{(j)}$, où n est le nombre de déplacements diffusifs qu'elle a effectué (i.e. le numéro du pas de temps), et (j) est le numéro de la particule.

2. Déplacement diffusif

Une fois initialisée, chaque particule, effectuant une marche aléatoire, va voir sa position évoluer. La distance parcourue est tirée selon une loi normale centrée réduite. Ainsi, la première position de la particule (j) par exemple sera :

$$x_1^{(j)} = x_0^{(j)} + \sqrt{\frac{\hbar \Delta \tau}{m}} \rho_1^{(j)}, \quad (30)$$

où $\Delta \tau$ est le pas de temps de la simulation et $\rho_1^{(j)}$ un nombre aléatoire tirée selon la loi normale centrée réduite. Plus généralement, pour une particule (j) au $(n - 1)$ -ième pas de temps, sa prochaine position est calculée comme suit :

$$x_n^{(j)} = x_{n-1}^{(j)} + \sqrt{\frac{\hbar \Delta \tau}{m}} \rho_n^{(j)}. \quad (31)$$

3. Processus de branchement(s)

Après chaque déplacement, au lieu d'accumuler un poids W à chaque particule, il est plus efficace d'un point de vue numérique de répliquer les particules avec une probabilité proportionnelle à $W(x_n)$. Dans ce processus de réplication, chaque particule est remplacée par un nombre

$$m_n = \min(\lfloor W(x_n) + u \rfloor, 3) \quad (32)$$

de particules, où :

- $\lfloor x \rfloor$ représente la partie entière de x ,
- u représente un nombre aléatoire uniformément choisi entre 0 et 1.

3 cas se présentent alors :

- si $m_n = 0$, la particule est capturée et les déplacements diffusifs s'arrêtent,
- si $m_n = 1$, la particule n'est pas affectée et on continue avec le pas de temps suivant,
- si $m_n = 2, 3$, on continue avec le pas de temps suivant, mais une nouvelle particule (2 si $m_n = 3$) est créée à la même position, et va subir elle aussi des déplacements diffusifs.

Au maximum, deux particules peuvent naître d'un branchement. Un plus grand nombre de naissances est possible, mais la limite est établie à deux pour éviter d'éventuelles instabilités numériques, surtout au début de la simulation lorsque E_R peut différer de E_0 de façon importante. Un potentiel négatif très élevé pourrait créer beaucoup de particules, comme m_n serait très grand, mais l'erreur due à la limitation de naissances devient négligeable pour un $\Delta\tau$ suffisamment petit devant $\frac{\hbar}{V}$. Il serait quand même judicieux d'explorer des cas où la limite maximale de branchements est supérieure à 2. Grâce à cette étape, les marches aléatoires deviennent branchantes et peuvent alors être comparées aux marches aléatoires de neutrons.

4. Ajustement de l'énergie de référence E_R

En conséquence du processus de branchement à la fin du premier pas de temps, le nombre de particules N_1 peut différer de sa valeur initiale N_0 . Le but de l'algorithme étant de garder le nombre de particules constant, on aimerait qu'il n'y ait que des diffusions, ce qui implique que m_n soit égal à 1. Ce faisant, le poids moyenné sur toutes les particules, à savoir

$$\langle W \rangle_1 \approx 1 - \frac{\langle V \rangle_1 - E_R}{\hbar} \Delta\tau, \quad (33)$$

doit valoir 1, avec $\langle V \rangle_1 = \frac{1}{N_1} \sum_{j=1}^{N_1} V(x_1^{(j)})$ le potentiel moyen après le premier déplacement. Ainsi, il est judicieux d'initialiser l'énergie de référence comme $E_R^{(1)} = \langle V \rangle_1$. Si à la fin du premier pas de temps, le nombre de particules N_1 varie trop fortement par rapport à la quantité initiale, on introduit une correction de manière à ce que :

- si $N_1/N_0 < 1$, on augmente la valeur de E_R pour remettre la population à N_0 particules,
- si $N_1/N_0 > 1$, on diminue la valeur de E_R .

Ainsi, la nouvelle valeur de E_R sera

$$E_R^{(2)} = \langle V \rangle_1 + \frac{\hbar}{\Delta\tau} \left(1 - \frac{N_1}{N_0} \right) = E_R^{(1)} + \frac{\hbar}{\Delta\tau} \left(1 - \frac{N_1}{N_0} \right). \quad (34)$$

Plus généralement, pour un pas de temps n , l'énergie de référence du pas de temps suivant sera

$$E_R^{(n+1)} = E_R^{(n)} + \frac{\hbar}{\Delta\tau} \left(1 - \frac{N_n}{N_0} \right), \quad (35)$$

avec N_n le nombre de particules à la fin du n -ième pas de temps. Concrètement d'un point de vue physique, si le potentiel est absorbant (branchant), le système va voir sa population diminuer (augmenter). L'ajustement de E_R , qui est en fait une méthode de contrôle de population, va venir créer (tuer) artificiellement des particules pour combler cette perte (ce gain) de masse.

5. Adimensionnalisation

Pour rendre le problème exploitable d'un point de vue numérique, l'équation de Schrödinger est adimensionnée en postulant qu'une grandeur est le produit de sa valeur par son unité (par exemple $x \rightarrow xL$), les unités étant ici L (longueur), T (temps) et $\mathcal{E}$ (énergie). Cela mène à l'équation :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar T}{2mL^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{T\mathcal{E}}{\hbar} (V(x) - E_R) \Psi. \quad (36)$$

En choisissant $\frac{\hbar T}{2mL^2} = \frac{1}{2}$ et $\frac{T\mathcal{E}}{\hbar} = 1$, on doit spécifier, pour un potentiel donné, une des trois unités pour trouver les deux autres.

6.3.4 Quelques exemples à l'aide de Jupyter

On met la méthode DMC en oeuvre sur deux exemples simples : l'oscillateur harmonique unidimensionnel et l'atome -tridimensionnel- d'hydrogène.

L'oscillateur harmonique quantique L'oscillateur harmonique quantique a pour potentiel

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

et est souvent utilisé pour décrire les vibrations d'une molécule diatomique. La solution de l'équation de Schrödinger admet une solution analytique, dont la forme adimensionnée (en ayant choisi $T = \frac{1}{\omega}$) est donnée par

$$\begin{cases} \Psi_n(x) = \frac{K}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x) \\ E_n = n + \frac{1}{2} \end{cases}$$

pour le mode fondamental et l'énergie fondamentale respectivement. Comme en témoigne les résultats de la simulation DMC de ce potentiel donnés Figure 9, la distribution spatiale des particules estimée par la méthode numérique tend bien vers la distribution gaussienne attendue, tandis que l'énergie fondamentale tend vers 1/2.

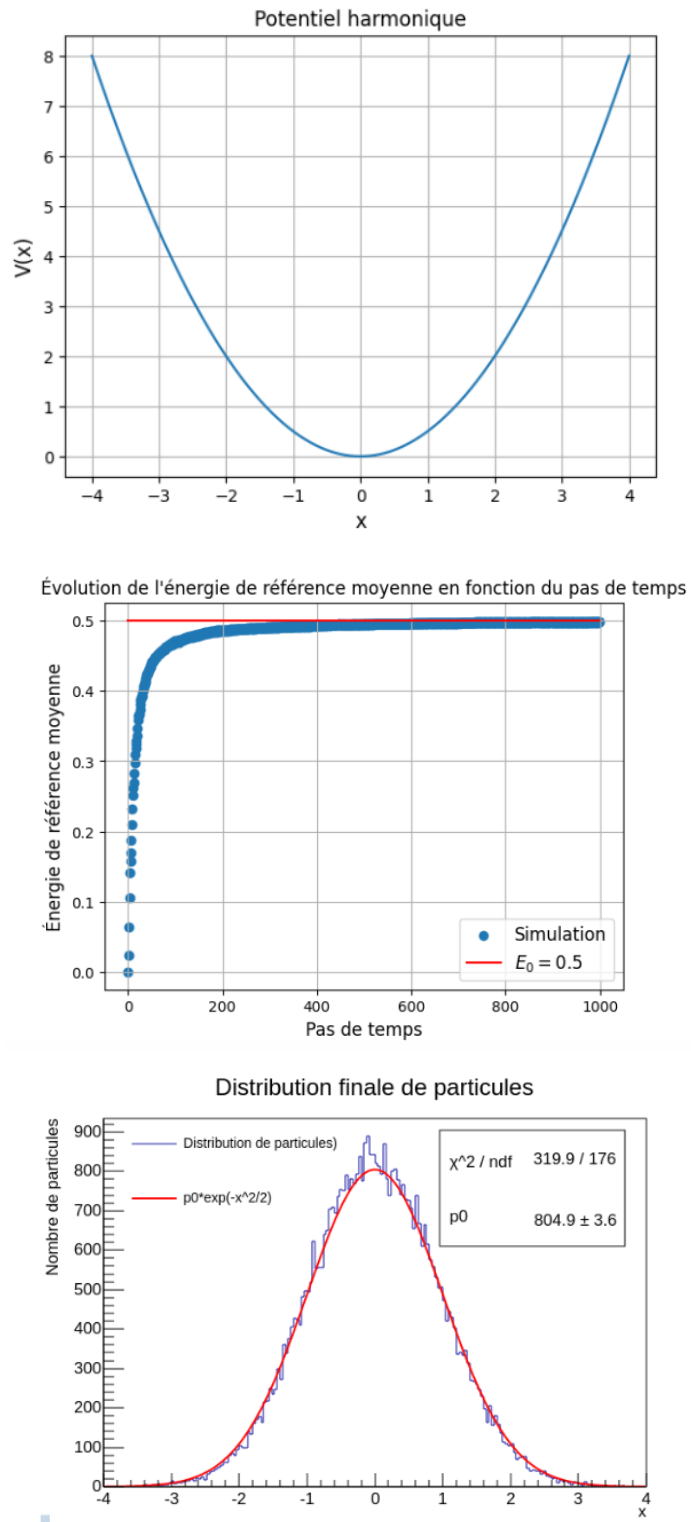


FIGURE 9 – Potentiel harmonique théorique, convergence numérique de l'énergie du mode fondamental et mode fondamental estimé à la dernière itération

L'atome d'hydrogène L'atome d'hydrogène est supposé constitué d'un proton et d'un électron ponctuels, et interagissant seulement via l'intermédiaire d'un potentiel coulombien adimensionné

$$V(r) = \frac{-1}{|r - r_0|}$$

Les niveaux d'énergie adimensionnés s'écrivent donc

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}, \quad n > 0$$

et le premier niveau théorique vaut par conséquent $1/2$. Comme représenté Figure [10](#), l'énergie de référence moyenne converge vers $-1/2$, qui est la valeur attendue pour ce potentiel. De plus, cette figure indique également qu'en projetant la distribution finale tridimensionnelle des marcheurs sur 1 dimension, et en prenant en compte l'effet de volume $dV \propto r^2 dr$ associé, la distribution radiale des particules varie bien en $r^2 e^{-r}$ (au lieu de e^{-r}) ce qui correspond au mode fondamental de l'atome d'hydrogène.

L'atome de dihydrogène Petit projet ($\approx 4h$) : implémenter l'algorithme sous Jupyter, et calculer le mode et l'énergie fondamentale de la molécule.

6.4 Limites de la mécanique quantique : relativité restreinte, et théorie quantique du champ

L'équation de Schrödinger, formulée en 1926, est non relativiste et repose sur l'approximation selon laquelle l'énergie cinétique d'une particule se réduit au premier terme du développement de l'expression relativiste de l'énergie. En relativité restreinte, l'énergie totale d'une particule de masse m et de quantité de mouvement $\mathbf{p}$ est donnée par

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}.$$

En effectuant un développement limité pour des vitesses faibles ($p \ll mc$), on obtient

$$E \approx mc^2 + \frac{p^2}{2m} + \dots$$

et l'équation de Schrödinger ne retient que le terme $\frac{p^2}{2m}$ comme énergie cinétique, ignorant les termes d'ordre plus élevé. Cette simplification est satisfaisante tant que l'énergie typique du système reste très inférieure à mc^2 . Toutefois, dès que l'on atteint des régimes où l'énergie quantique caractéristique $\hbar\omega$ devient du même ordre de grandeur que mc^2 , on ne peut plus négliger les effets relativistes. L'échelle de longueur associée à la particule, souvent identifiée à la longueur d'onde de Compton $\lambda_C = \frac{\hbar}{mc}$, indique à partir de quand la création ou l'annihilation de paires de particules devient pertinente. En fait, fondamentalement, la relativité restreinte autorise de convertir l'énergie en masse, et donc en particules. La nature non relativiste de l'équation de Schrödinger restreint donc l'équation à la description de systèmes classiques. Historiquement, Paul Dirac proposa en 1928 une équation relativiste pour l'électron (l'équation de Dirac) qui prédisait l'existence d'états d'énergie négative (il cherchait une équation permettant fondamentalement de réaliser une racine carré d'un opérateur

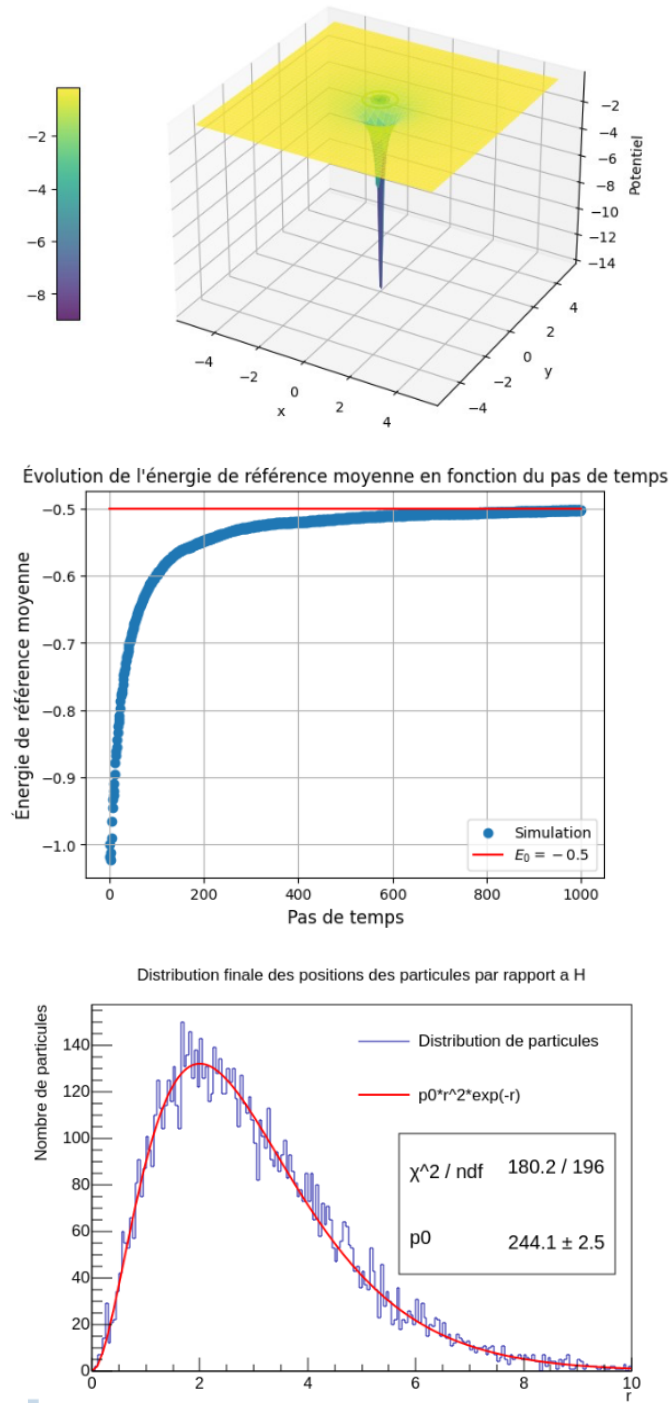


FIGURE 10 – Potentiel harmonique théorique, convergence numérique de l'énergie du mode fondamental et mode fondamental estimé à la dernière itération

Laplacien). Cette prédiction, initialement déroutante, conduisit au concept de positron (anti-particule de l'électron) mis en évidence expérimentalement peu après. Dès lors, il est apparu qu'à des énergies suffisamment élevées, des paires particule-antiparticule surgissent du vide, ce qui remettait fondamentalement en cause l'approche "une particule, une équation" de la mécanique quantique ordinaire. On doit alors utiliser la théorie quantique des champs, où les excitations d'un champ quantique donnent naissance aux particules et permettent de décrire de manière cohérente la création et l'annihilation de ces dernières. Ainsi, si l'équation de Schrödinger a constitué une étape historique cruciale (notamment grâce aux succès de la mécanique quantique dans la compréhension des spectres atomiques et de la chimie), elle demeure limitée aux situations non relativistes et échoue à décrire les phénomènes impliquant des énergies proches ou supérieures à mc^2 , où la relativité restreinte et la nature quantique du champ s'entremêlent inévitablement.

6.5 Conclusions

Dans les 4 premières sections, on a vu qu'indépendamment du processus stochastique microscopique sous jacent au déplacement d'une particule, pour peu que la variance des sauts soit finie, la loi macroscopique se trouvait dans le bassin d'attraction du mouvement Brownien. Cela a permis d'exprimer le propagateur libre d'une particule (la probabilité d'aller d'un point à un autre) à l'aide des intégrales de Wiener, selon une approche proposée par Einstein. Cette approche de mécanique statistique a alors été généralisée pour décrire le propagateur d'une particule libre classique dans un potentiel capturant, puis de proposer une approche diagrammatique permettant de réaliser les calculs d'intégrales fonctionnelles. De manière surprenante, une simple rotation de Wick a alors permis de mapper cette mécanique statistique des particules classiques en mécanique quantique : la formule classique (à temps réel t) de Feynman-Kac exprimée via un Hamiltonien se transforme alors simplement en intégrale de chemin de Feynman (à temps imaginaire it) exprimée via un Lagrangien. Dans cette dernière section de la première partie de l'ouvrage, nous avons montré comment la mécanique quantique peut se prêter à des calculs numériques, ayant certains de ces calculs ayant trouvé des confirmations expérimentales spectaculaires au 20ème siècle. Les tentatives de Dirac visant à concilier la mécanique quantique et la relativité restreinte ont cependant abouti à un deuxième niveau de construction de la mécanique, ou une "deuxième quantification", nécessaire à la description d'un nombre de particule fluctuant, et s'appuyant sur la notion de champ. Cette théorie quantique du champ est à présent discutée.

Bibliographie

Les deux premières sous-sections de la section courante s'appuient sur les travaux de M. Nagasawa. La sous-section sur le DMC et les résultats numériques sont extraits du rapport de stage de Master de C. Dautre, qui s'appuie lui même largement sur la publication de I. Kosztin. Le rapport de C. Dautre est accessible sur demande : il propose une méthode basée sur le DMC et permettant de généraliser l'algorithme pour le calcul de l'état fondamental aux états excités. Pour le lecteur intéressé par l'approche de M. Nagasawa et au lien entre la mécanique quantique et les processus stochastiques (et plus particulièrement les super-processus en mathématiques), le rapport de stage de dernière année de T. Pellerin l'Ecole CentraleSupélec et du Master 2 Mathématiques de l'Aléatoire de l'Université Paris-Saclay est

également accessible sur demande.

- [1] M. Nagasawa, "Schrödinger Equations and Diffusion Theory", Modern Birkhäuser Classics (1993)
- [2] I. Kosztin et al, "Introduction to the Diffusion Monte Carlo method", Am. J. Phys. 64, 633–644 (1996)
- [3] C. Dautre, "Extension du DMC au calcul des états excités de particules de Schrödinger", Rapport de stage de 3ème année à Phelma au CEA/DRF/IRFU/DPhN (2022)
- [4] T. Pellerin, "Mécanique quantique et processus stochastiques" ,Rapport de stage (Ecole CentraleSupélec et Master 2 Mathématiques de l'Aléatoire de l'Université Paris-Saclay) au CEA/DRF/IRFU/DPhN (2023)

Quatrième partie

Annexe : Devoir à la maison 2023-2024

On s'intéresse à l'équation de Schrödinger décrivant l'évolution d'une particule de masse m dans un potentiel quadratique unidimensionnel caractérisé par sa pulsation ω , qui s'écrit

$$HK(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \right] K(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K(x, t), \quad (1)$$

à laquelle on associe la condition initiale

$$K(x, t = 0) = \delta(x - x_0). \quad (2)$$

Question 1 Donner l'amplitude de transition $K(x, t)$ de cette équation dans le formalisme d'intégrale de chemin. Pour répondre à cette question, on pourra traduire la forme opératorielle de l'Hamiltonien H en forme canonique via l'opérateur de moment $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$, et reconnaître les termes d'énergie cinétique et potentielle afin d'explicitier le Lagrangien L .

Question 2 Dans la suite on notera $\bar{x}(\tau)$ la trajectoire classique associée à ce Lagrangien, et on prendra comme condition initiale $x_0 = 0$. À l'aide des équations d'Euler-Lagrange, donner l'équation du mouvement de $\bar{x}(\tau)$ qui satisfait la condition initiale ci dessus et la condition finale $\bar{x}(\tau = t) = x$. Expliciter ensuite l'action associée à cette trajectoire classique notée $S[\bar{x}]$, qui dépend de x et de t .

Question 3 En introduisant le chemin $y(t)$ tel que $x(t) = \bar{x}(t) + y(t)$ et $y(0) = y(t) = 0$, démontrer l'équation

$$K(x, t) = \exp\left\{\left(\frac{i}{\hbar} S[\bar{x}]\right)\right\} \int \mathfrak{D}y \exp\left\{\left(\frac{i}{\hbar} S[y]\right)\right\}. \quad (3)$$

Question 4 On cherche à présent à évaluer le second terme de cette somme à l'aide de la définition de l'intégrale de chemin

$$\int_{\substack{y(0)=0 \\ y(t)=0}} \mathfrak{D}y \exp\left\{\left(\frac{i}{\hbar} S[y]\right)\right\} = \lim_{N \rightarrow +\infty} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\Delta t}\right)^{\frac{N}{2}} \int dy_1 \dots dy_{N-1} \exp\left\{\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} \frac{m}{2\Delta t} (y_{i+1} - y_i)^2 - \frac{m\omega^2}{2} y_i^2 \Delta t\right)\right\} \quad (4)$$

Mettre le terme dans l'exponentielle sous forme quadratique ${}^t \vec{y} A_{N-1} \vec{y}$ où la matrice A_{N-1} peut s'écrire comme une combinaison linéaire d'une matrice de Toeplitz (avec des 2 sur la diagonale principale, des 1 sur les diagonales adjacentes, et des 0 partout ailleurs) et d'une matrice identité.

Question 5 Montrer que

$$\det(A_{N-1}) = \left(\frac{m}{2i\hbar\Delta t}\right)^{N-1} \frac{\sin(N\phi)}{\sin(\phi)}, \quad (5)$$

avec

$$\cos(\phi) = 1 - \frac{(\omega \Delta t)^2}{2}. \quad (6)$$

Question 6 Utiliser le théorème des résidus pour démontrer que

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i\frac{a}{2}x^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{ia}}, \quad \text{avec } \sqrt{\frac{1}{i}} = e^{-i\frac{\pi}{4}}, \quad (7)$$

autrement dit, que les formules d'intégration gaussienne restent valides pour des paramètres imaginaires pures.

Question 7 En déduire que

$$K(x, t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2i\pi\hbar \sin(\omega t)}} \exp\left(\frac{im\omega x^2}{2\hbar} \cotan(\omega t)\right). \quad (8)$$

Question 8 Reprendre les calculs avec $x_0 \neq 0$ et montrer que la dernière expression se généralise via

$$K(x, t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2i\pi\hbar \sin(\omega t)}} \exp\left\{\left(\frac{im\omega}{2\hbar \sin(\omega t)}\right)[(x^2 + x_0^2) \cos(\omega t) - 2xx_0]\right\}. \quad (9)$$

Question 9 On cherche à présent à vérifier que l'on retrouve bien le spectre discret en énergie de l'oscillateur harmonique, donnée par

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad (10)$$

où les E_n sont les énergies propres sur lesquelles le propagateur peut être décomposé

$$\begin{aligned} K(x, t; x_0, 0) &= \left\langle x \left| e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \right| x_0 \right\rangle \\ &= \sum_n \left\langle x \left| e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \right| \psi_n \right\rangle \left\langle \psi_n \left| x_0 \right\rangle \right. \\ &= \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x_0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}. \end{aligned} \quad (11)$$

Pour ce faire, montrer tout d'abord que

$$\int dx K(x, t; x, 0) = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}. \quad (12)$$

Question 10 Utiliser l'expression de l'amplitude K trouvée en question 8 pour identifier les E_n (on utilisera les formules trigonométriques usuelles).

Question 11 Les fonctions d'onde ψ_n associées à l'oscillateur harmonique sont décrites à l'aide des polynômes de Hermite H_n via

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right). \quad (13)$$

En déduire une nouvelle expression de $K(x, t; x_0, 0)$ exprimée à l'aide d'une somme infinie sur cette base polynomiale.

Question 12 Utiliser la formule de Mehler

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)H_n(x_0)}{n!} \left(\frac{\rho}{2}\right)^n = \frac{1}{\sqrt{1-\rho^2}} e^{\frac{2xx_0-(x^2+x_0^2)\rho^2}{1-\rho^2}} \quad (14)$$

pour retrouver l'expression de l'amplitude donnée en question 8.