

NOTE TO USERS

This reproduction is the best copy available.

UMI

HAMZA JIRARI

MÉTHODES NON PERTURBATIVES
EN MÉCANIQUE QUANTIQUE
ET EN THÉORIE DES CHAMPS QUANTIQUES

Thèse
présentée
à la Faculté des Études Supérieures
de l'Université Laval
pour l'obtention
du grade de Philosophiæ Doctor (Ph.D.)

Département de physique
FACULTÉ DES SCIENCES ET DE GÉNIE
UNIVERSITÉ LAVAL
QUÉBEC

FÉVRIER, 2001

© Hamza Jirari, 2001



National Library
of Canada

Acquisitions and
Bibliographic Services

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Bibliothèque nationale
du Canada

Acquisitions et
services bibliographiques

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file *Votre référence*

Our file *Notre référence*

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

The author retains ownership of the copyright in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

0-612-57939-5

Canada

Résumé court

Nous construisons un hamiltonien effectif à partir de l'intégrale de chemin via la méthode Monte-Carlo. Cet hamiltonien décrit les phénomènes physiques dans le domaine de basse énergie. Nous déterminons le spectre d'énergie et les fonctions d'ondes de plusieurs systèmes quantiques. Les résultats obtenus montrent que cette nouvelle approche Monte-Carlo hamiltonienne fonctionne. En mécanique quantique, nous suggérons une expression analytique de l'intégrale de chemin en introduisant une action quantique avec des paramètres renormalisés. Nous présentons des résultats numériques pour quelques potentiels locaux. Cette action quantique offre la possibilité de comparer l'évolution classique et quantique et permet de quantifier les instantons classiques et éventuellement le chaos classique. Nous investiguons la QCD sur un réseau bidimensionnel en utilisant une version améliorée des fermions de Wilson. Nous montrons que la théorie améliorée conduit à une réduction significative des erreurs dues à la valeur finie du pas du réseau. Nous calculons le condensat chirale et la masse de l'état lié quark-antiquark. Nous aboutissons à une bonne concordance entre nos résultats numériques et les résultats analytiques du modèle dans le continu.

Résumé

Dans cette thèse, nous développons une approche non-perturbative pour décrire des systèmes physiques complexes. Les difficultés de la méthode Monte-Carlo lagrangienne sont la détermination des fonctions d'ondes d'un système quantique et l'énergie des états excités. Ici, nous proposons une nouvelle méthode Monte-Carlo hamiltonienne pour calculer le spectre d'énergie et également les fonctions d'onde. Nous construisons un hamiltonien effectif ayant moins de degrés de liberté que l'hamiltonien original et décrivant la physique de basse énergie. Dans cette approche, nous nous inspirons formellement des transformations du groupe de renormalisation consistant à construire une suite d'hamiltoniens qui tous décrivent la même physique de basse énergie mais dans lesquels la physique de haute énergie est progressivement éliminée. Nous étudions plusieurs systèmes décrits par la mécanique quantique en déterminant le spectre d'énergie et les fonctions d'onde par diagonalisation de l'hamiltonien effectif. En mécanique quantique, nous suggérons une expression analytique de l'intégrale de chemin en introduisant une action renormalisée. Les difficultés de la comparaison d'un comportement classique et quantique d'un système résident dans les différences des structures du langage mathématique qui leur correspondent. En mécanique quantique, le principe d'incertitude interdit la connaissance à la fois de la position et de l'impulsion et pose un problème au niveau de la description quantique d'un système classique chaotique et de la quantification d'un instanton classique. Le formalisme de l'action quantique offre la possibilité de comparer l'évolution classique et quantique d'un système. Nous déterminons numériquement l'action quantique dans le cas du potentiel quartique et nous montrons comment un terme quadratique absent dans l'action classique est généré dans l'action quantique. L'instanton classique est une solution de l'équation du mouvement classique d'une particule en présence d'un double puits de potentiel inversé. Nous proposons une expression de son analogue quantique en solutionnant l'équation du mouvement dérivée à partir de l'action quantique. Une proposition d'une nouvelle méthode de quantification du chaos classique est donnée. La formulation

de la QCD sur un réseau espace-temps est une régularisation non perturbative de cette théorie. Les calculs sur le réseau sont sujets à plusieurs types d'erreurs. Nous étudions la QCD sur un réseau espace-temps bidimensionnel en utilisant une formulation hamiltonienne. À l'aide d'un algorithme amélioré de discrétisation, nous réussissons à réduire les erreurs dues au réseau dans le calcul des observables physiques.

On peut distinguer deux directions principales dans ce travail doctoral. La première direction concerne la mécanique quantique où deux contributions originales sont apportées. La première contribution est la construction d'un hamiltonien effectif à partir de la méthode Monte-Carlo. La diagonalisation de cet hamiltonien donne le spectre d'énergie et les fonctions d'onde des systèmes quantiques. La deuxième contribution est la construction d'une action renormalisée contenant toute l'information quantique. Cette action renormalisée a la même structure que l'action classique mais elle diffère de cette dernière par une renormalisation de l'énergie cinétique et l'énergie potentielle. Sous forme d'une conjecture nous établissons une expression analytique de l'amplitude de transition en mécanique quantique en fonction de l'action renormalisée. Nous donnons un argument numérique en faveur de la validité de notre conjecture. En déterminant numériquement l'action renormalisée, nous pouvons comparer l'évolution classique et quantique d'un système et ouvrons ainsi une nouvelle voie d'interprétation en mécanique quantique. La deuxième direction concerne la théorie des champs quantiques sur un réseau espace-temps, plus particulièrement, la QCD. Le travail original accompli ici, est de démontrer l'utilité des algorithmes améliorés de discrétisation. En étudiant la QCD sur un réseau bidimensionnel, nous montrons que l'emploi d'une version améliorée des fermions sur le réseau permet effectivement de réduire les erreurs dues à la discrétisation sans diminuer le pas du réseau.

Le dénominateur commun de cette recherche de doctorat est l'estimation des effets quantiques par une méthode numérique que nous pouvons qualifier de méthode non-perturbative.

Avant-propos

En premier lieu, je souhaite remercier mon directeur de recherche, Helmut Kröger, de m'avoir permis de réaliser cette thèse ainsi que pour l'apport scientifique et humain de nos fréquentes discussions. Je tiens aussi à remercier chaleureusement Xiang Luo lors des stimulants contacts établis ces dernières années. Sa rigueur scientifique restera un exemple pour moi. A Kevin Moriarty, j'adresse mes remerciements pour son support financier, sa grande confiance et ses divers encouragements.

Que Luc Marleau, Pierre Amiot et Louis Marchildon soient remerciés pour avoir accepté d'être membres du jury de thèse.

Je remercie mes amis Abdelmalek El Meskaoui, Driss Iraki et Claude Bomal ... Sans leur présence, ces années de recherches eussent été bien moins amusantes. Merci à Laurence qui m'a supporté avec philosophie.

Table des matières

Résumé court	i
Résumé	ii
Avant-propos	v
Table des matières	vi
Liste des tableaux	xi
Liste des figures	xii
Introduction générale	1
Chapitre 1 : Introduction à l'intégrale fonctionnelle	8
1.1 Particule brownienne et intégrale de Wiener	8
1.1.1 Mouvement brownien et diffusion	8
1.1.2 Distribution des chemins browniens	11

1.1.3	Mouvement brownien avec absorption et formule de Feynman-Kac	14
1.2	Intégrales gaussiennes	17
1.2.1	Variables aléatoires gaussiennes	17
1.2.2	Champs gaussiens	19
1.3	Intégrale de chemin en mécanique quantique	22
1.3.1	Intégrale de Feynman	22
1.3.2	L'approximation de la phase stationnaire	27
1.3.3	Mécanique statistique quantique	32
1.4	Conclusion	34
Chapitre 2 : Méthode Monte-Carlo hamiltonienne		35
2.1	Construction de l'hamiltonien effectif à partir d'une base régulière	38
2.1.1	Base régulière de l'espace d'Hilbert	38
2.1.2	Évaluation des éléments de matrice	39
2.1.3	Résultats numériques	41
2.2	Construction de l'hamiltonien effectif à partir d'une base stochastique	49
2.2.1	Base stochastique de l'espace d'Hilbert	49
2.2.2	Application	52
2.3	Conclusion	55

Chapitre 3 : Renormalisation en mécanique quantique	56
3.1 Le propagateur quantique dans l'approximation semi-classique	57
3.2 Conjecture	64
3.2.1 Énoncé de la conjecture	64
3.3 Formalisme effectif	67
3.3.1 Action effective en mécanique quantique	67
3.3.2 Développement de l'action effective en boucles	69
3.3.3 L'expansion dérivative de l'action effective	73
3.3.4 Comparaison entre l'action renormalisée et l'action effective	79
3.4 Validité de la conjecture: Argument numérique	80
3.4.1 Algorithme	80
3.4.2 Potentiel harmonique	82
3.4.3 Potentiel anharmonique	83
3.4.4 Potentiel quartique	85
3.4.5 Double puits de potentiel et instantons quantiques	93
3.4.6 Interprétation	96
3.5 Une nouvelle approche du chaos quantique	102
3.6 Conclusion	103
 Chapitre 4 : Formulation hamiltonienne de la QCD sur un réseau bidimen- sionnel	 105

4.1	Discrétisation de la QCD	106
4.1.1	Description sommaire de la QCD	106
4.1.2	Limite du continu et production des nombres en MeV	111
4.1.3	Discrétisation des fermions	113
4.1.4	Propriétés des fermions de Wilson	118
4.1.5	Confinement	119
4.2	Notion d'action améliorée	121
4.2.1	Amélioration de l'action de jauge	124
4.2.2	Amélioration de l'action fermionique	128
4.3	Formalisme canonique	129
4.3.1	Degrés de liberté de jauge	130
4.3.2	Inclusion des fermions	131
4.4	Hamiltonien amélioré et QCD2 sur réseau	132
4.4.1	QCD2 dans la limite N_c grand et description sommaire du modèle de 't Hooft	132
4.4.2	Amélioration de l'hamiltonien	136
4.4.3	Formulation de l'approche variationnelle et transformation de Foidy-Wouthuysen	140
4.4.4	État du vide et spectre mésonique du modèle: une seule saveur de quarks	143
4.4.5	Résultats numériques	148

4.4.6 Conclusion	150
Appendice A: Processus stochastiques	159
Appendice B: Formule de Trotter	161
Appendice C: Intégrale gaussienne	163
Appendice D: Calcul des déterminants des fluctuations et formule de Van Vleck	164
D.1 Calcul des déterminants par la méthode de Gelfand-Yaglom	164
D.2 La formule de Van Vleck	166
D.2.1 Relation avec la trajectoire classique	167
Bibliographie	169

Liste des tableaux

2.1	Le spectre d'énergie de l'oscillateur harmonique	43
2.2	États liés dans le cas du potentiel donné par l'équation (2.30)	46
2.3	Le spectre d'énergie de l'oscillateur harmonique	54
3.1	Les paramètres renormalisés du potentiel harmonique	84
3.2	Les paramètres renormalisés du potentiel quartique	90
3.3	Les paramètres renormalisés du double puits de potentiel	94

Liste des figures

2.1	La valeur moyenne de l'énergie interne du système libre	42
2.2	La chaleur spécifique du système libre	42
2.3	L'état fondamental de l'oscillateur harmonique	44
2.4	Le premier état excité de l'oscillateur harmonique	44
2.5	Le deuxième état excité de l'oscillateur harmonique	45
2.6	La valeur moyenne de l'énergie libre de l'oscillateur harmonique	45
2.7	La chaleur spécifique de l'oscillateur harmonique	46
2.8	La valeur moyenne de l'énergie libre de l'oscillateur harmonique	53
2.9	La chaleur spécifique de l'oscillateur harmonique	53
3.1	La masse renormalisée et le terme constant du potentiel harmonique plus une perturbation anharmonique	86
3.2	Les termes quadratique et quartique renormalisés du potentiel harmonique plus une perturbation anharmonique	87
3.3	Le potentiel harmonique plus une perturbation anharmonique	88
3.4	La masse renormalisée et le terme constant du potentiel quartique	91

3.5	Les termes quadratique et quartique renormalisés du potentiel quartique . . .	92
3.6	Transition de l'instanton classique à l'instanton quantique	97
3.7	La masse renormalisée et le terme constant du double puits de potentiel quartique	98
3.8	Les termes quadratique et quartique renormalisés du double puits de potentiel	99
3.9	Transition de l'action de l'instanton classique à l'action de l'instanton quan- tique.	100
4.1	Une plaquette élémentaire	108
4.2	Exemple de diagramme de tadpole	126
4.3	Le condensat chirale avec des fermions de Wilson et groupe de jauge $SU(2)$	151
4.4	Le condensat chirale avec des fermions de Wilson et groupe de jauge $SU(3)$	151
4.5	La masse du boson vectoriel avec avec des fermions de Wilson et groupe de jauge $SU(2)$	152
4.6	La masse du boson vectoriel avec avec des fermions de Wilson et groupe de jauge $SU(3)$	152
4.7	Le condensat chirale avec des fermions de Wilson améliorés et groupe de jauge $SU(2)$	153
4.8	Le condensat chirale avec des fermions de Wilson améliorés et groupe de jauge $SU(3)$	153
4.9	La masse du boson vectoriel avec avec des fermions de Wilson améliorés et groupe de jauge $SU(2)$	154

4.10 La masse du boson vectoriel avec avec des fermions de Wilson améliorés et groupe de jauge $SU(3)$	154
4.11 Le condensat chirale en fonction du nombre de couleurs	155
4.12 La masse du boson vectoriel en fonction du nombre de couleurs	155

Introduction générale

La formulation de l'intégrale de chemin de Feynman [8] fournit une approche qui permet de résoudre les problèmes en mécanique quantique. Elle constitue une approche alternative aux méthodes canoniques de Heisenberg et Schrödinger. La méthode de Feynman, en impliquant la connaissance de l'action classique, est plus intuitive et offre plus d'avantages que la méthode canonique basée sur l'hamiltonien. Cette méthode s'avère plus appropriée pour une quantification covariante (préservant aussi bien l'invariance relativiste que la localité de l'espace-temps) des théories des champs. Le concept central dans l'approche de Feynman est le propagateur quantique contenant toute l'information sur le système. Il est interprété comme la fonction de Green de l'équation de Schrödinger. Étant donné que le propagateur est la somme des contributions de tous les chemins, le principe de superposition apparaît explicitement dans cette formulation. La méthode de l'intégrale de chemin fournit un nouveau point de vue sur le problème, et de là, permet de suggérer des approximations qu'il ne serait pas aisé de formuler autrement. La principale d'entre elles est celle de la phase stationnaire ou méthode du col (de Laplace). Un autre avantage est qu'elle permet de générer simplement le calcul de perturbation. À l'aide des diagrammes de Feynman, chaque terme de la série des perturbations a une interprétation physique. Le concept du propagateur et les diagrammes de Feynman qui lui sont associés sont des éléments indispensables dans l'exploration de la dynamique perturbative des interactions fondamentales décrites par la théorie des champs quantiques. L'intégrale de chemin permet de traiter des situations où il y a des effets topologiques (entrelacem-

ent des macromolécules [27], effet Bohm-Aharonov [30, 3]). Ces avantages ne se révèlent pleinement que dans les situations plus complexes qu'on rencontre en théorie des champs et en mécanique statistique.

Malgré la formulation intuitive des intégrales de chemin de Feynman, leur potentialité d'application et leur importance physique, des difficultés analytiques leurs sont associées. La similarité entre l'intégrale de Feynman et l'intégrale de Wiener est formelle. Si cette dernière a un statut mathématique bien défini, l'intégrale de Feynman est en revanche formelle à cause de la difficulté de sa construction à partir d'une mesure positive et bornée. Le fondement mathématique des intégrales de chemin est discuté dans l'excellent ouvrage sur la physique quantique de Glimm et Jaffe [4].

L'évaluation exacte des intégrales de chemin est extrêmement difficile lorsqu'elles sont appliquées à des problèmes en mécanique quantique et en théorie des champs. Une méthode approximative de leur évaluation est le calcul perturbatif traditionnel dont la base est le développement du propagateur en série de puissance de l'interaction contenant le couplage. Le développement perturbatif est permis lorsque le couplage est faible. Par contre, lorsque le couplage est fort, les méthodes perturbatives ne sont pas applicables. Dans ce cas, on dit que la dynamique est non-perturbative. Plusieurs variétés très riches de phénomènes physiques ont un aspect non-perturbatif. Dans le contexte de la mécanique quantique ou de la théorie des champs, la description des états liés exige une approche non-perturbative. L'aspect non-perturbatif de la dynamique des théories de jauge non-abéliennes est d'un extrême intérêt physique. Un exemple important des théories de jauge non-abéliennes est la chromodynamique quantique. Cette théorie fait l'objet d'un examen intense depuis ces deux dernières décennies et reste mystérieuse et fascinante. L'interaction dans la QCD devient forte à large distance. L'aspect délicat dans cette théorie est que les degrés de liberté apparaissant dans le lagrangien (variables microscopiques: quarks colorés et gluons) ne sont pas les degrés de liberté que nous observons comme états physiques asymptotiques (variables macroscopiques: hadrons non colorés).

La couleur est confinée d'une manière permanente. La dynamique derrière ce phénomène est non-perturbative. Le confinement de la couleur existe dans la chromodynamique quantique pure ne contenant pas de quarks. Si on ajoute des quarks de masse nulle, une autre surprise se produit. La symétrie chirale du lagrangien classique est brisée par les amplitudes de transitions physiques. Il s'agit d'un phénomène non-linéaire mettant en jeu une dynamique non-perturbative.

Le thème central de ce travail de thèse porte sur la question des aspects physiques non-perturbatifs en mécanique quantique et en théorie des champs. Il vise à élaborer une approche pour les décrire. L'approche non-perturbative que nous avons adoptée est le calcul numérique.

Dans la partie concernant la mécanique quantique, étant donné le nombre extrêmement élevé de degrés de liberté nous avons construit un hamiltonien effectif en appliquant une méthode numérique de type Monte-Carlo [11, 12, 13, 14]. Cet hamiltonien effectif, une fois diagonalisé, nous a fourni non seulement le spectre à basse énergie des systèmes quantiques considérés mais également les fonctions d'ondes. La construction de l'hamiltonien effectif a été réalisée grâce à l'évaluation de l'intégrale de chemin. L'avantage de cette méthode Monte-Carlo hamiltonienne est qu'elle permet de déterminer à la fois le spectre d'énergie (contenant l'état fondamental plus quelques états excités) et les fonctions d'ondes, contrairement à la méthode standard Monte-Carlo lagrangienne qui ne permet de déterminer que l'énergie de l'état fondamental et éventuellement la fonction d'onde qui lui est associée si cette dernière est positive (n'admettant pas de noeuds).

Nous nous sommes ensuite penchés sur la question fondamentale de la sommabilité des chemins intervenant dans l'expression semi-classique du propagateur [36, 38]. Si le lagrangien est au moins quadratique, l'expression semi-classique est exacte. Elle fait intervenir un seul chemin classique et dépend d'un facteur de normalisation et d'action classique. Nous avons généralisé ce résultat dans le cas d'un potentiel local quelconque en prenant à la place de l'action classique une nouvelle action que nous avons appelée l'action

quantique ou l'action renormalisée. Nous avons formulé cette généralisation sous la forme d'une conjecture [16]. L'action quantique que nous suggérons contient toute l'information quantique et a la même structure que l'action classique mais avec des paramètres modifiés (masse, paramètres du potentiel). Elle diffère de l'action classique par une renormalisation de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle. Cette action quantique offre une possibilité de comparer l'évolution quantique avec l'évolution classique d'un système et permettra éventuellement de quantifier des problèmes classiques comme le chaos ou les instantons [17]. Nous n'avons pas de preuves analytiques de la conjecture, mais nous donnons un argument numérique en sa faveur. L'approche non perturbative dans la deuxième partie de ce travail est justement la détermination numérique de l'action quantique.

La partie concernant la théorie des champs quantiques a été consacrée à la QCD. Grâce à la liberté asymptotique de la QCD, un calcul perturbatif peut être appliqué pour calculer les observables physiques à haute énergie correspondant au régime de couplage faible. La confirmation que la QCD rend compte du phénomène de confinement de la couleur ou des quarks ne peut être obtenue que par un traitement non-perturbatif de cette théorie, étant donné que le confinement est une conséquence de la dynamique des quarks à basse énergie correspondant au régime de couplage fort. La formulation de la QCD sur un réseau espace-temps par Wilson [63] a ouvert les portes pour le traitement des phénomènes non-perturbatifs par des méthodes numériques. La QCD sur un réseau espace-temps peut être simulée par ordinateur en appliquant les méthodes analogues à celles qu'on utilise en mécanique statistique. Les méthodes stochastiques de type Monte-Carlo permettent d'évaluer les amplitudes de transitions ou les fonctions à n points mais induisent deux types d'erreurs: les erreurs statistiques et les erreurs dues à la discrétisation. Pour que les calculs sur le réseau soient fiables, il est important de comprendre l'origine des erreurs, de les déterminer et finalement d'estimer leur influence sur les observables physiques calculées numériquement.

Le réseau est une régularisation ultraviolette de la QCD. Le quadri-vecteur d'énergie-

impulsion est restreint au domaine $|P| \leq 1/a$. L'action sur le réseau est définie avec une coupure ultraviolette a . Les grandeurs physiques calculées sur le réseau sont sensibles aux effets de cette coupure. L'algorithme amélioré de discrétisation permet de réduire les effets de cette coupure. Autrement dit, elle permet de réduire la violation d'invariance d'échelle et garantit une convergence rapide vers la limite du continu. Le but ultime de ces algorithmes améliorés est de minimiser les erreurs dues à la discrétisation sans diminuer le pas du réseau pour que le prix des simulations Monte-Carlo ne soit pas trop coûteux [84]. Ces algorithmes améliorés sont fondés sur la liberté du choix de l'action nue ou l'hamiltonien nu décrivant la théorie discrétisée. En ce qui nous concerne, nous avons étudié la QCD en deux dimensions ou encore le modèle de 't Hooft [74, 75]. Plus précisément, nous avons investigué la version discrète de ce modèle en appliquant une approche hamiltonienne [19, 20]. Dans cette formulation, le temps est traité comme une variable continue, mais l'espace est discrétisé. Nous avons utilisé un hamiltonien amélioré proposé par Luo et *al.* [107].

La thèse est organisée comme suit: au premier chapitre, nous donnons une introduction générale à l'intégrale de chemin. Les notions de base comme le propagateur quantique et ses propriétés, les outils nécessaires, ainsi que les idées qui ont conduit à l'élaboration de cette approche sont décrites progressivement. L'accent est mis sur les applications de l'intégrale de chemin en mécanique quantique. Le lien formel entre l'intégrale de Wiener et l'intégrale de Feynman est discuté. L'application de l'approximation de la phase stationnaire ou la méthode du col à l'évaluation du propagateur quantique est décrite dans le cas des systèmes à un degré de liberté. À la fin du chapitre, nous discutons brièvement l'adaptation de l'intégrale de chemin à la représentation de la mécanique statistique.

Au chapitre 2, nous donnons les motivations et la description de la construction d'un hamiltonien effectif à partir d'une action donnée via la méthode Monte-Carlo. Cet hamiltonien effectif décrit les phénomènes physiques à basse énergie. Après avoir testé cet hamiltonien en calculant le spectre d'énergie, les fonctions d'ondes et les observables ther-

modynamiques dans les cas du système libre et de l'oscillateur harmonique, nous montrons que la méthode fonctionne également dans le cas d'autres potentiels locaux. Deux bases différentes de l'espace d'Hilbert où l'hamiltonien effectif agit ont été utilisées, à savoir une base régulière et une base stochastique.

Au début du chapitre 3, nous dérivons l'expression semi-classique du propagateur quantique. Cette forme semi-classique est exacte dans le cas des hamiltoniens quadratiques. À partir de ce résultat, nous établissons une conjecture postulant une forme similaire au propagateur quantique dans le cas d'un hamiltonien général en introduisant la notion d'action renormalisée ou action quantique. Nous faisons une comparaison de notre action quantique avec l'action effective donnée par la transformée de Legendre de la fonctionnelle génératrice des fonctions de Green connexes. L'expansion perturbative à l'ordre d'une boucle du potentiel effectif est établie. Ensuite, nous confirmons notre conjecture à l'aide du calcul numérique. À l'aide de l'oscillateur harmonique où l'action quantique coïncide avec l'action classique, nous faisons un test de l'algorithme que nous avons adapté pour déterminer l'action quantique. Nous comparons nos résultats numériques avec les prédictions de la théorie des perturbations en étudiant le potentiel anharmonique. Nous passons ensuite au potentiel quartique où nous montrons comment un terme quadratique absent dans l'action classique est généré dans l'action quantique. Nous procédons ensuite à l'étude du double puits de potentiel où une proposition de la quantification de l'instanton classique est donnée. À la fin du chapitre, nous discutons de la possibilité de généraliser notre approche à des systèmes ayant plus d'un degré de liberté et de son adaptation à la quantification d'un système classique ayant un comportement chaotique.

Le dernier chapitre est consacré à la QCD sur un réseau espace-temps. Une description de la QCD sur réseau est donnée. Nous présentons la manière de discrétiser cette théorie et les problèmes posés par le réseau comme le dédoublement des fermions, la violation d'invariance d'échelle et la limite du continu. Nous discutons les solutions à ces problèmes. Nous entamons ensuite l'étude de la QCD sur un réseau bidimensionnel en

utilisant un hamiltonien amélioré. Après une exposition de la méthode de diagonalisation de l'hamiltonien, nous montrons comment les résultats numériques du spectre de masse de ce modèle et le condensat chirale peuvent être améliorés. Enfin, dans la conclusion générale, nous donnons un aperçu de nos perspectives futures sur l'extension de nos travaux.

Chapitre 1

Introduction à l'intégrale fonctionnelle

Mais c'est dans les mathématiques que réside le principe créateur. En ce sens, je tiens donc pour vraie l'idée que la pensée pure puisse saisir la réalité, ainsi que les Anciens l'imaginaient.

ALBERT EINSTEIN

Dans ce chapitre, nous donnons une introduction générale à l'intégrale de chemin, l'accent étant mis sur ses applications en mécanique quantique.

1.1 Particule brownienne et intégrale de Wiener

1.1.1 Mouvement brownien et diffusion

Historiquement, la théorie du mouvement brownien, pour des raisons très naturelles, a conduit à considérer les premières intégrales de chemin. Rappelons que les observations de R. Brown (en 1828-29, ainsi que celles d'autres précurseurs dès le XVII-ème siècle

[1] sur le comportement de petites particules en suspension montrent que celles-ci sont animées d'un mouvement très erratique aux propriétés surprenantes, parmi lesquelles:

- (i) la trajectoire est si irrégulière qu'il apparaît impossible de définir ses tangentes.
- (ii) les mouvements de deux particules browniennes ne sont pas corrélés.
- (iii) le mouvement ne cesse jamais.

Dans un siècle dominé par la mécanique de Newton, le point (i) (impossibilité d'associer une vitesse à la particule brownienne) pose un problème tout à fait nouveau. Le point de vue qui se révèle fructueux pour l'étude d'un tel mouvement est celui d'Einstein (1905) [2]. Einstein abandonne la vision mécanique au profit d'une description purement probabiliste. Pour illustrer ce point de vue, considérons une particule qui peut occuper les sites $n\Delta$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) d'un réseau à une dimension. Nous admettons qu'à chaque temps $k\varepsilon$, $k = 1, 2, 3, \dots$ elle saute avec une probabilité $1/2$ sur un site adjacent à gauche ou à droite (marche aléatoire symétrique à une dimension). Si $p(n\Delta, k\varepsilon)$ désigne la probabilité de trouver la particule sur le site $n\Delta$ au temps $k\varepsilon$, nous avons évidemment l'équation de récurrence

$$p(n\Delta, (k+1)\varepsilon) = \frac{1}{2}p((n+1)\Delta, k\varepsilon) + \frac{1}{2}p((n-1)\Delta, k\varepsilon) \quad (1.1)$$

qui est identique à

$$\frac{p(n\Delta, (k+1)\varepsilon) - p(n\Delta, k\varepsilon)}{\varepsilon} = \frac{\Delta^2}{2\varepsilon} \left(\frac{p((n+1)\Delta, k\varepsilon) - 2p(n\Delta, k\varepsilon) + p((n-1)\Delta, k\varepsilon)}{\Delta^2} \right) \quad (1.2)$$

Dans la limite du continu $\Delta \rightarrow 0$, $\varepsilon \rightarrow 0$ avec les quantités $x = n\Delta$, $\tau = k\varepsilon$, $D = \frac{\Delta^2}{2\varepsilon}$ fixées, on voit de (1.2) que la distribution limite

$$p(x, \tau) = \lim_{\substack{\Delta \rightarrow 0 \\ \varepsilon \rightarrow 0}} p(n\Delta, k\varepsilon) \quad (1.3)$$

obéit à l'équation différentielle

$$\frac{\partial}{\partial \tau} p(x, \tau) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} p(x, \tau) \quad (1.4)$$

C'est l'équation de la diffusion de la chaleur et D est la constante de diffusion. La solution de (1.4) qui satisfait à la condition initiale

$$\lim_{\tau \rightarrow \tau_0} p(x, \tau) = \delta(x - x_0) \quad (1.5)$$

est

$$p(x, \tau | x_0, \tau_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi(\tau - \tau_0)}} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{4D(\tau - \tau_0)}\right), \quad \tau \geq \tau_0 \quad (1.6)$$

et $p(x, \tau | x_0, \tau_0) dx$ représente la probabilité conditionnelle de trouver la particule brownienne entre x et $x + dx$ au temps τ , sachant qu'elle se trouvait en x_0 au temps τ_0 . Cette quantité, qui jouera un rôle fondamental par la suite, est qualifiée par différentes terminologies selon le point de vue adopté:

- Si on considère la trajectoire $x(\tau)$ d'une particule brownienne comme une réalisation d'un processus stochastique markovien, $p(x, \tau | x_0, \tau_0)$ est la probabilité de transition entre les états x_0 et x dans le temps $(\tau - \tau_0)$ ¹.

- Du point de vue des équations différentielles, $p(x, \tau | x_0, \tau_0)$ est appelée solution fondamentale de l'équation (1.4).

- Une notation qui permettra de fructueuses analogies avec le formalisme quantique est d'écrire la relation linéaire entre les densités de probabilité $p(x, \tau_0) \equiv p_{\tau_0}(x)$ et $p(x, \tau) \equiv p_{\tau}(x)$ sous la forme :

$$p_{\tau}(x) = (U_0(\tau, \tau_0)) p_{\tau_0}(x), \quad U_0(\tau_0, \tau_0) = I \quad (1.7)$$

L'opérateur linéaire $U_0(\tau, \tau_0)$ agit sur l'espace des densités de probabilité et peut être appelé propagateur de la particule brownienne. Si nous notons H_0 l'opérateur différentiel

¹ Pour quelques notions concernant les processus stochastiques, voir Annexe A.

qui agit sur les fonctions $\varphi(x)$ comme $(H_0\varphi)(x) = -D\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2}$, il est clair que l'équation de diffusion (1.4) s'écrit:

$$\frac{\partial}{\partial\tau}U_0(\tau, \tau_0) = -H_0U_0(\tau, \tau_0), \quad U_0(\tau_0, \tau_0) = I \quad (1.8)$$

avec solution

$$U_0(\tau, \tau_0) = e^{-H_0(\tau-\tau_0)}, \quad \tau \geq \tau_0 \quad (1.9)$$

Ainsi on peut voir $p(x, \tau|x_0, \tau_0)$ comme le noyau intégral de $U_0(\tau, \tau_0)$ qu'on écrit sous la forme

$$p(x, \tau|x_0, \tau_0) = \langle x|e^{-H_0(\tau-\tau_0)}|x_0 \rangle \quad (1.10)$$

en adoptant la notation de Dirac. Notons la relation

$$\int dx_1 p(x, \tau|x_1, \tau_1)p(x_1, \tau_1|x_0, \tau_0) = p(x, \tau|x_0, \tau_0), \quad \tau \geq \tau_1 \geq \tau_0 \quad (1.11)$$

qui peut être explicitement vérifiée à partir de (1.6). Utilisant la notation (1.10), elle est équivalente à

$$e^{-H_0(\tau-\tau_1)}e^{-H_0(\tau_1-\tau_0)} = e^{-H_0(\tau-\tau_0)} \quad (1.12)$$

Dans le langage des processus stochastiques, (1.11) est l'équation de Chapman-Kolmogorov, qui est identique ici à la loi de semi-groupe (1.12) pour les propagateurs.

1.1.2 Distribution des chemins browniens

Comme la trajectoire $x(\tau)$ de la particule brownienne est aléatoire, il est pertinent de poser la question suivante: comment définir la probabilité d'un chemin et calculer la valeur moyenne d'une fonctionnelle $F(x(\cdot))$ ² sur les chemins browniens ?

Nous commençons par définir la probabilité jointe

$$W_{x_0, \tau_0}(x_1, \tau_1, \dots, x_N, \tau_N) dx_1 \dots dx_N$$

²La notation indique que F dépend du chemin $\{x(\sigma), \tau_0 \leq \sigma \leq \tau\}$ dans son ensemble.

qu'un chemin (partant de x_0 en τ_0) passe entre x_1 et $x_1 + dx_1$ en τ_1 , x_2 et $x_2 + dx_2$ en τ_2 , ..., x_N et $x_N - dx_N$ en τ_N . Pour ceci, nous faisons l'hypothèse que les déplacements successifs de la particule $x_1 - x_0$, $x_2 - x_1$, ..., $x_N - x_{N-1}$ sont des variables aléatoires indépendantes (ce qui équivaut à l'hypothèse que le processus jouit de la propriété de Markov). Ainsi

$$W_{x_0, \tau_0}(x_1, \tau_1, \dots, x_N, \tau_N) dx_1 \dots dx_N = p(x_N, \tau_N | x_{N-1}, \tau_{N-1}) \dots p(x_2, \tau_2 | x_1, \tau_1) p(x_1, \tau_1 | x_0, \tau_0) dx_1 \dots dx_N \quad (1.13)$$

En intégrant sur $dx_1 \dots dx_N$, il est clair d'après (1.6) que ces probabilités sont bien normalisées à 1.

À l'aide de (1.13), nous pouvons déjà calculer les valeurs moyennes de certaines fonctionnelles $F(x(\cdot))$ qui ne dépendent du chemin $x(\cdot)$ que par l'entremise d'un nombre fini de temps, c'est-à-dire

$$F(x(\cdot)) = F(x(\tau_1), x(\tau_2), \dots, x(\tau_N)), \quad \tau_0 \leq \tau_1 \leq \dots \leq \tau_N \quad (1.14)$$

Notant la valeur moyenne de F par $\int_{x_0, \tau_0} dW_D F$, nous avons

$$\int_{x_0, \tau_0} dW_D F = \int dx_1 \dots dx_N W_{x_0, \tau_0}(x_1, \tau_1, \dots, x_N, \tau_N) F(x_1, \dots, x_N) \quad (1.15)$$

Le poids de probabilité associé aux chemins browniens définis par (1.13) et (1.15) s'appelle mesure de Wiener.

Il est souvent utile de considérer la mesure de Wiener conditionnelle où le point d'aboutissement des chemins en $x(\tau) = x$, $\tau \geq \tau_N$ est spécifié, définie par:

$$\int_{x_0, \tau_0}^{x, \tau} dW_D F = \int dx_1 \dots dx_N W_{x_0, \tau_0}(x_1, \tau_1, \dots, x_N, \tau_N, x, \tau) F(x_1, \dots, x_N) \quad (1.16)$$

Notons que la mesure de Wiener conditionnelle n'est pas normalisée à 1 mais

$$\int_{x_0, \tau_0}^{x, \tau} dW_D = p(x, \tau | x_0, \tau_0) \quad (1.17)$$

et on a la relation

$$\int_{x_0, \tau_0} dW_D F = \int dx \int_{x_0, \tau_0}^{x, \tau} dW_D F \quad (1.18)$$

Dans (1.15) ou (1.16), le calcul d'une valeur moyenne se réduit à celui d'une intégrale multiple.

Un cas important est celui des valeurs moyennes des moments

$$x(\tau_1)x(\tau_2)\dots x(\tau_N), \quad k = 1, 2, \dots$$

du processus. Supposons par simplicité que les chemins débutent en $x_0 = 0$ au temps $\tau_0 = 0$, nous trouvons pour les deux premiers moments de la mesure de Wiener

$$\int_{x_0, \tau_0} dW_D x(\tau_1) = \int dx_1 p(x_1, \tau_1 | 0, 0) x_1 = 0 \quad (1.19)$$

et pour $0 \leq \tau_1 \leq \tau_2$

$$\int_{x_0, \tau_0} dW_D x(\tau_1)x(\tau_2) = \int dx_1 dx_2 p(x_2, \tau_2 | x_1, \tau_1) p(x_1, \tau_1 | 0, 0) x_1 x_2 \quad (1.20)$$

$$= \int dx_1 p(x_1, \tau_1 | 0, 0) x_1^2 = 2D\tau_1 \quad (1.21)$$

En général

$$\int_{x_0, \tau_0} dW_D x(\tau_1)x(\tau_2) = 2D \min(\tau_1, \tau_2), \quad \tau_1, \tau_2 \geq 0 \quad (1.22)$$

Les moments d'ordre supérieur seront considérés en relation avec la théorie des mesures gaussiennes.

Il est nécessaire de savoir également calculer la valeur moyenne de fonctionnelles $F(x, \sigma)$ plus générales qui dépendent du chemin $x(\sigma)$ pour tous les σ , $\tau_0 \leq \sigma \leq \tau$, comme dans l'exemple du mouvement brownien avec absorption qui est donné dans la section suivante.

1.1.3 Mouvement brownien avec absorption et formule de Feynman-Kac

Supposons que la particule ait la probabilité par unité de temps $\Omega \geq 0$ d'être absorbée au point x . Divisons l'intervalle $\tau - \tau_0$ en $N + 1$ sous-intervalles de longueur $\varepsilon = \frac{\tau - \tau_0}{N+1}$, et posons

$$\tau_k = \tau_0 + k\varepsilon, \quad k = 0, 1, \dots, N, \quad \tau = \tau_{N+1} \quad (1.23)$$

La probabilité que la particule ne soit pas absorbée le long d'une trajectoire $x(\sigma)$, $\tau_0 \leq \sigma \leq \tau$, est égale à

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \prod_{k=0}^N [1 - \varepsilon \Omega(x(\tau_k))] = \lim_{N \rightarrow \infty} \exp \left(-\varepsilon \sum_{k=0}^N \Omega(x(\tau_k)) \right) \quad (1.24)$$

$$= \exp \left(-\int_{\tau_0}^{\tau} d\sigma \Omega(x(\sigma)) \right) \quad (1.25)$$

Ainsi, la probabilité $p_{\Omega}(x, \tau | x_0, \tau_0)$ de trouver la particule en x au temps τ est

$$p_{\Omega}(x, \tau | x_0, \tau_0) = \int_{x_0, \tau_0}^{x, \tau} dW_D \exp \left(-\int_{\tau_0}^{\tau} d\sigma \Omega(x(\sigma)) \right) \quad (1.26)$$

$$= \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \int_{x_0, \tau_0}^{x, \tau} dW_D \exp \left(-\varepsilon \sum_{k=0}^N \Omega(x(\tau_k)) \right) \quad (1.27)$$

Pour calculer $p_{\Omega}(x, \tau | x_0, \tau_0)$ on doit en principe recourir à l'approximation discrète (1.24) et d'abord calculer le second membre de (1.27) pour N fini, selon la définition (1.16).

Le poids de probabilité attaché à la subdivision (1.23) est alors

$$p(x, \tau | x_N, \tau_N) \dots p(x_2, \tau_2 | x_1, \tau_1) p(x_1, \tau_1 | x_0, \tau_0) dx_1 \dots dx_N = \left(\frac{1}{\sqrt{4\pi D\varepsilon}} \right)^{N+1} \prod_{k=1}^N dx_k \exp \left(-\frac{1}{4D\varepsilon} \sum_{k=0}^N (x_{k+1} - x_k)^2 \right) \quad (1.28)$$

qui permet de calculer le second membre de (1.27) avant le passage à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$.

On adoptera pour cette limite la notation formelle suivante très suggestive. On considère que $x_k = x(\tau_k)$ sont les coordonnées d'un certain chemin $x(\tau)$ de telle sorte que (1.28) devient

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{\sqrt{4\pi D\varepsilon}} \right)^{N+1} \prod_{k=1}^N dx_k \exp \left(-\frac{1}{4D\varepsilon} \sum_{k=0}^N (x(\tau_{k+1}) - x(\tau_k))^2 \right) \sim \\ & \sim d[x(\cdot)] \exp \left(-\frac{1}{4D} \int_{\tau_0}^{\tau} d\sigma \left(\frac{dx(\sigma)}{d\sigma} \right)^2 \right), \quad \varepsilon \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (1.29)$$

et on écrit (1.27) sous la forme

$$p_{\Omega}(x, \tau | x_0, \tau_0) = \int_{x_0, \tau_0}^{x, \tau} d[x(\cdot)] \exp \left[- \int_{\tau_0}^{\tau} d\sigma \left(\frac{1}{4D} \left(\frac{dx(\sigma)}{d\sigma} \right)^2 + \Omega(x(\sigma)) \right) \right] \quad (1.30)$$

Dans (1.29), (1.30) le symbole $d[x(\cdot)]$ signifie qu'il faut effectuer les N intégrales sur $dx_1 \dots dx_N$ avec le facteur de normalisation $(\frac{1}{\sqrt{4\pi D\varepsilon}})^{N+1}$, dans (1.28) et prendre la limite $\varepsilon \rightarrow 0$. Les extrémités des chemins sont fixées en x_0 et x .

Comment calculer (1.30) en pratique ? Dans le cas où $\Omega(x(\cdot)) = 0$, nous avons évidemment le fait que l'intégrale (1.30) est égale à la probabilité de transition brownienne (1.6). Dans le cas général, le résultat est donné par la formule de Feynman-Kac qui affirme que l'intégrale (1.30) est donnée par la solution de l'équation différentielle [1. 3. 5]

$$\frac{\partial}{\partial \tau} p_{\Omega}(x, \tau | x_0, \tau_0) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} p_{\Omega}(x, \tau | x_0, \tau_0) - \Omega(x) p_{\Omega}(x, \tau | x_0, \tau_0) \quad (1.31)$$

avec

$$\lim_{\tau \rightarrow \tau_0} p_{\Omega}(x, \tau | x_0, \tau_0) = \delta(x - x_0), \quad \tau \geq \tau_0 \quad (1.32)$$

Pour le voir, nous écrivons explicitement, pour N fini,

$$\begin{aligned} & \int_{x_0, \tau_0}^{x, \tau} dW_D \exp \left(-\varepsilon \sum_{k=0}^N \Omega(x(\tau_k)) \right) = \\ & = \int dx_1 \dots dx_N \langle x | e^{-H_0 \varepsilon} | x_N \rangle e^{-\Omega(x_N) \varepsilon} \langle x_N | e^{-H_0 \varepsilon} | x_{N-1} \rangle e^{-\Omega(x_{N-1}) \varepsilon} \\ & \quad \dots \langle x_2 | e^{-H_0 \varepsilon} | x_1 \rangle e^{-\Omega(x_1) \varepsilon} \langle x_1 | e^{-H_0 \varepsilon} | x_0 \rangle e^{-\Omega(x_0) \varepsilon} \end{aligned} \quad (1.33)$$

$$= \int dx_1 \dots dx_N \langle x | e^{-H_0 \varepsilon} e^{-\Omega \varepsilon} | x_N \rangle \langle x_N | e^{-H_0 \varepsilon} e^{-\Omega \varepsilon} | x_{N-1} \rangle \dots \langle x_2 | e^{-H_0 \varepsilon} e^{-\Omega \varepsilon} | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-H_0 \varepsilon} e^{-\Omega \varepsilon} | x_0 \rangle \quad (1.34)$$

$$= \langle x | (e^{-H_0 \varepsilon} e^{-\Omega \varepsilon})^{N+1} | x_0 \rangle \quad (1.35)$$

La ligne (1.33) résulte des définitions (voir (1.16)) où l'on a utilisé la notation opératorielle (1.9). Pour écrire (1.34), nous concevons Ω comme un opérateur de multiplication: $(\Omega \varphi)(x) = \Omega(x)\varphi(x)$, $(\exp(-\varepsilon \Omega \varphi))(x) = \exp(-\varepsilon \Omega(x))\varphi(x)$ et (1.27) devient

$$p_{\Omega}(x, \tau | x_0, \tau_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle x | \left(\exp\left(-\frac{H_0(\tau - \tau_0)}{N+1}\right) \exp\left(-\frac{\Omega(\tau - \tau_0)}{N+1}\right) \right)^{N+1} | x_0 \rangle \quad (1.36)$$

La valeur de cette limite est donnée par la formule de Trotter, qui affirme pour une paire d'opérateurs A et B (qui ne commutent pas en général) que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} (\exp(A/N) \exp(B/N))^N = \exp(A+B) \quad (1.37)$$

Une démonstration dans le cas simple où A et B sont des opérateurs bornés est donnée dans l'Annexe B. L'application de cette formule à (1.36) donne

$$p_{\Omega}(x, \tau | x_0, \tau_0) = \langle x | \exp(-(H_0 + \Omega)(\tau - \tau_0)) | x_0 \rangle = \langle x | U(\tau, \tau_0) | x_0 \rangle \quad (1.38)$$

où on introduit le nouveau propagateur

$$\langle x | U(\tau, \tau_0) | x_0 \rangle = \exp(-H(\tau - \tau_0)), \quad H = H_0 + \Omega \quad (1.39)$$

correspondant à l'équation différentielle

$$\frac{\partial}{\partial \tau} p_{\Omega}(x, \tau | x_0, \tau_0) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} p(x, \tau | x_0, \tau_0) - \Omega(x) p_{\Omega}(x, \tau | x_0, \tau_0) \quad (1.40)$$

L'intégrale fonctionnelle (1.30) est donc égale au noyau intégral du propagateur (1.39) ou encore à la solution de l'équation (1.40).

L'importance de la formule de Feynman-Kac tient au fait qu'elle réduit le calcul d'une intégrale fonctionnelle du type (1.30) à la recherche d'une solution d'une équation

différentielle partielle. Dans le cas où la fonctionnelle dont on veut calculer la valeur moyenne n'est pas de la forme (1.25), il faut recourir à la théorie générale des intégrales fonctionnelles gaussiennes et de leurs perturbations.

1.2 Intégrales gaussiennes

1.2.1 Variables aléatoires gaussiennes

Une intégrale gaussienne avec nombre fini n de variables est de la forme

$$\begin{aligned} I(A, a) &= \int dx_1 \dots dx_n \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n x_i A_{ij} x_j + \sum_{i=1}^n a_i x_i \right) \\ &= \int dx \exp \left(-\frac{1}{2} (x, Ax) + (a, x) \right) \end{aligned} \quad (1.41)$$

Dans (1.41), $A = \{A_{ij}\}$ est une matrice $n \times n$ complexe symétrique (A_{ij}), ayant n valeurs propres λ_i (qui peuvent être complexes) satisfaisant

$$\operatorname{Re} \lambda_i \geq 0, \quad \lambda_i \neq 0, \quad i = 1, \dots, n \quad (1.42)$$

et $a = \{a_i\}$ est un vecteur (dont les composantes peuvent être complexes): le produit (a, x) est défini par³

$$(a, x) = \sum_{i=1}^n a_i x_i \quad (1.43)$$

L'intégrale (1.41) a la valeur (Annexe C)

$$I(A, a) = (2\pi)^{n/2} (\det A)^{-1/2} \exp \left(\frac{1}{2} (a, A^{-1} a) \right) \quad (1.44)$$

où A^{-1} est l'inverse de la matrice A (qui existe sous la condition (1.42)).

³Notons que ce produit ne fait pas intervenir de conjugués complexes.

Dans le cas où A est une matrice symétrique réelle strictement positive, c'est-à-dire que ses valeurs propres λ_i sont réelles avec $\lambda_i > 0$, $i = 1, \dots, n$, on définit une densité de probabilité de moyenne nulle par⁴

$$P(x) = \frac{(\det A)^{1/2}}{(2\pi)^{n/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x, Ax)\right) \quad (1.45)$$

Nous noterons les valeurs moyennes correspondantes par

$$\langle F \rangle = \int dx P(x) F(x) \quad (1.46)$$

La distribution gaussienne (1.45) peut être caractérisée par sa fonction génératrice $\langle \exp(a, x) \rangle$ qui, selon (1.44) a la forme⁵

$$\langle \exp(a, x) \rangle = \exp\left[\frac{1}{2}(a, A^{-1}a)\right] \quad (1.47)$$

De la relation (1.47), on peut calculer par différentiation les moments de $P(x)$

$$\langle x_k \rangle = \left. \frac{\partial}{\partial a_k} \langle \exp(a, x) \rangle \right|_{a=0} = 0 \quad (1.48)$$

$$\langle x_{k_1} x_{k_2} \rangle = \left. \frac{\partial}{\partial a_{k_1}} \frac{\partial}{\partial a_{k_2}} \langle \exp(a, x) \rangle \right|_{a=0} = (A^{-1})_{k_1 k_2} \quad (1.49)$$

La relation (1.49) est importante: elle montre que la covariance de la mesure gaussienne, $C(k_1, k_2) = \langle x_{k_1} x_{k_2} \rangle$ est donnée par les éléments de matrice de A^{-1}

$$C(k_1, k_2) = (A^{-1})_{k_1 k_2} = (k_1 | A^{-1} | k_2) \quad (1.50)$$

La propriété fondamentale d'une distribution gaussienne est que tous ses moments d'ordre supérieur sont entièrement donnés par ceux d'ordre 2 (c'est-à-dire sa covariance). Ce résultat est connu, dans son application en mécanique quantique et en théorie des

⁴Si la moyenne de x n'est pas nulle, on remplace x par $x - \langle x \rangle$ dans (1.45).

⁵Dans le cas $a = ik$, k réel, (1.47) est la transformée de Fourier de $P(x)$.

champs, sous le nom du *théorème de Wick*. Les moments d'ordre supérieur impairs sont nuls et ceux d'ordre pair valent

$$\langle x_{k_1} x_{k_2} \dots x_{k_n} \rangle = \frac{\partial}{\partial a_{k_1}} \frac{\partial}{\partial a_{k_2}} \dots \frac{\partial}{\partial a_{k_n}} \exp\left(-\frac{1}{2}(a, A^{-1}a)\right) \Big|_{a=0} \quad (1.51)$$

$$= \sum_{\text{paires}} \langle x_{k_{p_1}} x_{k_{p_2}} \rangle \dots \langle x_{k_{p_{n-1}}} x_{k_{p_n}} \rangle \quad (1.52)$$

La somme s'étend sur toutes les $(2n-1)!! = 1.3\dots(2n-1)$ façon de grouper les indices k_1, \dots, k_n en $n/2$ paires, par exemple

$$\langle x_{k_1} x_{k_2} x_{k_3} x_{k_4} \rangle = \langle x_{k_1} x_{k_2} \rangle \langle x_{k_3} x_{k_4} \rangle + \langle x_{k_1} x_{k_3} \rangle \langle x_{k_2} x_{k_4} \rangle - \langle x_{k_1} x_{k_4} \rangle \langle x_{k_2} x_{k_3} \rangle \quad (1.53)$$

1.2.2 Champs gaussiens

Dans beaucoup de situations, nous aurons un ensemble de fonctions (ou champs) $\varphi(r)$ où r appartient à \mathbb{R}^d et des fonctionnelles de ces champs $F(\varphi)$. Par $F(\varphi)$, nous entendons une application définie sur l'espace de ces fonctions à valeur complexe, par exemple

$$F(\varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dr_1 \dots dr_n F_n(r_1, \dots, r_n) \varphi(r_1) \dots \varphi(r_n) \quad (1.54)$$

où $F_n(r_1, \dots, r_n)$ sont des fonctions données, symétriques sous l'échange des arguments r_1, \dots, r_n .

La dérivée de F dans "la direction" de ψ est définie par

$$D_\psi F(\varphi) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{F(\varphi + \varepsilon\psi) - F(\varphi)}{\varepsilon} \quad (1.55)$$

Pour calculer la dérivée d'une fonctionnelle de type (1.54), il suffit de savoir dériver tous les monômes $\varphi(r_1) \dots \varphi(r_n)$. Il suit de (1.55) que

$$D_\psi (\varphi(r_1) \dots \varphi(r_n)) = \psi(r_1) \dots \varphi(r_n) + \dots + \varphi(r_1) \dots \varphi(r_{n-1}) \psi(r_n) \quad (1.56)$$

Une fonctionnelle peut aussi dépendre des dérivées de $\varphi(r)$, par exemple $F(\varphi(\cdot)) = \int dr |\nabla \varphi(r)|^2$, mais nous ne considérons pas ce cas dans cette section.

On considère fréquemment le cas où $\psi(r') = \delta_r(r') = \delta(r' - r)$, qui conduit à

$$D_{\delta_r}(\varphi(r_1)\dots\varphi(r_n)) = \delta(r_1 - r)\varphi(r_2)\dots\varphi(r_n) + (\varphi(r_1)\delta_{r_2 - r})\dots\varphi(r_n) + \dots + \varphi(r_1)\dots\varphi(r_{n-1})\delta(r_n - r) \quad (1.57)$$

et on note alors $D_{\delta_r} = \frac{\delta}{\delta\varphi(r)}$, avec

$$\frac{\delta\varphi(r')}{\delta\varphi(r)} = \delta(r' - r) \quad (1.58)$$

On voit que la collection de variables $\{\varphi(r)\}_r$ se présente comme un ensemble de variables indépendantes et que le symbole $\frac{\delta}{\delta\varphi(r)}$ a toutes les propriétés usuelles de l'opération de dérivation. On trouve

$$\frac{\delta}{\delta\varphi(r)} F(\varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dr_1 \dots dr_n F_{n+1}(r, r_1 \dots r_n) \varphi(r_1) \dots \varphi(r_n) \quad (1.59)$$

Nous définissons maintenant une moyenne gaussienne, notée $\langle F \rangle$, d'une fonctionnelle $F(\varphi)$. Pour ce faire, nous nous donnons un opérateur linéaire A strictement positif qui agit sur l'espace des champs φ et définissons la distribution gaussienne à l'aide de sa fonction génératrice en généralisant (1.47) à

$$\exp(f, \varphi) = \exp\left[\frac{1}{2}(f, A^{-1}f)\right] \quad (1.60)$$

où $f(r)$ est également une fonction sur \mathbb{R}^d et

$$(f, \varphi) = \int dr f(r)\varphi(r) \quad (1.61)$$

La formule (1.60) permet en principe de calculer la moyenne $\langle \dots \rangle$ dans le sens où tous les moments sont donnés en terme de la covariance $C(r_1, r_2) = \langle \varphi(r_1)\varphi(r_2) \rangle$ et on peut reproduire toutes les relations (1.49)-(1.52) en faisant agir la dérivée fonctionnelle $\frac{\delta}{\delta f(r)}$ sur (1.60) (l'indice k est remplacé par la variable continue r). Ainsi

$$\langle \varphi(r) \rangle = \frac{\delta}{\delta f(r)} \langle \exp(f, \varphi) \rangle \Big|_{f=0} \quad (1.62)$$

$$\begin{aligned} C(r_1, r_2) &= \frac{\delta}{\delta f(r_1)} \frac{\delta}{\delta f(r_2)} \langle \exp(f, \varphi) \rangle \Big|_{f=0} \\ &= \langle \varphi(r_1)\varphi(r_2) \rangle = (r_1 | A^{-1} | r_2) \end{aligned} \quad (1.63)$$

où $(r_1|A^{-1}|r_2)$ est le noyau de l'opérateur de covariance A^{-1}

$$(A^{-1}f)(r) = \int dr' (r|A^{-1}|r') f(r') \quad (1.64)$$

et on a le théorème de Wick (n pair)

$$\langle \varphi(r_1) \dots \varphi(r_n) \rangle = \sum_{\text{paires}} \langle \varphi(r_{p_1}) \varphi(r_{p_2}) \rangle \dots \langle \varphi(r_{p_{n-1}}) \varphi(r_{p_n}) \rangle \quad (1.65)$$

Les relations (1.60)-(1.65) définissent l'intégrale fonctionnelle gaussienne. On adopte parfois la notation formelle analogue à (1.46)

$$\langle F \rangle = \int d[\varphi(\cdot)] \exp\left(-\frac{1}{2}(\varphi, A\varphi)\right) F(\varphi) \quad (1.66)$$

où $d[\varphi(\cdot)]$ signifie l'intégration sur toutes les "composantes" $d\varphi(r)$ appropriées. Si le champ gaussien n'est pas de moyenne nulle, $\langle \varphi(r) \rangle = \varphi_0(r) \neq 0$, on peut reproduire les raisonnements précédents en remplaçant φ par $\varphi - \varphi_0$, et la formule fondamentale (1.60) devient

$$\langle \exp(f, \varphi) \rangle = \exp\left[\frac{1}{2}(f, A^{-1}f) + (f, \varphi_0)\right] \quad (1.67)$$

L'intégrale gaussienne est l'élément central de l'intégration fonctionnelle et les intégrales non gaussiennes seront toujours construites comme perturbations de cette dernière.

Il est clair que la mesure de Wiener (1.15) est une intégrale fonctionnelle gaussienne sur l'espace des chemins $x(\tau)$, $\tau \geq 0$, puisque toutes les densités de probabilité $W_{00}(x_1\tau_1, \dots, x_N\tau_N)$ sont gaussiennes (fixant ici $x_0 = 0$, $\tau_0 = 0$). L'opérateur de covariance correspondant est connu (voir (1.22))

$$\begin{aligned} (\tau_1|A^{-1}|\tau_2) &= 2D \min(\tau_1, \tau_2) \\ &= 2D[\tau_1\theta(\tau_2 - \tau_1) + \tau_2\theta(\tau_1 - \tau_2)] \end{aligned} \quad (1.68)$$

On vérifie immédiatement que

$$-\frac{1}{2D} \frac{d^2}{d\tau_1^2} (\tau_1|A^{-1}|\tau_2) = \delta(\tau_1 - \tau_2) \quad (1.69)$$

avec $(\tau_1, A^{-1}(\tau_2))|_{\tau_1=0} = 0$. Ceci montre que l'inverse de A^{-1} est l'opérateur différentiel

$$A = -\frac{1}{2D} \frac{d^2}{d\tau_1^2} \quad (1.70)$$

agissant sur les fonctions $x(\tau)$, $\tau \geq 0$, avec condition au bord $x(0) = 0$. Ainsi, la mesure de Wiener sur les chemins browniens peut aussi être comprise comme l'intégrale fonctionnelle gaussienne relative à la covariance (1.68), ce qui donne une signification précise à l'écriture formelle des physiciens

$$dW_D[x(\cdot)] = d[x(\cdot)] \exp \left[-\frac{1}{4D} \int d\sigma \left(\frac{dx(\sigma)}{d\sigma} \right)^2 \right] \quad (1.71)$$

C'est le mérite de Wiener (en 1921 - 1923) d'avoir montré que la valeur moyenne brownienne (1.15) peut être vraiment conçue comme une mesure sur l'espace des chemins au sens précis de la théorie de la mesure des mathématiciens. En ce qui nous concerne, c'est essentiellement le seul cas, avec l'intégrale gaussienne définie par (1.60), où ce sens mathématique peut être donné. Pour nous, l'intégrale fonctionnelle restera toujours définie par un processus de limite, comme nous l'avons discuté à propos de (1.27) et la notation de la limite sous forme de signe intégral du type (1.71) reste symbolique⁷.

1.3 Intégrale de chemin en mécanique quantique

1.3.1 Intégrale de Feynman

La mécanique quantique d'une particule non relativiste de masse m , soumise à un potentiel $V(x)$, est régie par l'équation de Schrödinger (1928) (ici, à une dimension pour simplifier)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x)\psi(x, t) \quad (1.72)$$

⁷En réalité, on montre qu'avec probabilité 1, les chemins browniens ne sont pas différentiables. Ce sont des chemins fractals avec dimension de Hausdorff $d_H = 2$. La notation (1.71) n'est qu'une façon mnémotechnique de rappeler le processus limite (1.29).

ou encore, sous forme opératorielle,

$$\psi(t) = U(t, t_0)\psi(t_0), \quad U(t_0, t_0) = I \quad (1.73)$$

$$U(t, t_0) = \exp\left(\frac{1}{i\hbar}(H_0 + V)(t - t_0)\right) \quad (1.74)$$

où $H = H_0 + V$, $H_0 = p^2/2m$, $p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ et V est le potentiel de multiplication par $V(x)$.

Les liens qu'entretient l'opérateur d'évolution quantique $U(t, t_0)$ (1.74) avec les objets de la mécanique classique ont été un sujet d'étude dès l'origine de la mécanique quantique. Dirac (1932), en particulier, suggère qu'il y a un rapport intéressant entre le propagateur quantique $\langle x|U(t, t_0)|x_0\rangle$ et l'action classique S pour le même système (voir [6, 7])

$$S = \int_{t_0}^t ds L(x(s), v(s)) \quad (1.75)$$

où $L(x, v)$ est la fonction de Lagrange (dépendant de la position et de la vitesse)

$$L(x, v) = \frac{1}{2}mv^2 - V(x) \quad (1.76)$$

Développant les idées de Dirac, Feynman (1942) [8, 9] montre que la relation formelle entre ces quantités s'écrit sous forme d'une intégrale fonctionnelle

$$\begin{aligned} \langle x|U(t, t_0)|x_0\rangle &= \int_{x_0, t_0}^{x, t} d[x(\cdot)] \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(x(\cdot))\right) \\ &= \int_{x_0, t_0}^{x, t} d[x(\cdot)] \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t ds \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dx(s)}{ds}\right)^2 - V(x(s))\right)\right] \end{aligned} \quad (1.77)$$

Dans (1.77), l'action $S(x(\cdot))$ est considérée comme une fonctionnelle de toutes les trajectoires possibles qui débutent en x_0 au temps t_0 et aboutissent en x au temps t .

Considérons l'évolution de la particule libre $U_0(t - t_0) = \exp(-iH_0(t - t_0)/\hbar)$ avec

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = (H_0\psi)(x, t) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x, t) \quad (1.78)$$

Cette équation est identique à (1.4) lorsqu'on établit la correspondance

$$\tau = it, \quad D = \frac{\hbar}{2m} \quad (1.79)$$

Ainsi selon (1.6), le propagateur quantique libre est donné par

$$\langle x | \exp(-iH_0(t-t_0)/\hbar) | x_0 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}} \exp\left(i\frac{m(x-x_0)^2}{2\hbar(t-t_0)}\right) \quad (1.80)$$

Dans ce cas, le lien avec l'action classique est aisé. Soit $x(s)$ la trajectoire classique libre telle que $x(t_0) = x_0$, $x(t) = x$.

$$x(s) = x_0 + \frac{s-t_0}{t-t_0}(x-x_0) \quad (1.81)$$

L'action correspondante est

$$S_0(x, t, x_0, t_0) = \frac{m}{2} \int_{t_0}^t ds \left(\frac{dx(s)}{ds} \right)^2 = \frac{m}{2} \frac{(x-x_0)^2}{(t-t_0)} \quad (1.82)$$

On voit donc

$$\langle x | \exp\left(\frac{1}{i\hbar} H_0(t-t_0)\right) | x_0 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_0(x, t, x_0, t_0)\right) \quad (1.83)$$

Il y a plusieurs façons de donner un sens à la formule générale (1.77). La première méthode consiste à partir de la formule de Trotter pour le propagateur en reproduisant les étapes (1.33)-(1.35).

$$\begin{aligned} \langle x | \exp\left(\frac{1}{i\hbar} H_0(t-t_0)\right) | x_0 \rangle &= \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \langle x | \left[\exp\left(\frac{1}{i\hbar} \frac{H_0(t-t_0)}{N+1}\right) \right]^{N+1} \left[\exp\left(\frac{1}{i\hbar} \frac{V(t-t_0)}{N+1}\right) \right]^{N+1} | x_0 \rangle \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_1 \dots dx_N \langle x | \exp\left(\frac{H_0 \varepsilon}{i\hbar}\right) | x_N \rangle \exp\left(\frac{V(x_N) \varepsilon}{i\hbar}\right) \\ &\quad \dots \langle x_1 | \exp\left(\frac{H_0 \varepsilon}{i\hbar}\right) | x_0 \rangle \exp\left(\frac{V(x_0) \varepsilon}{i\hbar}\right) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \varepsilon}} \right)^{N+1} \int dx_1 \dots dx_N \exp \left\{ \frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{k=0}^N \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right)^2 - V(x_k) \right] \right\} \end{aligned} \quad (1.84)$$

avec $x_{N+1} = x$, $\varepsilon = (t-t_0)/(N+1)$.

On imagine que $x_k = x(t_k)$, $k = 0, \dots, N+1$, représentent les coordonnées d'une certaine trajectoire de la particule dans l'espace de configuration. En prenant formellement la limite $\varepsilon \rightarrow 0$, on est conduit à l'écriture (1.77). Dans (1.77), le symbole $d[x(\cdot)]$ signifie donc qu'il faut effectuer les intégrales sur $dx_1 \dots dx_N$ avec le facteur $(m/2\pi i \hbar \varepsilon)^{(N+1)/2}$ et prendre ensuite la limite $\varepsilon \rightarrow 0$.

Une deuxième méthode se base sur l'analogie entre l'équation de la diffusion (1.40) et celle de Schrödinger (1.72). On passe de l'une à l'autre par la correspondance (1.79) et $\Omega = V/\hbar$, comme le montre aussi la comparaison des propagateurs browniens (1.30) et quantiques (1.74). Le point important est que le propagateur quantique peut être obtenu comme prolongement analytique du propagateur brownien (1.30) sur l'axe des temps purement imaginaire.

En rendant l'axe des temps imaginaire, c'est-à-dire en remplaçant ε par $i\varepsilon$ dans (1.28) avec $D = \hbar/2m$ et $\Omega = V/\hbar$, on voit que l'intégrale fonctionnelle (1.30) devient formellement égale à l'intégrale de Feynman (1.77).

Une troisième méthode consiste à développer (1.77) en puissances de V et montrer que les termes de cette série s'identifient à ceux du calcul de perturbation dépendant du temps (série de Dyson) de la mécanique quantique.

Finalement, suivant la méthode originale de Feynman, on peut vérifier par un calcul direct que (1.77) obéit à l'équation de Schrödinger [9].

Un certain nombre de remarques s'imposent. Malgré les analogies, l'interprétation et le statut mathématique des intégrales de Wiener et de Feynman sont très différents.

L'intégrale de Wiener effectue une moyenne associée à un poids de probabilité gaussien, et possède un statut mathématique bien défini. Le propagateur brownien décrit l'évolution irréversible d'une densité de probabilité classique.

L'intégrale de Feynman, qui ne fait intervenir que des phases purement imaginaires,

n'a pas d'interprétation probabiliste. Le propagateur quantique décrit l'évolution réversible d'une amplitude de probabilité quantique. On peut dire de la formule (1.77) que l'amplitude de trouver une particule quantique en x au temps t est donnée par une superposition linéaire d'états qui contribuent chacun avec un facteur de phase $\exp(\frac{i}{\hbar}S(x(\cdot)))$ correspondant à une trajectoire classique possible joignant x à x_0 en un temps $t - t_0$. Alors que les réalisations des chemins browniens sont en principe physiquement observables, ce n'est pas le cas des trajectoires qui interviennent dans l'intégrale de Feynman à cause des relations d'incertitude qui interdisent une détermination jointe arbitrairement précise de la position et de la vitesse de la particule quantique.

On voit que le calcul de l'évolution quantique sous forme de l'intégrale fonctionnelle (1.77) requiert de délicates intégrations de fonctions oscillantes. Pour contourner ce problème, il est usuel d'étudier son prolongement $\exp(-H(t - t_0)/\hbar)$ aux temps purement imaginaires pour lesquels l'intégrale fonctionnelle de type Feynman-Kac est bien définie. Dans ce cas, on dit qu'on a effectué une rotation de Wick (rotation $t \rightarrow -it$ de $\pi/2$ dans le plan complexe des temps), ou encore qu'on travaille avec la formulation euclidienne de la mécanique quantique. Cette terminologie est liée au fait qu'en relativité restreinte, le changement $t \rightarrow -it$ transforme la métrique de Minkowski en métrique euclidienne habituelle. On revient alors au propagateur quantique par la rotation de Wick inverse.

Dans la version euclidienne, le propagateur (1.77) s'écrit donc

$$\begin{aligned} \langle x | \exp(-H(t - t_0)/\hbar) | x_0 \rangle &= \\ &= \int_{x_0, t_0}^{x, t} d[x(\cdot)] \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t ds \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dx(s)}{ds} \right)^2 - V(x(s)) \right) \right] \\ &= \int_{x_0, t_0}^{x, t} d[x(\cdot)] \exp \left(-\frac{1}{\hbar} S_E(x(\cdot)) \right) \end{aligned} \quad (1.85)$$

où comme d'habitude, il faut considérer (1.85) comme limite de la forme discrétisée avec

$$\left(\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon}} \right)^{N-1} dx_1 \dots dx_N, \quad \varepsilon = \frac{t - t_0}{N - 1}, \quad N \rightarrow \infty \quad (1.86)$$

L'expression (1.85) est identique à l'intégrale de Wiener conditionnelle

$$\langle x | \exp(-H(t-t_0)/\hbar) | x_0 \rangle = \int_{x_0, t_0}^{x, t} dW_D \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t ds V(x(s))\right) \quad (1.87)$$

avec constante de diffusion $D = \hbar/2m$, comme on l'a déjà remarqué.

Il est important de noter que l'action S_E et le lagrangien euclidien

$$\begin{aligned} S_E(x(\cdot)) &= \int_{t_0}^t ds L_E(x(s), v(s)) \\ L_E(x(s), v(s)) &= \frac{1}{2}mv^2 + V(x) \end{aligned} \quad (1.88)$$

qui apparaissent dans (1.85) diffèrent de ceux de la mécanique classique (1.76) par le signe du potentiel.

1.3.2 L'approximation de la phase stationnaire

Nous nous bornons ici à illustrer la méthode de la phase stationnaire dans le cas de la particule quantique. Rappelons tout d'abord le principe du col pour une intégrale unidimensionnelle de la forme

$$I(\lambda) \equiv \int_a^b dx \exp(-\lambda f(x)) \quad (1.89)$$

où $f(x)$ est une fonction réelle, supposée avoir un seul minimum en x_0 et $a < x_0 < b$. On montre alors que le comportement asymptotique de $I(\lambda)$ pour $\lambda \rightarrow \infty$ est donné en remplaçant $f(x)$ dans (1.89) par son approximation quadratique au voisinage de x_0 , supposant $f''(x_0) > 0$

$$\begin{aligned} I(\lambda) &\sim \exp(-\lambda f(x_0)) \int_a^b dx \exp\left(-\lambda \frac{(x-x_0)^2}{2} f''(x_0)\right) \\ &\sim \exp(-\lambda f(x_0)) \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda f''(x_0)}}, \quad \lambda \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (1.90)$$

Dans le cas d'une phase purement imaginaire, si $f'(x)$ ne s'annule qu'une seule fois en x_0 , $a < x_0 < b$, et $f''(x) \neq 0$, on obtient

$$\begin{aligned} J(\lambda) &\equiv \int_a^b dx \exp(i\lambda f(x)) \\ &\sim \exp(i\lambda f(x_0)) \sqrt{\frac{2i\pi}{\lambda f''(x_0)}} \quad \lambda \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (1.91)$$

Des preuves détaillées des formules (1.90) et (1.91) peuvent être trouvées dans [10]. L'extension au cas des intégrales multidimensionnelles, et a fortiori, aux intégrales fonctionnelles, est non-triviale. Par la suite, nous allons appliquer les généralisations naturelles de (1.90) et (1.91) aux intégrales fonctionnelles sans prétendre à aucune rigueur mathématique. C'est surtout l'interprétation physique du résultat qui retiendra notre attention.

À titre d'illustration, nous appliquons la méthode de la phase stationnaire ou du col au calcul des intégrales fonctionnelles (1.77) et (1.85).

Le rôle du grand paramètre λ est ici joué par \hbar^{-1} et plus précisément, la méthode se justifie lorsque $S \gg \hbar$ et donne ainsi une approximation semi-classique du propagateur.

Puisque $S(x(t))$ est l'action classique, la condition de stationnarité de $S(x(t))$ sous toutes les variations des chemins $x(s)$ aux extrémités fixes

$$x(t_0) = x_0, \quad x(t) = x \quad (1.92)$$

fournit les équations d'Euler-Lagrange, lesquelles, pour la forme (1.76) de la fonction de Lagrange, sont équivalentes à l'équation du mouvement classique

$$m \frac{d^2 x(s)}{ds^2} = -V'(x(s)) \quad (1.93)$$

Supposons que (1.93) admette une seule solution $x_2(s)$ satisfaisant aux conditions (1.92). Introduisons les variables de fluctuations autour de la trajectoire classique

$$\xi(s) = x(s) - x_2(s), \quad \xi(t_0) = \xi(t) = 0 \quad (1.94)$$

et développons $S(x(\cdot)) = S(x_2(\cdot) + \xi(\cdot))$ jusqu'au deuxième ordre en $\xi(\cdot)$:

$$S(x(\cdot)) = S(x_2(\cdot)) + \frac{1}{2} \int_{t_0}^t ds \left[m \left(\frac{d\xi(s)}{ds} \right)^2 - V''(x_2(s)) \xi^2(s) \right] + \mathcal{O}(\xi^3) \quad (1.95)$$

Le terme linéaire en ξ tombe à cause de la stationnarité de $S(x(\cdot))$. Après une intégration par partie, et utilisant $\xi(t_0) = \xi(t) = 0$, le terme du membre de droite de (1.95) peut être écrit comme forme quadratique

$$\int_{t_0}^t \left(\xi(s) \left(-m \frac{d^2}{ds^2} - V''(x_2(s)) \right) \xi(s) \right) ds \equiv (\xi, D\xi) \quad (1.96)$$

où D est l'opérateur différentiel

$$D = -m \frac{d^2}{ds^2} - V''(x_2(s)) \quad (1.97)$$

agissant dans l'intervalle $[t_0, t]$ sur les fonctions $\xi(s)$ telles que $\xi(t_0) = \xi(t) = 0$.

Ainsi, négligeant les termes d'ordre supérieur à 2, l'action dans (1.77) devient (1.95) et (1.96) ($x_2(\cdot)$ étant un chemin fixé, nous pouvons remplacer $d[x(\cdot)]$ par $d[\xi(\cdot)]$) et ainsi

$$\begin{aligned} \langle x|U(t, t_0)|x_0 \rangle &\simeq \\ &\simeq \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(x, x_0; t - t_0)\right) \int_{0, t_0}^{0, t} d[\xi(\cdot)] \exp\left(\frac{i}{2\hbar} (\xi, D\xi)\right) \end{aligned} \quad (1.98)$$

Dans le premier facteur apparaît l'exponentielle de l'action évaluée pour le chemin $x_2(\cdot)$

$$S(x_2(\cdot)) = S(x, x_0; t - t_0) \quad (1.99)$$

La notation (1.99) indique qu'en vertu des conditions (1.94), cette action peut être considérée comme fonction des points de départ x_0 et d'aboutissement x du chemin $x_2(\cdot)$ dans le temps $t - t_0$.

Le second facteur est une intégrale gaussienne qui donne lieu au déterminant des fluctuations.

Dans le cas de l'intégrale euclidienne (1.85), on a la formule analogue à (1.98) avec i remplacé par $-i$ et V par $-V$.

Même avec ces approximations, l'évaluation explicite de (1.98) n'est pas élémentaire: il faut pouvoir résoudre l'équation classique (1.93) sous les conditions (1.92), puis calculer l'intégrale gaussienne des fluctuations. Pour ce dernier calcul, il faut en principe revenir à la version discrète (voir commentaire après (1.84)).

$$\begin{aligned}
 \int_{0,t_0}^{0,t} d[\xi(\cdot)] \exp\left(\frac{i}{2\hbar}(\xi, D\xi)\right) &= \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}}\right)^{N+1} \int d\xi_1 \dots d\xi_N \exp\left(\frac{i}{2\hbar}(\xi, D_N \xi)\right) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\sqrt{\frac{m}{\varepsilon}}\right)^{N+1} (\det D_N)^{-\frac{1}{2}} \quad (1.100)
 \end{aligned}$$

Dans (1.100), $\xi = \xi_1, \dots, \xi_N$ et D_N représente la matrice correspondant à la version discrète de la forme quadratique (1.96) (on a utilisé (1.44)). Diverses méthodes existent pour calculer $\det D_N$ et la limite (1.100) (Annexe D).

L'utilisation de la normalisation fournie par l'évolution libre (1.80) permet d'écrire la formule (1.98) de manière compacte. En effet, si nous appliquons la formule (1.98) au cas de l'évolution libre $U_0(t - t_0) = \exp(-iH_0(t - t_0))$, nous obtenons de (1.80), (1.82) et (1.97) la relation exacte

$$\langle 0|U_0(t - t_0)|0\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar(t - t_0)}} = \int_{0,t_0}^{0,t} d[\xi(\cdot)] \exp\left(\frac{i}{2\hbar}(\xi, D_0 \xi)\right) \quad (1.101)$$

avec

$$D_0 = -\frac{d^2}{ds^2} \quad (1.102)$$

agissant sur les fonctions $\xi(s)$, $\xi(t_0) = \xi(t) = 0$.

En formant le rapport $\langle x|U(t - t_0)|x_0\rangle / \langle 0|U_0(t - t_0)|0\rangle$ on voit de (1.101) et de l'approximation discrète (1.100) qu'on peut mettre (1.98) sous la forme

$$\langle x|U(t - t_0)|x_0\rangle \simeq \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar(t - t_0)}} \sqrt{\frac{\det D_0}{\det D}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(x, x_0; t - t_0)\right) \quad (1.103)$$

Le résultat final qui suit du calcul des déterminants est entièrement exprimable en terme de l'action (1.99). Il est donné par la formule de van Vleck (1928) (Annexe D).

$$\langle x|U(t-t_0)|x_0\rangle \simeq \frac{1}{2\pi i\hbar} \left[-\frac{\partial^2}{\partial x_0 \partial x} S(x, x_0; t-t_0) \right]^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(x, x_0; t-t_0)\right) \quad (1.104)$$

En plus du cas libre, il est une circonstance où l'approximation de la phase stationnaire conduisant à (1.104) est exacte, c'est celui d'un potentiel linéaire ou quadratique. En effet, le développement (1.95) au deuxième ordre devient exact.

Pour illustrer la méthode, traitons le cas

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad \omega > 0 \quad (1.105)$$

dans la version de l'intégrale euclidienne (1.85) avec

$$S_E = \int_{t_0}^t ds \frac{m}{2} \left(\left(\frac{dx(s)}{ds} \right)^2 - \omega^2 x^2(s) \right) \quad (1.106)$$

(il faut changer $i \rightarrow -1$ et $V \rightarrow -V$ dans (1.103)).

L'équation de stationnarité de S_E est

$$\frac{d^2}{ds^2} x(s) = \omega^2 x(s), \quad x(t_0) = x_0, \quad x(t) = x \quad (1.107)$$

et on vérifie que la solution $x_2(s)$ correspondante est donnée par

$$x_2(s) = x_0 \cosh(\omega(s-t_0)) + \frac{x - x_0 \cosh(\omega(s-t_0))}{\sinh(\omega(s-t_0))} \sinh(\omega(s-t_0)) \quad (1.108)$$

En insérant (1.108) dans (1.106), on trouve

$$S_E(x, x_0; t-t_0) = \frac{m\omega}{2 \sinh(\omega(t-t_0))} \left[(x_0^2 - x^2) \cosh(\omega(t-t_0)) - 2x_0 x \right] \quad (1.109)$$

Pour calculer $(\det D_0 / \det D)$, nous remarquons que

$$D = -\frac{d^2}{ds^2} + \omega^2, \quad D_0 = -\frac{d^2}{ds^2} \quad (1.110)$$

sont diagonaux sur la base de fonctions propres

$$\varphi_k(s) = \sqrt{\frac{2}{t-t_0}} \sin\left(k\pi\left(\frac{s-t_0}{t-t_0}\right)\right), \quad k = 1, 2, \dots \quad (1.111)$$

avec valeurs propres respectivement égales $(k\pi/(t-t_0))^2 + \omega^2$ et $(k\pi/(t-t_0))^2$. Ainsi

$$\frac{\det D}{\det D_0} = \prod_{k>0} \left(1 - \left(\frac{\omega(t-t_0)}{k\pi}\right)^2\right) = \frac{\sinh(\omega(t-t_0))}{\omega(t-t_0)} \quad (1.112)$$

et

$$\langle x | \exp(-H(t-t_0)) | x_0 \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh(\omega(t-t_0))}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_E(x, x_0; t-t_0)\right) \quad (1.113)$$

où S_E est donnée par (1.109).

Le propagateur en temps réel s'obtient de (1.113) en changeant $t-t_0 \rightarrow i(t-t_0)$

$$\langle x | \exp(-iH(t-t_0)) | x_0 \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega(t-t_0))}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(x, x_0; t-t_0)\right) \quad (1.114)$$

avec

$$S(x, x_0; t-t_0) = \frac{m\omega}{2\sin(\omega(t-t_0))} [(x_0^2 - x^2) \cos(\omega(t-t_0)) - 2x_0x] \quad (1.115)$$

La formule (1.114) est un cas particulier de celle de van Vleck, lorsque l'action a la forme (1.115). On retrouve naturellement le cas libre (1.80) lorsque $\omega \rightarrow 0$.

1.3.3 Mécanique statistique quantique

L'intégrale fonctionnelle est également bien adaptée à la représentation de la mécanique statistique. On sait que les fonctions thermodynamiques d'un système décrit par l'hamiltonien macroscopique s'obtiennent à partir de la fonction de partition Z

$$Z = \sum_n \exp(-\beta E_n) = \text{Tr} \exp(-\beta H) \quad (1.116)$$

où les E_n sont les énergies propres du système, répétées selon leur multiplicité.

Considérons le cas de particules non couplées, mais soumises à des champs extérieurs. Dans cette situation simple, les quantités thermodynamiques sont entièrement déterminées par la fonction de partition (1.116) relative à l'hamiltonien $H = H_0 + V$ d'une seule particule.

Pour exprimer la trace, on peut utiliser la relation de fermeture des états propres $x|\varphi_n$ de H

$$\sum_n \langle x|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|x'\rangle = \delta(x-x') \quad (1.117)$$

pour écrire

$$\begin{aligned} Z &= \sum_n \langle\varphi_n|\exp(-\beta H)|\varphi_n\rangle \\ &= \int dx \int dx' \sum_n \langle\varphi_n|x\rangle\langle x|\exp(-\beta H)|x'\rangle\langle x'|\varphi_n\rangle \\ &= \int dx \langle x|\exp(-\beta H)|x\rangle \end{aligned} \quad (1.118)$$

On constate que Z est la partie diagonale du noyau de $\exp(-\beta H)$, lequel peut être représenté par l'intégrale fonctionnelle euclidienne (1.85) en posant $t_0 = 0$ et $t = \beta\hbar$

$$\begin{aligned} Z &= \int dx \int_{x,0}^{x,\beta\hbar} d[x(\cdot)] \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} ds \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dx(s)}{ds}\right)^2 + V(x(s))\right)\right] \\ &= \int dx \int_{x,0}^{x,\beta\hbar} dW_D \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} ds V(x(s))\right), \quad D = \frac{\hbar}{2m} \end{aligned} \quad (1.119)$$

On voit que (1.119) fait intervenir les chemins fermés qui partent et aboutissent en x . Une application immédiate est le calcul de la fonction Z^{osc} de l'oscillateur harmonique (1.105). Utilisant l'expression (1.113)

$$Z^{osc} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh(3\hbar\omega)}} \int dx \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_E(x, x; 3\hbar)\right) \quad (1.120)$$

avec

$$\begin{aligned} S_E(x, x; 3\hbar) &= \frac{m\omega}{\sinh(3\hbar\omega)} (\cosh(3\hbar\omega) - 1) x^2 \\ &= 2 \frac{m\omega}{\sinh(3\hbar\omega)} (\sinh(3\hbar\omega/2))^2 x^2 \end{aligned} \quad (1.121)$$

D'où le résultat connu

$$Z^{osc} = \frac{1}{2 \sinh(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega)} \quad (1.122)$$

1.4 Conclusion

Nous avons vu dans ce chapitre comment la théorie du mouvement brownien a conduit à considérer les premières intégrales de chemin. Nous avons introduit l'intégrale de Wiener décrivant le mouvement brownien comme un processus stochastique et l'intégrale de Feynman décrivant l'évolution réversible de l'amplitude de transition quantique. Le lien formel entre les deux intégrales fonctionnelles a été discuté. Nous avons appliqué l'intégrale de chemin en mécanique quantique à des systèmes à un degré de liberté pour plus de simplicité. La généralisation à des systèmes à plusieurs degrés de liberté est systématique.

Chapitre 2

Méthode Monte-Carlo hamiltonienne

On a l'impression de travailler pour rien ... mais à la fin, tout fini par sortir : l'efficacité des méthodes Monte-Carlo, dans certains cas particuliers, semble incroyable. On doit voir les résultats - et les voir de très près - pour les croire.

A. N. MARSHALL

En décrivant l'évolution de systèmes physiques à l'aide de l'intégrale fonctionnelle, nous avons abouti à l'évaluation d'une intégrale multidimensionnelle.

$$\begin{aligned} \langle x | \exp(-H(t-t_0)/\hbar) | x_0 \rangle &= \\ &= \int_{x_0, t_0}^{x, t} d[x(\cdot)] \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t ds \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dx(s)}{ds} \right)^2 + V(x(s)) \right) \right] \\ &= \int_{x_0, t_0}^{x, t} d[x(\cdot)] \exp \left(-\frac{1}{\hbar} S_E(x(\cdot)) \right) \end{aligned} \tag{2.1}$$

Nous avons jusqu'à maintenant présenté une méthode approximative telle que la phase stationnaire: une approche alternative pour évaluer ces intégrales est le calcul

numérique. Le prix à payer est la limitation à des systèmes de taille finie et l'incertitude inhérente aux méthodes stochastiques de type Monte-Carlo que nous utiliserons [22], [23]. Cette évaluation numérique nous permettra de construire un hamiltonien effectif qui, après diagonalisation, fournira le spectre du système en considération [11, 12, 13, 14].

Les raisons qui appellent la construction d'un hamiltonien effectif sont:

(i) En se basant sur l'invariance d'échelle, le groupe de renormalisation à la Wilson [25] vise à construire un hamiltonien renormalisé décrivant la physique au point critique. Un tel hamiltonien est supposé avoir moins de degrés de liberté que l'hamiltonien original. Notre but est similaire à cette construction, dans le sens où nous visons un hamiltonien effectif ayant moins de degrés de liberté que l'hamiltonien original et décrivant la physique de basse énergie.

(ii) L'application de la formulation hamiltonienne dans la résolution de la théorie des champs consiste à construire un espace de Fock paramétrisé par une coupure du tenseur d'énergie-impulsion et une coupure du nombre de particules. Quand on augmente ces paramètres, ce qui revient à augmenter la borne supérieure de l'énergie, la densité des états augmente de façon exponentielle et fait que le système devient hors de contrôle. À l'opposé, la méthode Monte-Carlo hamiltonienne se caractérise par quelques degrés de liberté décrivant la physique de basse énergie et la diminution de la densité des états quand on augmente l'énergie.

(iii) L'énorme succès de la théorie des champs sur réseau est certainement dû au fait que la méthode Monte-Carlo est une excellente technique pour évaluer des intégrales multidimensionnelles. L'amplitude de transition d'un opérateur est évaluée numériquement via la méthode Monte-Carlo (*e.g.* algorithme de Metropolis [28]).

$$\langle O \rangle = \frac{\int [dx] O[x] \exp(-\frac{1}{\hbar} S[x])}{\int [dx] \exp(-\frac{1}{\hbar} S[x])} \approx \frac{1}{N_s} \sum_C O[C] \quad (2.2)$$

où C est une configuration arbitraire générée par la mesure de probabilité $P[x] = \frac{1}{Z} \exp(-\frac{1}{\hbar} S[x])$. L'intérêt de la méthode Monte-Carlo réside dans les bons résultats nu-

mériques qu'elle permet d'obtenir. On peut résoudre une théorie des champs sur un réseau de taille 20^4 en calculant les observables physiques à partir de quelques configurations représentatives. On obtient des résultats avec des erreurs statistiques de l'ordre de quelques pourcents. Grâce à cette méthode, il est possible de déterminer les états de basse énergie du spectre des hadrons.

D'un autre côté, nous pouvons exprimer l'amplitude de transition dans un temps imaginaire via l'hamiltonien

$$\begin{aligned} \langle x | \exp(-H(t-t_0)/\hbar) | x_0 \rangle &= \sum_{n=1}^{\infty} \langle x | E_n \rangle \exp(-E_n(t-t_0)/\hbar) \langle E_n | x_0 \rangle \\ &\approx \langle x | \exp(-H_{eff}(t-t_0)/\hbar) | x_0 \rangle \\ &= \sum_{i=1}^N \langle x | E_i^{eff} \rangle \exp(-E_i^{eff}(t-t_0)/\hbar) \langle E_i^{eff} | x_0 \rangle \quad (2.3) \end{aligned}$$

Dans (2.3), nous avons remplacé l'hamiltonien H par un hamiltonien effectif H_{eff} décrivant N degrés de liberté seulement. L'idée de la méthode Monte-Carlo hamiltonienne est de construire un hamiltonien effectif de sorte que l'amplitude de transition devient une somme finie parcourant N états propres, où N est de l'ordre de grandeur de N_c , i.e. le nombre de configurations d'équilibre thermique représentant approximativement l'intégrale (2.2).

L'hamiltonien effectif permettrait de décrire des phénomènes physiques qui sont trop compliqués pour les méthodes conventionnelles incluant les techniques standards sur réseau:

- le calcul non-perturbatif des sections efficaces et des constantes de désintégration de particules composées.
 - la détermination de la masse des états excités du spectre des hadrons et leurs fonctions d'onde.
 - les fonctions de structure des hadrons reliées aux fonctions d'onde de ces derniers.
- Contrairement à la formulation lagrangienne sur le réseau, la formulation hamiltonienne

est pratique pour le calcul des fonctions d'onde.

- la formulation lagrangienne échoue dans la description de la QCD à température finie, en particulier avec une densité baryonique finie parce que l'action devient un nombre complexe. Une formulation hamiltonienne est une alternative.

Après les arguments que nous venons de donner sur l'utilité de l'hamiltonien effectif, nous procédons maintenant à la description de sa construction.

2.1 Construction de l'hamiltonien effectif à partir d'une base régulière

2.1.1 Base régulière de l'espace d'Hilbert

Soit $\{e_i, i = 1, 2, 3, \dots\}$ une base de l'espace d'Hilbert et pour N fini, considérons les éléments de matrices

$$M_{ij}(t, t_0) = \langle e_i | \exp(-H(t - t_0)/\hbar) | e_j \rangle, \quad i, j \in 1, \dots, N \quad (2.4)$$

En supposant que H est un opérateur auto-adjoint sur tout l'espace d'Hilbert¹, $M_{ij}(t, t_0)$ est une matrice hermitienne positive, il existe donc une transformation unitaire U et une matrice réelle $D(t, t_0)$ tel que

$$M_{ij}(t, t_0) = U^{*T} D(t, t_0) U^T \quad (2.5)$$

Soit $m(E_{\pm}^{e, f})$ le sous-espace engendré par les vecteurs propres $|E_{\pm}^{e, f}\rangle$ de H associés

¹Le domaine de définition de H noté $D(H)$ est dense dans l'espace d'Hilbert ainsi que le domaine de définition de H^* noté $D(H^*)$. Nous supposons en plus de $H = H^*$ que $D(H) = D(H^*)$, pour que H soit auto-adjoint, étant donné que l'opérateur hamiltonien est souvent non borné.

aux valeurs E_k^{eff} , $k = 1, 2, 3, \dots, N$ et soit

$$P_{m(E_k^{eff})} = \sum_{k=1}^N |E_k^{eff}\rangle \langle E_k^{eff}| = \mathcal{I} \quad (2.6)$$

le projecteur sur $m(E_k^{eff})$. Nous avons alors,

$$\begin{aligned} M_{ij}(t, t_0) &= \sum_{k=1}^N P_{m(E_k^{eff})}(\epsilon_i | \exp(-H(t-t_0)/\hbar) | \epsilon_j) \\ &= \sum_{k=1}^N \langle \epsilon_i | E_k^{eff} \rangle \exp(-E_k^{eff}(t-t_0)/\hbar) \langle E_k^{eff} | \epsilon_j \rangle \end{aligned} \quad (2.7)$$

On voit de (2.5) et de la représentation spectrale (2.7) qu'on peut établir l'identification

$$U_{ik}^* = \langle \epsilon_i | E_k^{eff} \rangle, \quad D_k(t-t_0) = \exp(-E_k^{eff}(t-t_0)/\hbar) \quad (2.8)$$

Supposons pour l'instant que les éléments de matrice $M_{ij}(t, t_0)$, $i, j = 1, \dots, N$ sont connus. La diagonalisation de $M(t, t_0)$ fournit les valeurs propres $D_k(t-t_0)$, $k = 1, \dots, N$, qui avec (2.8) donnent le spectre d'énergie,

$$E_k^{eff} = -\frac{\hbar}{(t-t_0)} \ln D_k(t-t_0), \quad k = 1, \dots, N \quad (2.9)$$

Les vecteurs propres $|E_k^{eff}\rangle$, $k = 1, \dots, N$ correspondants, s'identifient avec les vecteurs colonnes de U_{ik}^* . De (2.8) nous pouvons extraire la fonction d'onde du k ème état propre exprimée en terme de la base $\{\epsilon_i\}$. À partir des éléments de matrice $M_{ij}(t, t_0)$, nous pouvons donc explicitement construire un hamiltonien effectif

$$H_{eff} = \sum_{k=1}^N E_k^{eff} |E_k^{eff}\rangle \langle E_k^{eff}| \quad (2.10)$$

2.1.2 Évaluation des éléments de matrice

Nous suggérons d'évaluer les éléments de matrice $M_{ij}(t, t_0)$ par une méthode stochastique de type Monte-Carlo [22], [23]. Pour illustrer l'idée, considérons une particule qui

peut occuper les sites $\{x_1, \dots, x_N\}$ d'un réseau à une dimension. Les vecteurs de base de l'espace d'Hilbert $|\epsilon_i\rangle$, $i = 1, \dots, N$ sont des états caractéristiques localisés aux sites x_i . Nous les définissons par $\epsilon_i(x) = 1$ dans l'intervalle $I_i = [x_i, x_{i+1}]$ et zéro ailleurs. $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$. Pour exprimer les éléments de matrice $M_{ij}(t, t_0)$ on peut utiliser la relation de complétude

$$\int dy |y\rangle\langle y| = \mathcal{I} \quad (2.11)$$

pour écrire

$$\begin{aligned} M_{ij}(t, t_0) &= \int dy \int dz (\epsilon_i|y\rangle\langle y| \exp(-H(t-t_0)/\hbar)|z\rangle\langle z|\epsilon_j) \\ &= \int_{I_i} dy \int_{I_j} dz \langle y|\exp(-H(t-t_0)/\hbar)|z\rangle \\ &= \int_{I_i} dy \int_{I_j} dz \int_{y, t_0}^{z, t} d[x(\cdot)] \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_E(x(\cdot))\right) \end{aligned} \quad (2.12)$$

avec $i, j \in 1, 2, \dots, N$. La ligne (2.12) résulte de la définition (1.85) du propagateur quantique $\langle y|\exp(-H(t-t_0)/\hbar)|z\rangle$. Dans cette équation, l'action $S_E(x(\cdot))$ est considérée comme une fonctionnelle de toutes les trajectoires possibles qui débutent en $y = x_i$ au temps t_0 et aboutissent en $z = x_j$ au temps t . L'action d'une trajectoire ou un chemin particulier Γ est donnée par

$$S_E(\Gamma) = \int_{t_0}^t ds \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dx(s)}{ds} \right)^2 + V(x(s)) \right) \quad (2.13)$$

Afin d'évaluer les éléments de matrices M_{ij} numériquement par la méthode Monte-Carlo, nous écrivons

$$S_E = S_0 + S_V \equiv \int_{t_0}^t ds \frac{m}{2} \left(\frac{dx(s)}{ds} \right)^2 + \int_{t_0}^t ds V(x(s)) \quad (2.14)$$

pour exprimer M_{ij} par

$$M_{ij}(t-t_0) = M_{ij}^0(t-t_0) \frac{\int_{I_i} dy \int_{I_j} dz \int_{y, t_0}^{z, t} d[x(\cdot)] \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_V(x(\cdot))\right) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_0(x(\cdot))\right)}{\int_{I_i} dy \int_{I_j} dz \int_{y, t_0}^{z, t} d[x(\cdot)] \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_0(x(\cdot))\right)} \quad (2.15)$$

où $O \equiv \exp(-\frac{1}{\hbar}S_V(x(\cdot)))$ est traitée comme une observable physique. alors que le rapport pourrait être traité par la méthode standard Monte-Carlo. Les éléments de matrice $M_{ij}^0(t-t_0)$ correspondent à l'évolution libre qui, si nous prenons la version euclidienne de (1.80), s'écrivent

$$M_{ij}^0(t-t_0) = \int_{I_i} dy \int_{I_j} dz \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar(t-t_0)}} \exp\left(-\frac{m(y-z)^2}{2\hbar(t-t_0)}\right) \quad (2.16)$$

Dans le cadre de Monte-Carlo, la méthode la plus communément utilisée pour générer des distributions ou des configurations quelconques est celle de Metropolis et al [28]. Dans notre cas, les configurations correspondent à des trajectoires. Nous les avons générées, en définissant sur l'ensemble

$$\Gamma(x, t, t_0) = \{x(s), t_0 \leq s \leq t : x(t_0) = y, z = x(t), y \in I_i, z \in I_j, i, j = \dots, N\} \quad (2.17)$$

la mesure de probabilité

$$P[\Gamma] = \frac{\int_{y,t_0}^{z,t} d[x(\cdot)] \exp(-\frac{1}{\hbar}S_0(x(\cdot)))}{\int_{I_i} dy \int_{I_j} dz \int_{y,t_0}^{z,t} d[x(\cdot)] \exp(-\frac{1}{\hbar}S_0(x(\cdot)))} \quad (2.18)$$

Pour que l'axiome de la positivité d'une mesure soit satisfait, nous avons employé la version euclidienne de l'intégrale de chemin.

2.1.3 Résultats numériques

Dans le but d'illustrer l'idée de l'hamiltonien effectif, nous procédons à un test numérique sur des systèmes unidimensionnels. Nous considérons le système libre, l'oscillateur harmonique et un système soumis à un potentiel local de la forme $V(x) = -V_0 \operatorname{sech}^2(x/d)$.

(i) Système libre:

En prenant la limite $\omega \rightarrow 0$ dans (1.120), nous obtenons l'expression de la fonction de partition

$$Z(\beta) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}} I, \quad I = \int_{-\infty}^{\infty} dx \quad (\text{devient infinie}) \quad (2.19)$$

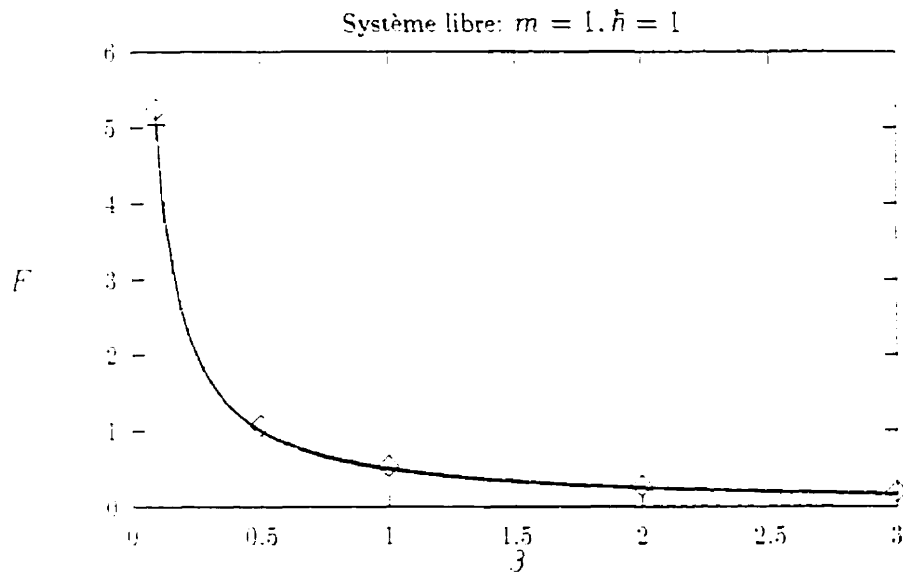


Figure 2.1: **La valeur moyenne de l'énergie interne du système libre.** La ligne solide et les losanges représentent, respectivement, le résultat analytique exact et le résultat des éléments de matrices exacts pour $\Delta x = 0.5$ et $N = 100$. La croix à $\beta = 0.1$ correspond à $\Delta x = 0.2$ et $N = 200$.

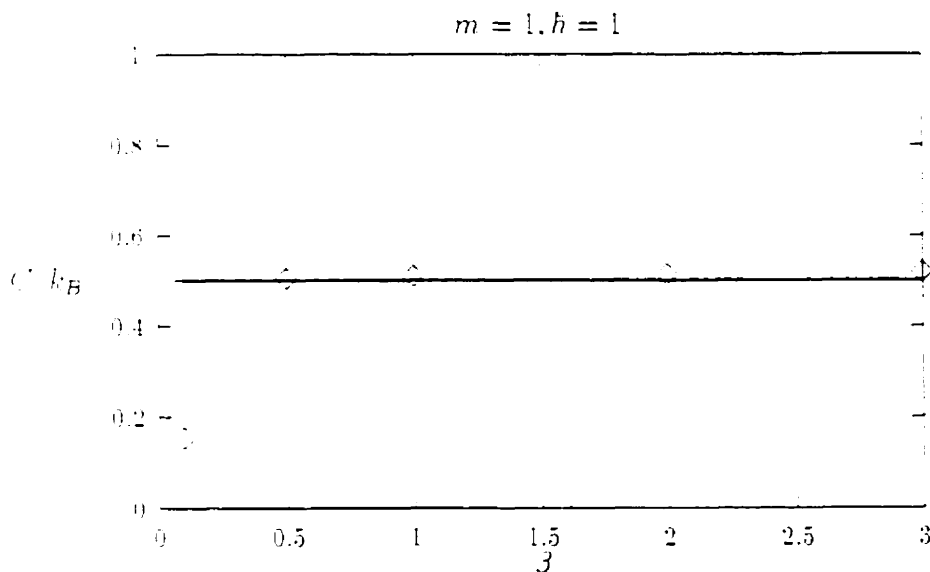


Figure 2.2: **La chaleur spécifique du système libre.** Symboles identiques à [Figure 2.1](#).

n	E_n^{exact}	$E_n^{e.m.}$	$E_n^{m.c.}$
0	0.3000	0.3000	0.3003
1	0.9000	0.9000	0.9008
2	1.5000	1.4999	1.5010
3	2.1000	2.1002	2.1005
4	2.7000	2.6939	2.6959
5	3.3000	3.3114	3.2901
6	3.9000	3.8117	3.8370
7	4.5000	4.6134	4.4348
8	5.1000	4.8246	5.0183
9	5.7000	6.1642	5.8319
10	6.3000	6.2126	6.6694
11	6.9000	8.0575	7.6532
12	7.5000	8.0698	8.8373
13	8.1000	10.3096	9.8537
14	8.7000	10.3134	11.8186
15	9.3000	12.9186	12.4187
16	9.9000	12.9199	15.3431
17	10.5000	15.8818	15.6178
18	11.1000	15.9212	18.6315
19	11.7000	19.2245	-

Tableau 2.1: Le spectre d'énergie de l'oscillateur harmonique. $m = 1$, $\hbar = 1$, $\omega = 0.5$, $\Delta x = 1$, $N = 20$. E_n^{exact} , $E_n^{e.m.}$ et $E_n^{m.c.}$ représentent respectivement le résultat analytique exact, le résultat des éléments de matrices exacts et le résultat de la simulation Monte Carlo.

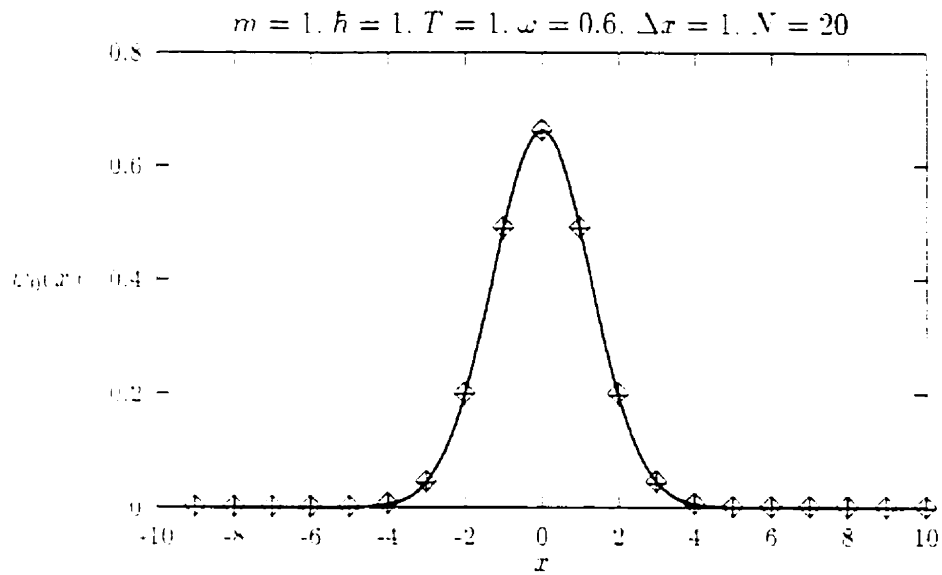


Figure 2.3: **L'état fondamental de l'oscillateur harmonique.** La ligne solide, les losanges et les croix représentent, respectivement, le résultat analytique exact, le résultat des éléments de matrices exacts, et le résultat de la simulation Monte Carlo.

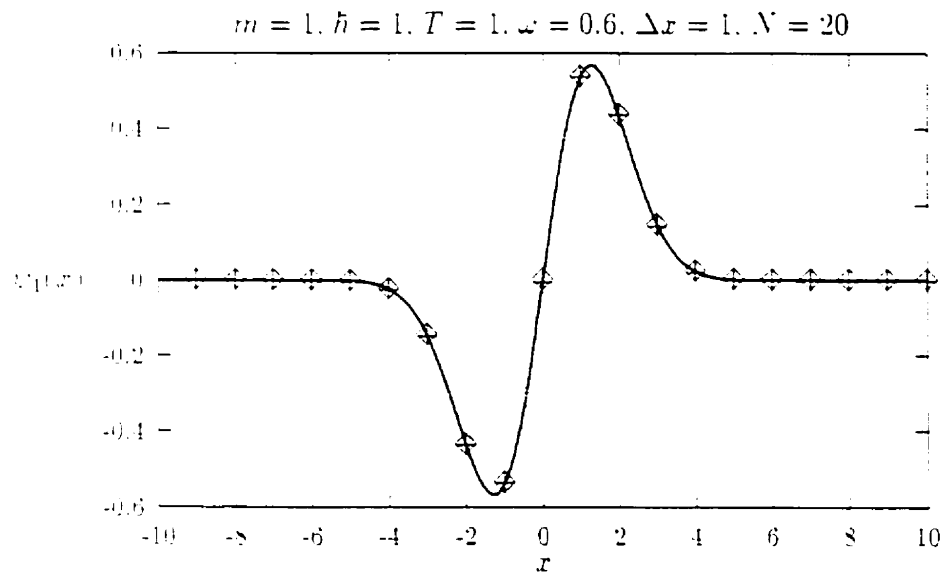


Figure 2.4: **Le premier état excité de l'oscillateur harmonique.** Symboles identiques à ceux de la [Figure 2.3](#).

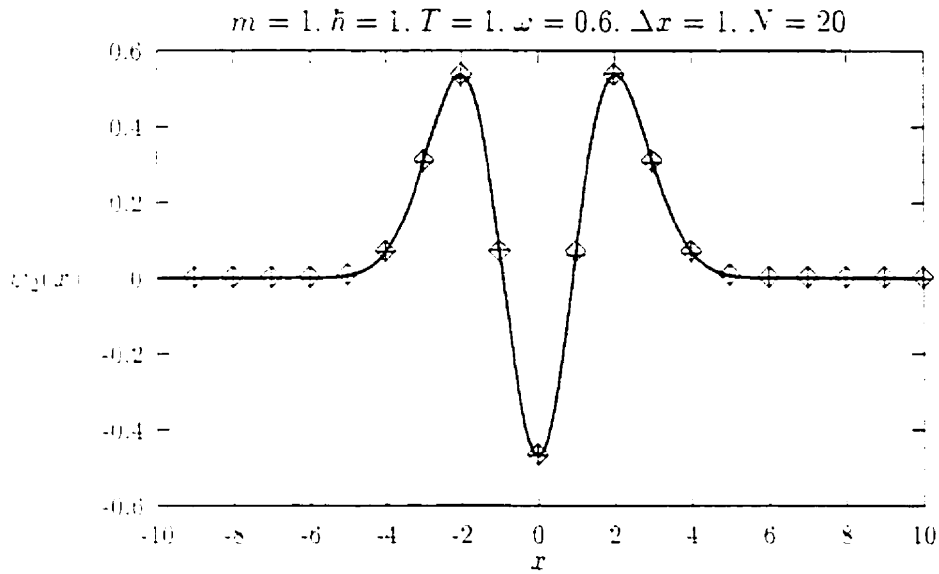


Figure 2.5: Le deuxième état excité de l'oscillateur harmonique. Symboles identiques à ceux de la [Figure 2.3](#).

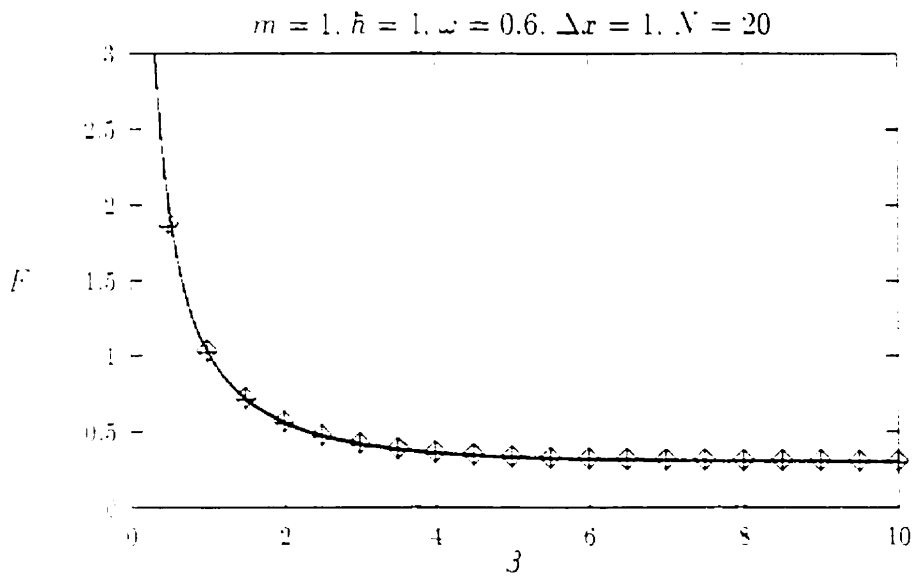


Figure 2.6: La valeur moyenne de l'énergie libre de l'oscillateur harmonique. Symboles identiques à ceux de la [Figure 2.3](#).

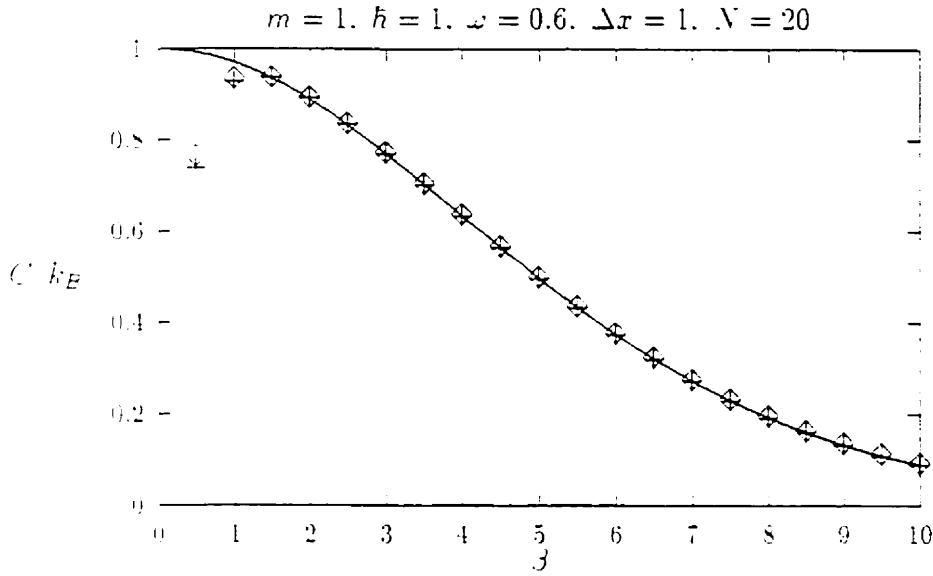


Figure 2.7: **La chaleur spécifique de l'oscillateur harmonique.** Symboles identiques à ceux de la **Figure 2.3**.

	n	E_n^{exact}	$E_n^{m.c.}$
(a)	0	-0.5000	-0.5009
(b)	0	-0.7035	-0.7044
	1	-0.2354	-0.2347
	2	-0.0173	-0.0122

Tableau 2.2: **États liés dans le cas du potentiel donné par l'équation (2.30).** (a) Dans le cas $m = 1.0, \hbar = 1.0, T = 1.0, V_0 = 1.0, d = 1.0, Q = 2, \Delta x = 1.0$ et $N = 10$, il y a un seul état lié $n_{max} < 1$. Ce résultat est confirmé par les données Monte Carlo. (b) Dans le cas $m = 1.0, \hbar = 1.0, T = 1.0, V_0 = 1.0, d = 2.0, Q = 8, \Delta x = 1.0$ et $N = 20$, il y a 3 états liés $n_{max} < 3$. De nouveau, ce résultat est confirmé par les données Monte Carlo.

où nous avons posé $t_0 = 0$ et $t = \beta\hbar$ (voir section (1.3.3) du premier chapitre). La valeur moyenne de l'énergie interne et la chaleur spécifique sont données respectivement par

$$U(\beta) = \frac{1}{Z} \text{Tr}[H e^{-\beta H}] = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} \quad (2.20)$$

$$= \frac{1}{2\beta} = \frac{1}{2} k_B \mathcal{T} \quad (2.21)$$

$$C(\beta) = \frac{\partial U}{\partial \mathcal{T}} = k_B \beta^2 \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2} \quad (2.22)$$

$$= \frac{1}{2} k_B. \quad (2.23)$$

$\beta = (k_B \mathcal{T})^{-1}$, identifiée avec le temps imaginaire par t par $\beta = t/\hbar$, joue le rôle de la température \mathcal{T} . Notons que $U(\beta) \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} 0$, i.e. elle tend vers l'énergie de l'état fondamental du système libre.

La fonction de partition correspondant à l'hamiltonien effectif s'obtient en exprimant la trace dans la base formée par les vecteurs propres de ce dernier.

$$Z_{eff}(\beta) = \text{Tr}[e^{-\beta H_{eff}}] = \sum_{k=1}^N e^{-\beta E_k^{eff}}. \quad (2.24)$$

À partir de (2.20) et (2.22), nous obtenons la valeur moyenne de l'énergie interne U_{eff} et la chaleur spécifique C_{eff} . Dans la **Figure 2.1**, nous comparons l'expression analytique de l'évolution de la valeur moyenne de l'énergie interne avec la température au résultat de l'hamiltonien effectif construit à cette valeur spécifique du temps $t \equiv \mathcal{T} = 1$ (nous prenons $\hbar = k_B = 1$). Nous remarquons que l'accord est meilleur dans la région où $\mathcal{T} \rightarrow 0$, i.e. le domaine d'énergie basse. Le même résultat se manifeste dans le cas de la chaleur spécifique **Figure 2.2**.

ii) Oscillateur harmonique:

L'action de l'oscillateur harmonique est donnée par

$$S_E = \int_{t_0}^t ds \frac{m}{2} \left(\left(\frac{dx(s)}{ds} \right)^2 - \omega^2 x^2(s) \right) \quad (2.25)$$

et on a pour le spectre d'énergie

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.26)$$

La comparaison du spectre de l'hamiltonien effectif avec le spectre exact est donnée au **Tableau. 2.1**. Comme nous pouvons le constater, l'erreur est extrêmement faible dans le domaine bas d'énergie. Un test plus rigoureux est celui des fonctions d'onde. Les trois figures **Figure 2.3**, **Figure 2.4** et **Figure 2.5**, décrivent respectivement une comparaison des trois premiers états quantiques. Nous avons aussi vérifié le comportement de l'hamiltonien effectif à basse énergie en calculant la fonction de partition Z , la valeur moyenne de l'énergie interne et la chaleur spécifique, en fonction de la température.

À la section (1.3.3) du premier chapitre nous avons déterminé l'expression analytique de la fonction de partition (équation (1.122))

$$Z = \frac{1}{2 \sinh(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega)} \quad (2.27)$$

Avec les définitions (2.20) et (2.22), nous avons

$$U(\beta) = \frac{\hbar\omega}{2} \operatorname{ctgh}(\beta\hbar\omega/2) \quad (2.28)$$

$$C(\beta) = k_B \left[\frac{\beta\hbar\omega/2}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)} \right]^2 \quad (2.29)$$

Lorsque $\beta \rightarrow \infty$, la valeur moyenne de l'énergie interne (2.28) tend vers l'énergie de l'état fondamental, $U \rightarrow \hbar\omega/2$. Son graphe et celui de la chaleur spécifique sont illustrés respectivement aux **Figure 2.6** et **Figure 2.7**. Dans ces graphes, nous comparons les expressions analytiques de U et C aux solutions numériques fournies par l'hamiltonien effectif construit au temps $t_2 = \beta_2 = 1$ correspondant à la température \mathcal{T}_2 (nous prenons $\hbar = k_B$). Nous constatons que ce dernier décrit correctement les observables thermodynamiques dans la région $\beta_2 \leq \beta$, i.e le domaine de basse énergie. Par contre, ce n'est pas le cas dans $\beta < \beta_2$, i.e. $T > \mathcal{T}_2$. Ceci est dû au fait que la dimension de l'hamiltonien $N = 20$

est relativement petite. Une concordance pourrait avoir lieu dans cette région, en augmentant N , comme nous pouvons le voir dans le cas de l'évolution libre à la **Figure 2.2** où $N = 200$ et $\beta_2 < 0.1$.

(iii) Autre potentiel local:

Nous avons testé l'hamiltonien effectif dans le cas d'un potentiel local de la forme

$$V(x) = -V_0 \operatorname{sech}^2(x/d) \quad (2.30)$$

Étant donné que $V(x)$ a un minimum $-V_0$ localisé à $x = 0$ et que $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) = 0$, l'hamiltonien possède un spectre continu égal à $[0, \infty[$ et des valeurs propres négatives (états liés à énergie négative) qui s'accumulent au point $\lambda = 0$ [29].

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{\hbar^2}{2md^2} \lambda_n . \\ \lambda_n &= - \left[(n + 1/2) - \sqrt{Q + 1/4} \right]^2 . \\ Q &= \frac{2md^2}{\hbar^2} V_0 . \\ n &= 0, 1, 2, \dots, n_{max} < \sqrt{Q + 1/4} - 1/2. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Les résultats sont résumés au **Tableau. 2.2**.

2.2 Construction de l'hamiltonien effectif à partir d'une base stochastique

2.2.1 Base stochastique de l'espace d'Hilbert

Supposons que nous appliquons l'approche de l'hamiltonien effectif sur un système ayant un énorme nombre de degrés de liberté (problème à N -corps par exemple), en utilisant

une base régulière. Il est évident que la dimension de cette base est extrêmement large. Prenons par exemple le modèle d'Ising qui représente un ensemble de moments magnétiques classiques prenant des valeurs $\sigma = \pm 1$, situés sur un réseau de N sites. Dans ce cas, la dimension de l'espace d'Hilbert est 2^N , exponentiellement grande. Dans une telle situation, nous désirons construire une base ayant une dimension raisonnable pour le calcul numérique et physique, permettant ainsi une représentation d'un hamiltonien effectif décrivant convenablement la dynamique du système en considération et le comportement des observables physiques à basse énergie. Nous proposons de construire une telle base à l'aide d'une approche stochastique [15].

Considérons pour l'instant le cas le plus simple, une particule libre dans un espace à une dimension. Prenons une base régulière ayant une dimension N large ($N \gg 1$). L'idée de l'approche stochastique est de procéder à la sélection d'une base en se laissant guider par l'amplitude de transition.

$$\begin{aligned} \langle x | \exp(-H(t-t_0)/\hbar) | x_0 \rangle &= G_{E_{\text{uci}}}(x, t, x_0, t_0) \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar(t-t_0)}} \exp\left(-\frac{m(x-x_0)^2}{2\hbar(t-t_0)}\right) \end{aligned} \quad (2.32)$$

Suite aux analogies décrites au chapitre 1 entre le formalisme quantique et le mouvement brownien, (2.32) est conçue comme une densité de probabilité. Prenons $x_0 = x(t_0) = 0$ et posons $T = t - t_0$. Nous définissons une densité de probabilité $P(x)$ par

$$\begin{aligned} P(x) &= \frac{1}{Z} G_{E_{\text{uci}}}(x, T; 0, 0), \\ Z &= \int dx G_{E_{\text{uci}}}(x, T; 0, 0). \end{aligned} \quad (2.33)$$

En définissant alors le processus de sélection de la base comme étant un processus aléatoire ou stochastique avec la loi de probabilité $P(x)$, nous pouvons construire un ensemble de configuration $\{x_\nu, \nu \in 1, \dots, N_{\text{eff}} - 1\}$, où $N_{\text{eff}} \ll N$. Dans le cas de l'évolution libre, $P(x)$ est gaussienne

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right), \quad \sigma = \sqrt{\frac{\hbar T}{m}}. \quad (2.34)$$

Autrement dit, la base stochastique $\{x_\nu\}$ est générée ou sélectionnée selon une distribution gaussienne.

Pour justifier que la densité de probabilité (2.34) est physiquement raisonnable, considérons d'abord le cas où T est large. D'une part, la distribution de Boltzmann-Gibbs

$$P_{BG}(E) = \frac{1}{Z} \exp[-E/T/\hbar] \quad (2.35)$$

projetée sur l'état fondamental quand $T \rightarrow \infty$. Dans le cas de l'évolution libre, l'énergie de l'état fondamental est $E = 0$. La distribution $P_{BG}(E)$ a un pic en $E = 0$ (quand $T \rightarrow \infty$). D'autre part, quand $T \rightarrow \infty$, σ donnée par (2.34) est large. La densité $P(x)$, selon laquelle nous générons la base x_ν est une gaussienne étalée. Dans la limite $\sigma \rightarrow \infty$, elle devient une distribution uniforme. Considérons $\tilde{P}(k)$, la transformée de Fourier de $P(x)$. Si $P(x)$ est uniforme $\tilde{P}(k) \propto \delta(k)$. Etant donné que le support de $\delta(k)$ est le singleton $\{0\}$, $P(x)$ ou $\tilde{P}(k)$ donne ainsi l'énergie $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}|_{k=0} = 0$, qui correspond à la valeur exacte de l'énergie de l'état fondamental. Par conséquent, dans le domaine extrême de basse énergie, la distribution $P(x)$ donne un résultat cohérent avec la distribution de Boltzmann-Gibbs. C'est donc une bonne indication que $P(x)$ peut générer un hamiltonien effectif.

Il est instructif de considérer aussi la situation opposée, i.e., quand T est faible. Dans la limite $T \rightarrow 0$, la distribution Boltzmann-Gibbs est approximativement constante. Les différentes valeurs d'énergie ont la même probabilité. Dans cette limite, σ tend vers zéro et $P(x) \propto \delta(x)$. Sa transformée de Fourier est $\tilde{P}(k) = \text{const.}$ i.e. une distribution uniforme. $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ est distribuée selon $1/\sqrt{E}$. Ce n'est pas la même distribution que celle de Boltzmann-Gibbs. Mais un temps T petit signifie que l'énergie E est large. $P(x)$ est donc qualitativement comparable à la distribution de Boltzmann-Gibbs.

Dans le cas d'un potentiel local, la définition de la densité de probabilité $P(x)$ donnée par (2.33) peut se généraliser. Nous pouvons construire une base stochastique, en poursuivant les étapes suivantes:

- (ii) calculer la fonction de Green $G_E(x, t; 0, 0)$ en résolvant l'équation de diffusion (1.31), donnant ainsi $P(x)$.
- (iii) trouver un algorithme permettant de construire une variable aléatoire x_ν distribuée selon $P(x)$.
- (iii) finalement, obtenir une base stochastique en construisant les états caractéristiques à partir de x_ν .

La même tâche peut être réalisée par une méthode plus efficace utilisant l'intégrale de chemin. Si nous appliquons (1.85) à (2.33), nous obtenons

$$P(x) = \frac{\int_{0,0}^{x,T} d[y(\cdot)] \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_E(y(\cdot))\right)}{\int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{0,0}^{x,T} d[y(\cdot)] \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_E(y(\cdot))\right)} \quad (2.36)$$

En utilisant l'algorithme de Monte-Carlo à l'aide de la méthode de Metropolis, nous pouvons générer des chemins représentatifs qui partent en $x = 0$ à $t = 0$ et aboutissent en une position x à $t = T$. Notons ces chemins ou configurations $\Gamma_\nu \equiv x_\nu(t)$. À partir du point d'aboutissement du chemin Γ_ν à $t = T$, que nous notons $x_\nu \equiv x_\nu(T)$, nous pouvons ainsi construire une base stochastique.

2.2.2 Application

Pour tester l'utilité d'une base stochastique, nous avons de nouveau calculé, dans le cas de l'oscillateur harmonique, le spectre d'énergie, la valeur moyenne de l'énergie interne et la chaleur spécifique. Le **Tableau. 2.3** décrit une comparaison du spectre d'énergie exact avec celui de l'hamiltonien Monte-Carlo utilisant une base stochastique. Nous avons ajusté le paramètre σ de façon à ce que la différence entre le résultat exact et Monte-Carlo soit optimale. Les quantités thermodynamiques, la valeur moyenne de l'énergie interne et la chaleur spécifique sont respectivement présentées aux **Figure 2.8** et **Figure 2.9**. Le cas d'un système quantique unidimensionnel montre que les résultats de la base stochastique

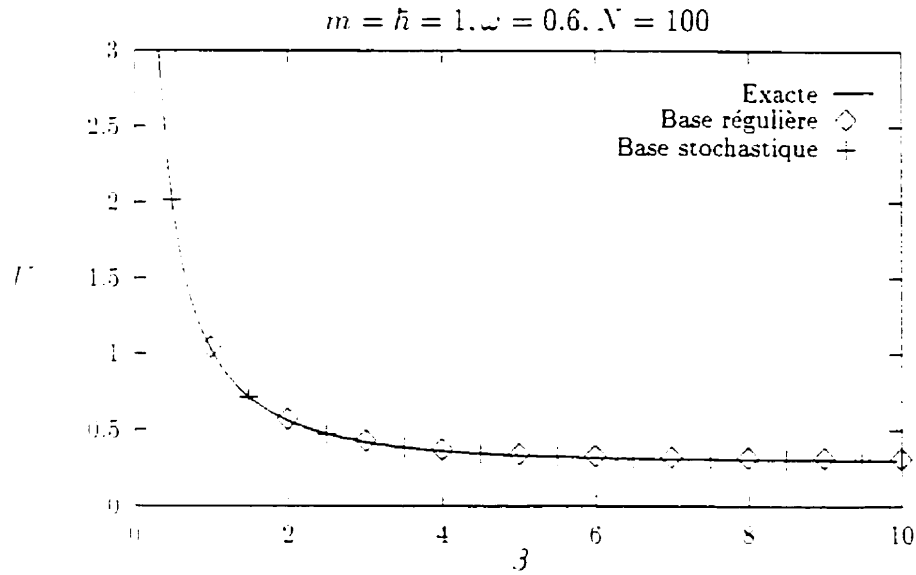


Figure 2.8: **La valeur moyenne de l'énergie libre de l'oscillateur harmonique.** Comparaison entre une base régulière et une base stochastique.

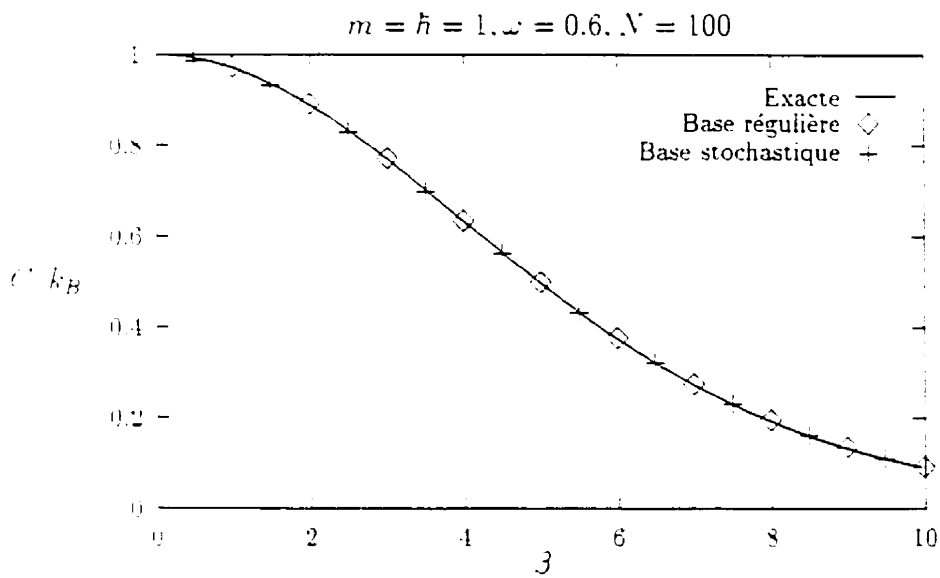


Figure 2.9: **La chaleur spécifique de l'oscillateur harmonique.** Comparaison entre une base régulière et une base stochastique.

n	E_n^{exact}	$E_n^{stochastic}$
0	0.300000	0.301207
1	0.900000	0.898397
2	1.500000	1.504516
3	2.100000	2.092163
4	2.700000	2.704961
5	3.300000	3.306386
6	3.900000	3.903148
7	4.500000	4.515616
8	5.100000	5.092035
9	5.700000	5.667032
10	6.300000	6.285092
11	6.900000	6.922355
12	7.500000	7.514225
13	8.100000	8.148809
14	8.700000	8.675366
15	9.300000	9.264365
16	9.900000	9.971005
17	10.500000	10.563820
18	11.100000	11.102140
19	11.700000	11.755620

Tableau 2.3: **Le spectre d'énergie de l'oscillateur harmonique.** $m = 1$, $\hbar = 1$, $\omega = 0.6$.

E_n^{exact} est le résultat analytique exact alors que $E_n^{stochastic}$ est calculée à partir des éléments de matrice exacts, utilisant une base stochastique avec $T = 1$, $N = 100$ et $\sigma = 6$.

sont similaires à ceux de la base régulière. Terminons en ajoutant que l'utilisation d'une base stochastique est plus avantageuse dans le cas des systèmes qui évoluent dans un espace à plusieurs dimensions ou dans le cas d'un problème à N -corps. Dans ces deux cas, le nombre de degrés de liberté est faramineux mais, avec une base stochastique, une étude numérique devient réalisable.

2.3 Conclusion

Nous avons proposé de construire un hamiltonien effectif décrivant la physique de basse énergie à partir d'une action donnée via la méthode Monte-Carlo. Nous avons montré que la méthode fonctionne pour plusieurs systèmes en mécanique quantique en calculant le spectre d'énergie, les fonctions d'ondes et les observables thermodynamiques. L'application de la méthode à la théorie des champs et à des problèmes à N -corps est présentement sous investigation. À notre avis, un hamiltonien effectif décrivant les phénomènes physiques de basse énergie pourrait être utile en matière condensée, en physique atomique, en physique nucléaire et en physique des particules à hautes énergies.

Chapitre 3

Renormalisation en mécanique quantique

Je pense qu'il vaut mieux dire tout de suite que personne ne comprend la mécanique quantique . . . Si vous le pouvez, évitez de vous dire: "Mais comment peut-il en être ainsi ?". sinon vous serez submergés, noyés et entraînés vers un gouffre dont personne encore n'a réussi à s'échapper. Personne ne sait comment il peut en être ainsi.

RICHARD FEYNMAN

Au chapitre 1, nous avons donné une présentation générale de l'intégrale fonctionnelle. L'accent a été particulièrement mis sur ses applications en mécanique quantique. À la section 1.3.2, nous avons présenté une méthode approximative (la méthode de la phase stationnaire) qui nous a permis d'évaluer l'intégrale de chemin. Dans le cas de certains potentiels, cette approximation est exacte. Dans ce chapitre, nous allons généraliser ce dernier résultat en introduisant le concept de renormalisation en mécanique quantique [16, 17, 18].

3.1 Le propagateur quantique dans l'approximation semi-classique

Ce qui a été appliqué dans le chapitre 1 à un système à un degré de liberté sera repris pour un système à n degrés de liberté. Considérons alors un système général, décrit par n coordonnées généralisées q^α ($\alpha = 1, \dots, n$) et les moments conjugués p^α qui leur correspondent. Le mouvement du système est contrôlé par la fonction d'Hamilton classique qui dépend de ces variables et, en général, du temps t ; nous l'écrivons comme $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$, où \mathbf{q} et \mathbf{p} sont des vecteurs colonnes de N composantes. En mécanique classique, le système évolue de la configuration \mathbf{q}_A au temps t_A à \mathbf{q}_B au temps t_B en passant par une séquence de configurations intermédiaires $\mathbf{q}(t)$ bien définies qui constituent le(s) chemin(s) classique(s) de A à B , obtenu(s) en solutionnant les équations du mouvement.

D'après Feynman, l'évolution en mécanique quantique implique non seulement le(s) chemin(s) classique(s) mais tous les chemins concevables entre A et B . Pour le voir, commençons par l'hamiltonien

$$\hat{H} \equiv H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) \quad (3.1)$$

où le symbole $\hat{}$ signifie un opérateur agissant sur l'espace d'Hilbert. Nous considérons les opérateurs $\hat{\mathbf{q}}^{\alpha}$, $\hat{\mathbf{p}}^{\alpha}$ indépendants du temps. L'opérateur d'évolution $\hat{U}(t_A, t_B)$ est défini par

$$\left. \begin{aligned} H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) \hat{U}(t_A, t_B) &= i\hbar(\partial \hat{U}(t_A, t_B) / \partial t_B) \\ \hat{U}(t_A, t_A) &= \hat{1} \end{aligned} \right\} \quad (3.2)$$

\hat{U} est unitaire si \hat{H} est hermitique. L'opérateur \hat{U} transforme les états au temps t_A en d'autres états au temps t_B . En particulier, si le système est dans la configuration \mathbf{q}_A au temps t_A représentée dans la notation de Dirac par le vecteur ket $|\mathbf{q}_A\rangle$, alors la probabilité qu'il soit dans une configuration entre $|\mathbf{q}_B\rangle$ et $|\mathbf{q}_B + d\mathbf{q}_B\rangle$ au temps t_B est

$$\begin{aligned} P(\mathbf{q}_B, t_B; \mathbf{q}_A, t_A) &= \left| \langle \mathbf{q}_B | \hat{U}(t_A, t_B) | \mathbf{q}_A \rangle \right|^2 d\mathbf{q}_B \\ &= |G(\hat{\mathbf{q}}_B, t_B; \hat{\mathbf{q}}_A, t_A)|^2 d\mathbf{q}_B \end{aligned}$$

$$= |K(B, A)|^2 d\mathbf{q}_B \quad (3.3)$$

où dans la troisième équation nous avons introduit la notation $K(B, A)$ (la fonction de Green ou le propagateur) égale aux éléments de matrices

$$\langle \mathbf{q}_B | \hat{U}(t_A, t_B) | \mathbf{q}_A \rangle \quad (3.4)$$

La formulation de l'intégrale de chemin dépend de la propriété de décomposition de l'opérateur \hat{U} :

$$\hat{U}(t_A, t_B) = \hat{U}(t_A, t) \hat{U}(t, t_B) \quad (3.5)$$

où t est un temps arbitraire entre t_A et t_B . En appliquant cette relation à tous les temps intermédiaires t_i , $i = 1, \dots, N$ (l'intervalle $[t_A, t_B]$ est divisée en $N - 1$ sous-intervalles avec $t_A \equiv t_0$ et $t_B \equiv t_{N+1}$), nous pouvons exprimer l'opérateur d'évolution de t_A à t_B par une succession de transformations unitaires impliquant des temps plus courts

$$\hat{U}(t_A, t_B) = \prod_{i=0}^N \hat{U}(t_{i+1}, t_i) \quad (3.6)$$

La représentation de cette équation dans l'espace de configuration s'obtient à l'aide de la relation de fermeture

$$\int d\mathbf{q}_i | \mathbf{q}_i \rangle \langle \mathbf{q}_i | = \hat{1} \quad (3.7)$$

où les $d\mathbf{q}_i$ sont les coordonnées de l'élément de volume de dimension n à tous les temps intermédiaires t_1 à t_N . Si nous prenons la limite du continu $N \rightarrow \infty$, nous obtenons l'amplitude de transition entre t_A et t_B . L'équation qui en résulte est:

$$K(B, A) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int d\mathbf{q}_1 \dots \int d\mathbf{q}_N \prod_{i=0}^N K(i+1, i) \quad (3.8)$$

L'intégrant dans (3.8) dépend de l'ensemble des valeurs \mathbf{q}_i à chaque instant t_i et représente un chemin possible entre (\mathbf{q}_A, t_A) et (\mathbf{q}_B, t_B) . L'expression (3.8) du propagateur quantique est une intégrale sur tous les chemins d'extrémités fixes.

Pour que l'expression (3.8) soit plus utile, il est nécessaire d'évaluer la fonction de Green pour un temps infinitésimal impliquée dans chaque facteur de K . En d'autres mots

nous avons besoin de l'expression explicite de $\hat{U}(t_A + \epsilon, t_A)$ quand ϵ est très petit. Quand ϵ est petit, la solution de (3.2) peut être écrite sous une forme préservant la propriété essentielle d'unitarité de \hat{U} :

$$\hat{U}(t_A + \epsilon, t_A) = \langle \mathbf{q}_B | \exp\{-i\epsilon/\hbar H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t_A)\} | \mathbf{q}_A \rangle, \quad \epsilon \rightarrow 0 \quad (3.9)$$

Considérons un hamiltonien quadratique en \mathbf{p} avec un potentiel indépendant de la vitesse

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=1}^n \frac{(\hat{\mathbf{p}}^\alpha)^2}{2m_\alpha} - V(\hat{\mathbf{q}}, t) \quad (3.10)$$

Cet hamiltonien est général: il décrit $n/3$ particules de masses différentes interagissant entre elles et avec un potentiel extérieur. La non-commutativité des expressions contenant $\hat{\mathbf{p}}^\alpha$ et $\hat{\mathbf{q}}^\alpha$ donne des termes d'ordre ϵ^2 dans le développement de l'opérateur exponentiel (3.9). Nous pouvons écrire alors

$$\begin{aligned} & \langle \mathbf{q}_B | \hat{U}(t_A + \epsilon, t_A) | \mathbf{q}_A \rangle \\ &= \langle \mathbf{q}_B | \exp\{-i\epsilon/\hbar \sum_{\alpha} (\hat{\mathbf{p}}^\alpha)^2 / 2m_\alpha\} \exp\{-iV(\hat{\mathbf{q}}, t)\epsilon/\hbar\} | \mathbf{q}_A \rangle \\ &= \frac{\prod_{\alpha=1}^n m_\alpha^{1/2}}{(2\pi i\hbar\epsilon)^{n/2}} \exp \left[\frac{i\epsilon}{\hbar} \left\{ \sum_{\alpha=1}^n \frac{m_\alpha}{2} \left(\frac{\mathbf{q}_A^\alpha - \mathbf{q}_B^\alpha}{\epsilon} \right)^2 - V(\mathbf{q}_A, t_A) \right\} \right] \end{aligned} \quad (3.11)$$

Si \mathbf{q}_A n'est pas au voisinage de \mathbf{q}_B ou plus exactement si la condition

$$|\mathbf{q}_A - \mathbf{q}_B| < O \left(\left(\frac{\epsilon\hbar}{m_\alpha} \right)^{1/2} \right) \quad \forall \alpha \quad (3.12)$$

est violée, (3.11) est une fonction des points \mathbf{q}_A et \mathbf{q}_B qui oscille rapidement et par suite sa valeur moyenne est nulle. L'argument du potentiel V dans (3.11) est \mathbf{q}_A ou \mathbf{q}_B ou des valeurs intermédiaires.

La phase et l'amplitude du résultat (3.11) peuvent être exprimées en fonction de quantités caractérisant le chemin classique partant de \mathbf{q}_A et aboutissant à \mathbf{q}_B . À l'ordre ϵ , nous avons

$$\epsilon \left(\sum_{\alpha=1}^n \frac{m_\alpha}{2} \left(\frac{\mathbf{q}_A^\alpha - \mathbf{q}_B^\alpha}{\epsilon} \right)^2 - V(\mathbf{q}_A, t_A) \right) = \epsilon L(\mathbf{q}_A, \dot{\mathbf{q}}_A, t_A)$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{t_A}^{t_B} dt L(\mathbf{q}_A, \dot{\mathbf{q}}_A, t_A) \\
&\equiv S_{AB}(\mathbf{q}_A, t_A; \mathbf{q}_B, t_B) \quad (3.13)
\end{aligned}$$

où S_{AB} est l'action classique. À l'aide de la définition (3.13) de l'action, nous pouvons exprimer l'amplitude de transition (3.11) en fonction de la dérivée d'ordre deux de l'action par rapport aux points \mathbf{q}_A et \mathbf{q}_B . La relation est

$$\frac{\prod_{\alpha=1}^n m_{\alpha}^{1/2}}{\epsilon^{n/2}} = \left[(-1)^n \det_{\alpha\beta} \left(\frac{\partial^2 S(\mathbf{q}_A, t_A; \mathbf{q}_B, t_B)}{\partial \mathbf{q}_A^{\alpha} \partial \mathbf{q}_B^{\beta}} \right) \right]^{1/2} \quad (3.14)$$

où $t_B = t_A + \epsilon$. Le propagateur infinitésimal (3.9) est alors donné par

$$\langle \mathbf{q}_B | \hat{U}(t_A + \epsilon, t_A) | \mathbf{q}_A \rangle = \left[\frac{(-1)^n D_{AB}}{(2\pi i \hbar)^n} \right]^{1/2} \exp(i S_{AB}/\hbar), \quad \epsilon \rightarrow 0 \quad (3.15)$$

En se basant sur l'unitarité de l'opérateur \hat{U} , Morette a démontré que (3.15) est une formule générale correcte à l'ordre ϵ quel que soit le potentiel V [32]. Choquard donne une discussion détaillée de la forme du membre de droite de (3.15) quand $\epsilon \rightarrow 0$ [33]. Il démontre que s'il y a plus d'un chemin classique partant de (\mathbf{q}_A, t_A) à $(\mathbf{q}_B, t_A + \epsilon)$, alors uniquement le chemin direct intervient dans (3.15).

Avec (3.8) et (3.15), le propagateur à temps fini $K(B, A)$ s'écrit

$$\begin{aligned}
K(B, A) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi i \hbar)^{n(N+1)/2}} \int d\mathbf{q}_1 \dots \int d\mathbf{q}_N \left\{ \prod_{i=0}^N [(-1)^n D_{i,i+1}]^{1/2} \right\} \\
&\quad \times \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{i=0}^N S_{i,i+1} \right) \quad (3.16)
\end{aligned}$$

où

$$K(B, A) = \int d[\mathbf{q} | \mathbf{t}] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_A}^{t_B} L(\mathbf{q}_A, \dot{\mathbf{q}}_A, t_A) \right\} \quad (3.17)$$

L'intégrale fonctionnelle permet de traiter l'aspect semi-classique de la mécanique quantique. Dans ce qui suit, nous allons discuter de l'extrême limite classique. En fait, le propagateur quantique $K(A, B)$ n'a pas de signification physique. Nous devons considérer à la place la densité de probabilité $P(\mathbf{q}_B, t_B; \mathbf{q}_A, t_A) d\mathbf{q}_B$ définie par (3.3).

Pour trouver les conditions aux limites que nous devons appliquer dans le problème classique, nous constatons que \mathbf{q}_A dans l'état quantique initial est parfaitement défini. La distribution dans l'espace des impulsions est alors uniforme, la probabilité que l'impulsion soit dans le domaine $d\mathbf{p}_A$ est

$$\langle \mathbf{p}_A | \mathbf{q}_A \rangle^2 d\mathbf{p}_A = \left| \frac{\exp(i\mathbf{p}_A \mathbf{q}_A / \hbar)}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \right|^2 d\mathbf{p}_A = \frac{d\mathbf{p}_A}{(2\pi\hbar)^n} \quad (3.18)$$

Dans le problème classique, des copies du système émergent à partir de (\mathbf{q}_A, t_A) avec une impulsion \mathbf{p}_A distribuée uniformément selon la loi (3.18) [38]. En se déplaçant le long des trajectoires classiques, quelques copies atteignent au temps t_B le voisinage $d\mathbf{q}_B$ du point final \mathbf{q}_B . Dans le cas général, le point \mathbf{q}_B peut être atteint par différentes routes que nous distinguons par l'indice r . Le chemin de type r aboutissant à $d\mathbf{q}_B$ au temps t_B part de \mathbf{q}_A au temps t_A avec une impulsion appartenant à un domaine que nous notons $d\mathbf{p}_{Ar}$.

Le nombre total de systèmes arrivant à $d\mathbf{q}_B$ au temps t_B est selon (3.18)

$$P^{\text{classique}}(\mathbf{q}_B, t_B; \mathbf{q}_A, t_A) d\mathbf{q}_B = \sum_r \frac{d\mathbf{p}_{Ar}}{(2\pi\hbar)^n} \quad (3.19)$$

de sorte que la solution classique de notre problème est

$$\begin{aligned} P^{\text{classique}}(\mathbf{q}_B, t_B; \mathbf{q}_A, t_A) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \sum_r \frac{d\mathbf{p}_{Ar}}{d\mathbf{q}_B} \\ &\equiv \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \sum_r \left| \frac{\partial p_{Ar}^\alpha(\mathbf{q}_A, t_A; \mathbf{q}_B, t_B)}{\partial q_B^\beta} \right| \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \sum_r \left| \det_{\alpha\beta} \left(\frac{\partial p_{Ar}^\alpha(\mathbf{q}_A, t_A; \mathbf{q}_B, t_B)}{\partial q_B^\beta} \right) \right| \quad (3.21)$$

où nous avons introduit dans le troisième membre le jacobien de la transformation de \mathbf{p}_A à \mathbf{q}_B . S'il n'y a pas de chemins classiques entre (\mathbf{q}_A, t_A) et (\mathbf{q}_B, t_B) , P est alors zéro.

Si l'action classique $S(\mathbf{q}_A, t_A; \mathbf{q}_B, t_B)$ est connue, nous avons

$$p_{Ar}^\alpha = - \frac{\partial S}{\partial q_A^\alpha} \quad (3.22)$$

Le déterminant dans (3.21) devient

$$\det_{\alpha\beta} \left(-\frac{\partial^2 S_r(\mathbf{q}_A, t_A; \mathbf{q}_B, t_B)}{\partial q_B^\beta \partial q_A^\alpha} \right) \equiv D_{AB,r} \quad (3.23)$$

Nous avons finalement

$$p^{classique}(\mathbf{q}_B, t_B; \mathbf{q}_A, t_A) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \sum_r |D_{AB,r}| \quad (3.24)$$

La différence entre cette formule purement classique et le carré de la formule quantique (3.15) du propagateur considéré à un temps infinitésimal est que, pour un temps fini $t_B - t_A$, il y a plusieurs chemins classiques qui contribuent à l'amplitude de transition quantique. La raison fondamentale de l'apparition du déterminant dans (3.19) ou (3.24) dans la limite classique du problème quantique est le principe d'incertitude d'Heisenberg qui impose une ignorance totale du moment conjugué associé à la variable position.

La famille entière des chemins classiques impliquant toutes les valeurs possibles des variables conjuguées devrait être considérée. La propriété de transformation de cette famille apparaît dans la forme du déterminant D_{AB} qui représente la densité de chemins de cette famille au point B . Dans le présent problème, \mathbf{q}_A est connu avec une précision arbitraire. Il faut alors considérer la famille de chemins partant de \mathbf{q}_A avec tous les \mathbf{p}_A possibles.

Pour dériver la formule classique (3.24) et l'expression semi-classique qui lui est reliée, il faut montrer que seulement les chemins classiques contribuent d'une manière significative dans l'intégrale de Feynman (3.16) ou (3.17). En effet, l'intégrand dans (3.17) est généralement une fonctionnelle du chemin "fictif" $\mathbf{q}(t)$ qui oscille rapidement. Dans la situation semi-classique où l'action d'un chemin partant de (\mathbf{q}_A, t_A) à (\mathbf{q}_B, t_B) est large (mesurée en unité de \hbar), la contribution du chemin $\mathbf{q}(t)$ à $K(B, A)$ est éliminée par un chemin voisin $\mathbf{q}(t) + \delta\mathbf{q}(t)$.

En appliquant l'approximation de la phase stationnaire, Morette [32] et Gutzwiller [42] ont évalué la contribution d'un chemin classique particulier $\mathbf{q}_c^*(t)$ à l'intégrale fon-

tionnelle. Cette approximation consiste à développer l'exponentielle fonctionnelle figurant dans (3.16) autour du chemin classique jusqu'au deuxième ordre en $\delta\mathbf{q}(t)$ et à évaluer l'intégrale gaussienne de $N \times n$ dimensions. Le résultat dépend du déterminant

$$\Delta = \det_{i,\alpha,j,\beta} \left(\frac{\partial^2 \left(\sum_{k=0}^N S_{k,k+1} \right)}{\partial q_i^\alpha \partial q_j^\beta} \right) \quad (3.25)$$

pour $i, j = 1, \dots, N$ et $\alpha, \beta = 1, \dots, n$. L'évaluation de Δ est possible uniquement dans des cas spéciaux: particule libre en n dimensions, oscillateur harmonique, particule en présence d'un potentiel unidimensionnel et particule en présence d'un potentiel à symétrie sphérique.

Néanmoins, il est possible d'utiliser une approche différente consistant à effectuer les intégrations sur $d\mathbf{q}_1, \dots, d\mathbf{q}_N$ dans (3.17) successivement en appliquant l'approximation de la phase stationnaire à chaque stade. Si nous intégrons sur \mathbf{q}_1 dans (3.17) en gardant $\mathbf{q}_0, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_{N+1}$ fixes, nous obtenons

$$K(B, A) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi i \hbar)^{Nn/2}} \int d\mathbf{q}_2 \dots \int d\mathbf{q}_N [(-1)^n D_{02}]^{1/2} \times \left\{ \prod_{i=2}^N [(-1)^n D_{i,i+1}]^{1/2} \right\} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left(S_{02} + \sum_{i=2}^N S_{i,i+1} \right) \right\} \quad (3.26)$$

Il est clair qu'il est possible d'évaluer les $N-1$ intégrations qui restent en itérant ce processus. En notant de nouveau les différents chemins classiques par l'indice r , l'expression finale de la fonction de Green est

$$K^{\text{semi-classique}}(B, A) = \frac{1}{(2\pi i \hbar)^{n/2}} \sum_r [D_{AB,r}]^{1/2} \exp(iS_{AB,r}/\hbar) \quad (3.27)$$

Cette formule semi-classique du propagateur, appelée formule de Van Vleck, peut être dérivée en appliquant l'approximation WKB à l'équation de Schrödinger [7, 34]. Dans cette approche, le facteur de normalisation ou l'amplitude $D_{AB,r}$ exprimée sous forme d'un déterminant (3.23) est donnée par une solution d'une équation de continuité classique. Cette solution a été déterminée explicitement par Choquard [33] et Van Vleck [35].

3.2 Conjecture

La formule de Van Vleck (3.27) peut s'écrire sous la forme équivalente suivante:

$$G(\hat{\mathbf{q}}_B, t_B; \hat{\mathbf{q}}_A, t_A) = \sum_{q_{cl}} \mathcal{N} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(q_{cl}(\cdot))\Big|_{\mathbf{q}_A, t_A}^{\mathbf{q}_B, t_B}\right) \quad (3.28)$$

avec $S(q_{cl}(\cdot))$ l'action classique évaluée le long du chemin classique qui débute en \mathbf{q}_A au temps t_A et aboutit en \mathbf{q}_B au temps t_B . \mathcal{N} est un facteur de normalisation dépendant du temps mais indépendant de la position.

D'après [5, 40], si on se donne une paire de conditions aux limites ($\mathbf{q}(t_A) = \mathbf{q}_A$, $\mathbf{q}(t_B) = \mathbf{q}_B$), une infinité de chemins classiques, correspondant aux différentes valeurs de l'action, interviennent dans (3.28).

Quand l'hamiltonien est quadratique en \mathbf{p}^2 et \mathbf{q}^2 , l'équation (3.28) est exacte, c'est-à-dire que la somme parcourt un seul chemin classique extremum de l'action. Dans le cas de l'oscillateur harmonique, nous avons d'après (1.114),

$$\begin{aligned} S(q_{class}(\cdot))\Big|_{\mathbf{q}_A, t_A}^{\mathbf{q}_B, t_B} &= \frac{m\omega}{2\sin(\omega(t_B - t_A))} [(\mathbf{q}_A^2 + \mathbf{q}_B^2) \cos(\omega(t_B - t_A)) - 2\mathbf{q}_A \mathbf{q}_B] \\ \mathcal{N} &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega(t_B - t_A))}} \end{aligned} \quad (3.29)$$

L'évolution libre dans une variété correspondant au groupe de Lie $SU(2)$ est un autre exemple où la somme sur tous les chemins classiques est exacte [39].

Clutton-Bock a déclaré que (3.28) est exacte dans tous les cas [36]. Un simple contre-exemple est donné par Nelson [41].

3.2.1 Énoncé de la conjecture

Nous allons explorer l'extension de la validité de (3.28) lorsque la somme parcourt un seul chemin classique dans le cas d'une classe large de systèmes quantiques, si nous admettons que l'action classique est remplacée par une action renormalisée. L'inspiration vient

de la renormalisation des théories des champs quantiques. L'apparition de divergences dans certains termes de l'expansion perturbative (diagramme de Feynman en boucle) nécessite une généralisation de la théorie des perturbations faisant usage de contre-termes. Dans cette généralisation, on se donne une prescription permettant d'évaluer les infinis de manière non ambiguë: c'est la régularisation. Les contre-termes sont ensuite utilisés pour renormaliser la théorie, de manière à obtenir par une procédure de limite mathématique une expansion perturbative des grandeurs physiques qui soit finie et bien définie à chaque ordre. La théorie est qualifiée de renormalisable, si à chaque ordre perturbatif fixé, le nombre de fonctions de Green divergentes est fini. Par la suite, un nombre fini de contre-termes sera en principe nécessaire pour les rendre finies. Dans le procédé de renormalisation, on distingue les quantités renormalisées des quantités nues par ce qu'on appelle les corrections quantiques. On introduit par exemple l'action renormalisée (action quantique) exprimée en fonction des paramètres renormalisés et l'action nue exprimée en fonction des paramètres nus. Mis à part la différence qu'il y a entre les paramètres renormalisés et les paramètres nus, l'action ainsi que les fonctions de Green ont la même structure dans leur forme renormalisée ou forme nue. La mécanique quantique est conçue comme une théorie des champs quantiques en $0+1$ dimension. Dans ce cas, l'espace-temps consiste en (un point) \otimes (temps). Le champ $\Phi(t)$ défini sur cet espace-temps de $0-1$ dimension est équivalent à la position de la particule quantique.

Par analogie avec la théorie des champs quantiques, nous suggérons qu'il existe une action renormalisée décrivant l'amplitude de transition (fonction de Green) ayant la même structure que l'action classique mais exprimée en fonction de paramètres différents. Ceci nous amène à formuler en mécanique quantique [16, 18], la conjecture suivante:

pour une action classique donnée

$$S = \int_{t_A}^{t_B} ds \left(\sum_{\alpha=1}^n \frac{m_{\alpha}}{2} \left(\frac{d\mathbf{q}^{\alpha}(s)}{ds} \right)^2 - V(\mathbf{q}(s)) \right) \quad (3.30)$$

il existe une action renormalisée

$$\tilde{S} = \int_{t_A}^{t_B} ds \left(\sum_{\alpha=1}^n \frac{\tilde{m}_\alpha}{2} \left(\frac{dq^\alpha(s)}{ds} \right)^2 - \tilde{V}(\mathbf{q}(s)) \right) \quad (3.31)$$

permettant d'exprimer l'amplitude de transition par

$$G(\hat{\mathbf{q}}_B, t_B; \hat{\mathbf{q}}_A, t_A) = \tilde{\mathcal{N}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \tilde{S}(\tilde{\mathbf{q}}_{cl}(\cdot)) \Big|_{\mathbf{q}_A, t_A}^{\mathbf{q}_B, t_B} \right) \quad (3.32)$$

Dans (3.32), $\tilde{\mathbf{q}}_{cl}$ signifie qu'il s'agit d'un chemin classique correspondant à un extremum de l'action $\tilde{S}(\tilde{\mathbf{q}}_{cl})$. $\tilde{\mathcal{N}}$ est le facteur de normalisation correspondant à \tilde{S} . Comme l'équation (3.28), (3.32) est valide avec la même action \tilde{S} pour l'ensemble des conditions aux limites $\mathbf{q}_A = \mathbf{q}(t_A)$, $\mathbf{q}_B = \mathbf{q}(t_B)$. Les paramètres de l'action renormalisée dépendent du temps $T = t_B - t_A$ mais ils convergent vers une limite non-triviale quand $T \rightarrow \infty$. Chaque dépendance en \mathbf{q}_A et \mathbf{q}_B entre via la trajectoire classique $\tilde{\mathbf{q}}_{cl}$. Les intérêts physiques d'un tel résultat retenant ainsi notre attention sont:

- (i) Supposons que nous avons construit l'action renormalisée \tilde{S} . Par conséquent, l'intégrale de chemin serait complètement déterminée.
- (ii) \tilde{S} définit une action renormalisée en mécanique quantique. À partir de \tilde{S} , nous pouvons alors extraire la masse renormalisée et les paramètres du potentiel renormalisés.
- (iii) L'équation (3.32) est une simple relation entre l'amplitude de transition et l'action \tilde{S} qui a la même forme mathématique que l'action classique. Dans le domaine du chaos quantique, on utilise la formule de trace de Gutzwiller [43], qui, dans le but de comprendre le chaos quantique dans un régime semi-classique, offre une relation entre l'amplitude de transition quantique et les orbites classiques. L'équation (3.32) est plus simple que la formule de trace de Gutzwiller. Elle nous permettra de définir le chaos quantique d'une manière non ambiguë.

- (iv) L'équation (3.32) nous permettra de traiter le problème d'instants en mécanique quantique.
- (v) L'équation (3.32) pourrait être appliquée à l'expérience des deux trous de Young, ouvrant ainsi la voie à une nouvelle interprétation des phénomènes quantiques.

3.3 Formalisme effectif

Dans cette section, nous allons décrire la notion de l'action effective traditionnellement utilisée en théories des champs quantiques. Ce formalisme a été inventé par Weinberg et Coleman [44].

3.3.1 Action effective en mécanique quantique

Pour définir l'action effective, considérons l'hamiltonien décrivant l'évolution d'une particule ayant, pour plus de simplicité, un seul degré de liberté.

$$H(\hat{p}, \hat{q}) = \hat{H}_0(\hat{p}, \hat{q}) + \hat{U}(\hat{q}) \quad (3.33)$$

où

$$H_0(\hat{p}, \hat{q}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2 \quad (3.34)$$

et le potentiel $\hat{U}(\hat{q})$ est un polynôme paire de \hat{q} . La fonctionnelle génératrice des fonctions de Green est

$$Z[J] = \langle 0 | \mathcal{T} (e^{\frac{i}{\hbar} \int dt J(t) \hat{q}(t)}) | 0 \rangle \quad (3.35)$$

où $|0\rangle$ est l'état fondamental de \hat{H} , $\hat{q}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{q} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$, $J(t)$ est une source s'annulant à l'infini, et \mathcal{T} est le produit chronologique. Dans (3.35), l'intégration se situe entre $-\infty$ et $+\infty$. La fonctionnelle génératrice des fonctions de Green connexes est définie par $W[J] = -i\hbar \ln Z[J]$ et la transformée de Legendre de $W[J]$ donne $\Gamma[q]$ qui génère les

fonctions de Green une particule-irréductibles [45]. $\Gamma[q]$ s'appelle aussi l'action effective. En indiquant que q est la variable conjuguée associée à J , i.e.,

$$q(t) = \frac{\delta W[J]}{\delta J(t)} \quad (3.36)$$

nous définissons

$$\Gamma[q] = W[J] - \int dt q(t) J(t) \Big|_{q(t) = \frac{\delta W[J]}{\delta J(t)}} \quad (3.37)$$

où J devrait être considérée comme une fonctionnelle de q en inversant la relation (3.36). La fonctionnelle $\Gamma[q]$ représente l'analogie de l'action classique.

$$S[q] = \int dt \left(\frac{1}{2} m \dot{q}^2(t) - V(q(t)) \right) \quad (3.38)$$

où $V(q) = \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 + U(q)$, et peut être écrite sous la forme

$$\Gamma[q] = S[q] + \tilde{\Gamma}_\hbar[q] \quad (3.39)$$

avec $\tilde{\Gamma}_0[q] = 0$.

À partir de la dérivée fonctionnelle de l'action classique par rapport à $q(t)$, nous obtenons l'équation du mouvement d'Euler-Lagrange

$$\frac{\delta S[q]}{\delta q(t)} = -J(t) \quad (3.40)$$

De la même manière, la dérivée fonctionnelle de l'action effective $\Gamma[q]$ par rapport à $q(t)$ donnée par (3.36) conduit à

$$\frac{\delta \Gamma[q]}{\delta q(t)} = -J(t) \quad (3.41)$$

Cette équation peut être écrite sous la forme

$$m \ddot{q}(t) - \partial_q V(q(t)) - \frac{\delta \tilde{\Gamma}_\hbar[q]}{\delta q(t)} = J(t) \quad (3.42)$$

$\tilde{\Gamma}_\hbar[q]$ admet une expansion en puissance de \hbar et ses coefficients sont représentés par des diagrammes de Feynman comprenant des boucles. Nous pouvons alors interpréter

l'équation intégral-différentielle (3.42) contenant des corrections quantiques comme une perturbation de l'équation du mouvement classique.

Afin d'interpréter les solutions de (3.41), nous écrivons $Z[J]$, définie dans (3.35), dans la forme équivalente

$$Z[J] = \langle 0 | \mathcal{U}_S^J(+\infty, -\infty) | 0 \rangle = \langle 0 | \mathcal{T} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \int dt (\hat{H} - \hat{q}J(t))} \right) | 0 \rangle \quad (3.43)$$

où $\mathcal{U}_S^J(t_2, t_1)$ est l'opérateur d'évolution du temps t_2 au temps t_1 dans la représentation de Schrödinger et en présence d'une source extérieure $J(t)$. Notons qu'en mécanique quantique $J(t)$ est une force extérieure. La variable conjuguée à J est alors

$$q(t) = \frac{\langle \alpha_{[J]} | \mathcal{U}_S^J(t, 0) \hat{q} \mathcal{U}_S^J(t, 0) | \beta_{[J]} \rangle}{\langle \alpha_{[J]} | \beta_{[J]} \rangle} \quad (3.44)$$

où

$$|\alpha_{[J]}\rangle = \langle 0 | \mathcal{U}_S^J(+\infty, 0) \quad (3.45)$$

$$|\beta_{[J]}\rangle = \mathcal{U}_S^J(0, -\infty) | 0 \rangle \quad (3.46)$$

Généralement, les états $|\beta_{[J]}\rangle$ et $|\alpha_{[J]}\rangle$ sont différents, $q(t)$ est un élément non-diagonal de la matrice représentant l'opérateur \hat{q} entre deux états évoluant en présence de la source $J(t)$. Par suite, la solution de (3.41) peut être une valeur complexe. Dans le cas harmonique $\mathcal{U}(q)$ constant, $|\beta_{[J]}\rangle$ et $|\alpha_{[J]}\rangle$ sont des états cohérents et coïncident, à une phase près, si $\tilde{J}(\omega) = 0$, où \tilde{J} est la transformée de Fourier de la force extérieure. Dans le cas anharmonique, des conditions compliquées devraient être imposées sur J de façon à ce que les deux états coïncident. Si ces conditions sont satisfaites, $q(t)$ est alors la valeur moyenne de l'opérateur de position.

3.3.2 Développement de l'action effective en boucles

L'action effective ne peut pas être évaluée exactement dans le cas des systèmes anharmoniques, i.e., $\mathcal{U}(q) \neq \text{constant}$. Une approximation semi-classique, couramment utilisée,

est l'expansion en boucles [46, 47]. Ce schéma d'approximation consiste en un développement de $\Gamma[q]$ en puissance de \hbar . À l'ordre le plus bas, l'action effective coïncide avec l'action classique, alors que le terme à l'ordre d'une boucle s'exprime sous forme de déterminant fonctionnel.

Pour obtenir l'expansion en boucles, nous exprimons $Z[J]$ sous forme d'une intégrale de chemin [48]. (3.43) s'écrit comme

$$Z[J] = \frac{\langle 0_0 | \mathcal{T}(\epsilon^{-\frac{i}{\hbar} \int dt [\dot{q}_0(t) - \dot{q}_0(t)J(t)])} | 0_0 \rangle}{\langle 0_0 | \mathcal{T}(\epsilon^{-\frac{i}{\hbar} \int dt \dot{C}(\dot{q}_0(t))}) | 0_0 \rangle} \quad (3.47)$$

où $\dot{q}_0(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \dot{q} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t}$ et $|0_0\rangle$ est l'état fondamental de \hat{H}_0 . (3.47) est équivalente à

$$Z[J] = \frac{\epsilon^{-\frac{i}{\hbar} \int dt \mathcal{L}(\frac{\dot{q}}{\delta J(t)})} Z_0[J]}{\epsilon^{-\frac{i}{\hbar} \int dt \mathcal{L}(\frac{\dot{q}}{\delta J(t)})} Z_0[J]} \quad (3.48)$$

où $Z_0[J]$ est donnée par l'intégrale de chemin [9],

$$Z_0[J] = \lim_{T \rightarrow \infty} \int dx dy \int d[q]_{x,y}^T \epsilon^{\frac{i}{\hbar} \int_{-T}^T dt [\frac{m}{2} \dot{q}^2(t) - \frac{m}{2} \omega^2 q^2(t) + J(t)q(t)]} \varphi_0(x) \varphi_0(y) \quad (3.49)$$

Ici $\varphi_0(x) = \langle x | 0_0 \rangle$, et $d[q]_{x,y}^T$ est la mesure fonctionnelle sur l'ensemble des chemins satisfaisants aux conditions aux limites $q(-T) = x$, $q(T) = y$. L'intégrand dans (3.49) peut être régularisé, à cause de sa forme purement oscillatoire, en remplaçant ω par $\omega_\epsilon \equiv \omega(1 - i\epsilon)$ avec $\epsilon \rightarrow 0^+$ [48]. En comparant (3.48) et (3.49) nous obtenons:

$$Z[J] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\int dx dy \int d[q]_{x,y}^T \epsilon^{\frac{i}{\hbar} \int_{-T}^T dt [\frac{m}{2} \dot{q}^2(t) - \frac{m}{2} \omega_\epsilon^2 q^2(t) - \mathcal{L}(q(t)) + J(t)q(t)]} \varphi_0(x) \varphi_0(y)}{\int dx dy \int d[q]_{x,y}^T \epsilon^{\frac{i}{\hbar} \int_{-T}^T dt [\frac{m}{2} \dot{q}^2(t) - \frac{m}{2} \omega_\epsilon^2 q^2(t) - \mathcal{L}(q(t))]} \varphi_0(x) \varphi_0(y)} \quad (3.50)$$

Appliquons maintenant l'approximation de la phase stationnaire (voir la section 1.3.2) à (3.50) en faisant une expansion du numérateur autour de la solution $q_0(t)$ de

$$m\ddot{q}_0(t) = -m\omega_\epsilon^2 q_0(t) - \mathcal{L}'(q_0(t)) + J(t) \quad (3.51)$$

qui s'annule lorsque $|t| \rightarrow \infty$. Nous trouvons

$$\begin{aligned}
 Z[J] &\simeq e^{\frac{i}{\hbar}(S[q_0] + \int dt J(t)q_0(t))} \\
 &\times \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\int d[q]_0^0 e^{\frac{i}{2\hbar} \int_{-T}^T dt [\dot{q}^2(t) - \omega^2 q^2(t) - \frac{1}{m} U''(q_0(t)) q^2(t)]}}{\int d[q]_0^0 e^{\frac{i}{2\hbar} \int_{-T}^T dt [\dot{q}^2(t) - \omega^2 q^2(t)]}}
 \end{aligned} \tag{3.52}$$

Notons que les intégrations sur x et y disparaissent parce que $\varphi_0(\cdot)$ est proportionnelle à $\delta(\cdot)$ dans la limite classique $\hbar \rightarrow 0$. En effectuant l'intégrale gaussienne dans (3.52) nous avons

$$\begin{aligned}
 Z[J] &\simeq e^{\frac{i}{\hbar}(S[q_0] + \int dt J(t)q_0(t))} \\
 &\times \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \lim_{T \rightarrow \infty} \left(\frac{\det(-\partial_t^2 - \omega_\varepsilon^2 - \frac{1}{m} U''(q_0(t)))}{\det(-\partial_t^2 - \omega_\varepsilon^2)} \right)^{-\frac{1}{2}}
 \end{aligned} \tag{3.53}$$

où les opérateurs différentiels agissent sur les fonctions $y(t)$ avec des conditions aux limites de type Dirichlet, $y(-T) = y(T) = 0$. À partir de (3.53) nous obtenons

$$W[J] = W_0[J] + \hbar W_1[q_0] + \mathcal{O}(\hbar^2), \tag{3.54}$$

où

$$W_0[J] = S[q_0] + \int dt J(t)q_0(t) + \mathcal{O}(\hbar) \tag{3.55}$$

et

$$W_1[q_0] = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{i}{2} \ln \left(\frac{\det(-\partial_t^2 - \omega_\varepsilon^2 - \frac{1}{m} U''(q_0(t)))}{\det(-\partial_t^2 - \omega_\varepsilon^2)} \right) + \mathcal{O}(\hbar^2) \tag{3.56}$$

Comme $W[J]$ est déterminée, nous devons en principe effectuer la transformation de Legendre fonctionnelle (3.37) dans le but de calculer $\Gamma[q]$. Pour cela, il faut d'abord résoudre (3.51) pour exprimer q_0 en fonction de J , puis inverser (3.36) pour avoir J en fonction de q et par suite la relation $q[q_0]$. Il est clair qu'il est impossible de réaliser l'ensemble de ces opérations d'une manière exacte car il y a une opération qui consiste à résoudre l'équation du mouvement non linéaire (3.51).

Par contre, nous pouvons déterminer $\Gamma[q]$ de la même façon que $W[J]$. La forme du développement de $\Gamma[q]$ en boucles est

$$\Gamma[q] = \Gamma_0[q] + \hbar \Gamma_1[q] + \hbar^2 \Gamma_2[q] + \dots \tag{3.57}$$

À l'ordre zéro en \hbar , d'après (3.36), nous avons

$$q = \frac{\delta W[J]}{\delta J} = \frac{\delta W_0[J]}{\delta J} + \mathcal{O}(\hbar) = q_0 + \mathcal{O}(\hbar) \quad (3.58)$$

La relation fonctionnelle $q[q_0]$ est triviale à l'ordre zéro en \hbar et le premier terme dans (3.57) est donné par

$$\Gamma_0[q] = S[q] \quad (3.59)$$

Dans le but de calculer les termes d'ordre supérieur, posons $q = q_0 + \hbar q'$. Nous obtenons,

$$\begin{aligned} \Gamma[q] - \Gamma_0[q] &= W[J] - \int dt q(t) J(t) - \Gamma_0[q] \\ &= S(q_0) - \int dt q_0(t) J(t) - \Gamma_0[q] + \\ &\quad + \hbar W_1[q_0] + \hbar^2 W_2[q_0] + \dots - \int dt q(t) J(t) \end{aligned} \quad (3.60)$$

En posant

$$I[q_0] = S(q_0) - \int dt q_0(t) J(t), \quad I[q] = \Gamma_0[q] - \int dt q(t) J(t)$$

(3.60) devient

$$\begin{aligned} \Gamma[q] - \Gamma_0[q] &= I[q_0] - I[q] + \hbar W_1[q_0] + \hbar^2 W_2[q_0] + \dots \\ &\quad - \hbar^2 \int dt \left[\frac{1}{2} m \dot{q}'^2(t) - \frac{1}{2} \left(m \omega_\varepsilon^2 + \frac{1}{2} U''(q_0(t)) \right) q'^2 \right] \\ &\quad + \hbar W_1[q + \hbar q'] + \hbar^2 W_2[q] + \mathcal{O}(\hbar^3) \end{aligned} \quad (3.61)$$

Après une intégration par parties, nous avons

$$\begin{aligned} \Gamma[q] - \Gamma_0[q] &= \hbar W_1[q] + \hbar^2 W_2[q] - \frac{\hbar^2}{2} \int dt q' \left(-m \partial_t^2 - m \omega_\varepsilon^2 - U''(q_0(t)) \right) q' \\ &\quad - \hbar^2 \frac{\delta W_1[q]}{\delta q} q' + \mathcal{O}(\hbar^3) \end{aligned} \quad (3.62)$$

La comparaison de (3.57) et (3.62) donne

$$\begin{aligned} \Gamma_1[q] &= W_1[q] \\ \Gamma_2[q] &= W_2[q] - \int dt \left[\frac{1}{2} m \dot{q}'^2(t) - \frac{1}{2} \left(m \omega_\varepsilon^2 - U''(q_0(t)) \right) q'^2 \right] \\ &\quad - \frac{\delta W_1[q]}{\delta q} q' \end{aligned} \quad (3.63)$$

Pour déterminer $\Gamma_2[q]$, il est convenable d'éliminer q' de (3.63). À l'ordre zéro en \hbar , nous écrivons

$$\begin{aligned}
 q' &= 1/\hbar[q - q_0] = 1/\hbar \left[\frac{\delta W_1[q]}{\delta J} - q_0 \right] \\
 &= \frac{\delta W_1[q_0]}{\delta q_0} \frac{\delta q_0}{\delta J} \\
 &= \frac{\delta W_1[q_0]}{\delta q_0} \left(m\partial_t^2 + m\omega_\varepsilon^2 + U''(q_0(t)) \right)^{-1} \\
 &= -\frac{\delta W_1[q]}{\delta q} \left(-m\partial_t^2 - m\omega_\varepsilon^2 - U''(q(t)) \right)^{-1}
 \end{aligned} \tag{3.64}$$

$\Gamma_2[q]$ a l'expression finale suivante:

$$\begin{aligned}
 \Gamma_2[q] &= W_2[q] - \frac{1}{2} \frac{\delta W_1[q]}{\delta q} K^{-1}(q) \frac{\delta W_1[q]}{\delta q} \\
 &= W_2[q] + \frac{1}{2} \int \int \frac{\delta W_1[q]}{\delta q(t)} K_{ts}^{-1}(q) \frac{\delta W_1[q]}{\delta q(s)} dt ds
 \end{aligned} \tag{3.65}$$

où K_{ts} est le noyau symétrique

$$K_{ts} = (-m\partial_t\partial_s - m\omega_\varepsilon^2 - U''(q(t))) \delta(t-s) \tag{3.66}$$

À l'aide de (3.57) et (3.63) l'action effective à l'ordre d'une boucle est donnée par

$$\begin{aligned}
 \Gamma[q] &= S[q] - \hbar W_1[q] + \mathcal{O}(\hbar^2) \\
 &= S[q] + \frac{i\hbar}{2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \lim_{T \rightarrow \infty} \ln \left(\frac{\det(-\partial_t^2 - \omega_\varepsilon^2 - \frac{1}{m}U''(q(t)))}{\det(-\partial_t^2 - \omega_\varepsilon^2)} \right) \Bigg|_{\text{Dirichlet}(\pm T)} + \mathcal{O}(\hbar^2)
 \end{aligned} \tag{3.67}$$

3.3.3 L'expansion dérivative de l'action effective

L'action classique $S[q]$ est une intégrale sur le temps du lagrangien dépendant de $q(t)$ et $\dot{q}(t)$. Par conséquent, l'équation du mouvement classique (3.40) est une équation différentielle. Mais l'action effective $\Gamma[q]$ dépend du temps d'une manière non locale. L'équation variationnelle (3.41) est alors à son tour non locale. Par contre, si $q(t)$ varie lentement, il est possible de développer $\Gamma[q]$ autour d'une valeur constante de q (expansion dérivative

[49, 50]). Dans cette expansion, $\Gamma[q]$ est écrite aussi sous forme d'une intégrale sur le temps d'un lagrangien ayant la forme d'une série contenant des termes dépendant des dérivées de $q(t)$ d'ordre croissant:

$$\Gamma[q] = \int dt \left(-V_0(q(t)) + \frac{Z(q(t))}{2} \dot{q}^2(t) + A(q(t)) \dot{q}^4(t) - B(q(t)) \ddot{q}^2(t) + \dots \right) \quad (3.68)$$

L'expansion dérivative (3.68) ne converge pas généralement, elle est uniquement valide lorsque $q(t) \rightarrow$ constante. L'absence de termes impairs en $\dot{q}(t)$ dans (3.68) est due à l'invariance de l'hamiltonien sous le renversement du temps.

À l'exception de V_0 et Z , tous les termes figurant dans l'expansion dérivative (3.68) sont au moins d'ordre \hbar :

$$V_0(q) = \frac{1}{2} m q^2 \omega^2 + U(q) + \hbar V_{21}(q) + \mathcal{O}(\hbar^2) \quad (3.69)$$

$$Z(q) = m + \hbar Z_1(q) + \mathcal{O}(\hbar^2) \quad (3.70)$$

$$A(q) = \hbar A_1(q) + \mathcal{O}(\hbar^2) \quad (3.71)$$

$$B(q) = \hbar B_1(q) + \mathcal{O}(\hbar^2) \quad (3.72)$$

Si l'expansion dérivative est tronquée à un ordre fini $2N$, l'équation variationnelle qui lui correspond est d'ordre $2N$. Nous avons alors un problème de Cauchy avec $2N$ conditions initiales. Ces conditions ne déterminent pas complètement la fonction d'onde initiale du système. Des contraintes devraient être imposées sur le choix de la fonction d'onde initiale [56]. L'expansion dérivative d'ordre deux s'écrit

$$\Gamma[q] \simeq \int dt \left(-V_0(q(t)) + \frac{Z(q(t))}{2} \dot{q}^2(t) \right) \quad (3.73)$$

Nous allons déterminer l'expansion dérivative (3.73) en adaptant, à la mécanique quantique, la méthode [49] utilisée en théorie des champs quantiques et basée sur le formalisme fonctionnel euclidien.

Dans l'approche euclidienne, l'expansion dérivative peut être obtenu en utilisant la

fonctionnelle génératrice des fonctions de Green euclidiennes

$$Z_E[J] = \frac{\int d[q]_x^y e^{-\frac{1}{\hbar}(S_E[q] - \int dt J(t)q(t))} \varphi_0(x) \varphi_0(y) dx dy}{\int d[q]_x^y e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[q]} \varphi_0(x) \varphi_0(y) dx dy} \quad (3.74)$$

où l'action euclidienne $S_E[q]$ est définie par

$$S_E[q] = \int dt \left(\frac{1}{2} m \dot{q}^2(t) + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2(t) + U(q(t)) \right) \quad (3.75)$$

En posant $W_E[J] = \hbar \ln Z_E[J]$ et $q(t) = \frac{\delta W_E[J]}{\delta J(t)}$, nous introduisons l'action effective euclidienne

$$\Gamma_E[q] = W_E[J] - \int dt J(t)q(t) \quad (3.76)$$

Par analogie avec les résultats de la section (3.3.2), à l'ordre d'une boucle nous avons

$$\Gamma_E[q] = -S_E[q] - \frac{\hbar}{2} \ln \frac{\det \left[\frac{\delta^2 S_E[q]}{\delta q(t) \delta q(s)} \right]}{\det \left[\frac{\delta^2 S_E[0]}{\delta q(t) \delta q(s)} \right]} + \mathcal{O}(\hbar^2), \quad (3.77)$$

où l'opérateur différentiel $\frac{\delta^2 S_E[q]}{\delta q(t) \delta q(s)}$ est donné dans la forme

$$\frac{\delta^2 S_E[q]}{\delta q(t) \delta q(s)} = [-m \partial_t^2 + m \omega^2 + \partial_t^2 U(q(t))] \delta(t-s) \quad (3.78)$$

L'expansion dérivative d'ordre deux de l'action effective est

$$\Gamma_E[q] = - \int dt \left[V_2(q(t)) + \frac{1}{2} Z(q(t)) \dot{q}^2(t) \right] \quad (3.79)$$

où $V_2(q)$ et $Z(q)$ sont les même fonctions que celles apparaissant dans (3.68).

En combinant (3.77) et (3.79) et en prenant $q(t)$ constant, nous avons la version euclidienne du potentiel effectif

$$\int dt V_{\text{eff}}(q) = \frac{1}{2} \ln \det \left[\frac{\delta^2 S_E[q]}{\delta q(t) \delta q(s)} \right] - \frac{1}{2} \ln \det \left[\frac{\delta^2 S_E[0]}{\delta q(t) \delta q(s)} \right] \quad (3.80)$$

Avec l'analogie fonctionnel de l'identité $\ln \det \mathbb{A} = \text{tr} \ln \mathbb{A}$, valable quelle que soit la matrice hermitienne \mathbb{A} , nous arrivons à

$$\ln \det \left[\frac{\delta^2 S_E[q]}{\delta q(t) \delta q(s)} \right] = \text{tr} \ln \left[\frac{\delta^2 S_E[q]}{\delta q(t) \delta q(s)} \right] \quad (3.81)$$

Si nous utilisons les notations de Dirac nous avons

$$\left(-\partial_t^2 + \omega^2 + \frac{1}{m}\partial_q^2 U(q)\right)\delta(t-s) = \langle t | \left(\hat{P}^2 + \omega^2 + \frac{1}{m}\partial_q^2 U(q)\right) | s \rangle \quad (3.82)$$

où l'opérateur \hat{P} est défini dans la base $\{|t\rangle\}$ par $\langle t | \hat{P} | s \rangle = -i\frac{\delta}{\delta t}\delta(t-s)$. (3.80) devient

$$\int dt V_{z1}(q) = \frac{1}{2} \int dt \left\{ \langle t | \ln \left(\hat{P}^2 + \omega^2 + \frac{1}{m}\partial_q^2 U(q) \right) | t \rangle - \langle t | \ln \left(\hat{P}^2 + \omega^2 \right) | t \rangle \right\} \quad (3.83)$$

À l'aide de la relation de fermeture $\int dp |p\rangle\langle p| = 1$, où $\hat{P}|p\rangle = p|p\rangle$, nous pouvons écrire

$$\langle t | \ln \left(\hat{P}^2 + \omega^2 + \frac{1}{m}\partial_q^2 U(q) \right) | t \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dp \ln \left(p^2 + \omega^2 + \frac{1}{m}\partial_q^2 U(q) \right) \quad (3.84)$$

Pour évaluer l'intégrale figurant dans (3.84), nous appliquons la formule générale

$$\begin{aligned} \int \frac{d^n p}{(2\pi)^n} \log(p^2 + A) &= -\frac{\partial}{\partial \alpha} \int \frac{d^n p}{(2\pi)^n} \frac{1}{(p^2 + A)^\alpha} \Big|_{\alpha=0} \\ &= -\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{1}{(4\pi)^{n/2}} \frac{\Gamma(\alpha - \frac{n}{2})}{\Gamma(\alpha)} \right) A^{\alpha - n/2} \Big|_{\alpha=0} \\ &= -\frac{\Gamma(-\frac{n}{2})}{(4\pi)^{n/2}} \frac{1}{A^{-n/2}} \end{aligned} \quad (3.85)$$

où nous avons utilisé le comportement de la fonction d'Euler, $\Gamma[\alpha] \rightarrow \alpha$ quand $\alpha \rightarrow 0$.

En prenant $n = 1$ dans (3.85) et avec (3.83), nous avons finalement

$$V_{z1}(q) = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\omega^2 + \frac{1}{m}\partial_q^2 U(q)} - \omega \right) \quad (3.86)$$

La détermination de $Z_1(q)$ est un peu plus compliquée. À partir de (3.79) nous constatons que $Z_1(q)$ est le coefficient du terme contenant $\dot{q}(t)^2$ dans l'action effective. Nous pouvons alors écrire [49]

$$\int dt Z_1(q(t)) \dot{q}^2(t) = \ln \det \left[\frac{\delta^2 S_E[q]}{\delta q(t) \delta q(s)} \right] - \left(\ln \det \left[\frac{\delta^2 S_E[q_c]}{\delta q(t) \delta q(s)} \right] \right)_{q_c \rightarrow q(t)} \quad (3.87)$$

Le premier terme de droite de (3.87) est essentiellement l'action effective à l'ordre d'une boucle alors que le deuxième est dû au potentiel effectif. Le second déterminant dans

(3.87) est à évaluer avec q_c constante qui devrait être remplacée par $q(t)$ seulement à la fin [49]. Le terme de normalisation de $Z_E[J]$ commun à l'action effective et au potentiel effectif est éliminé. Soient \hat{T} et \hat{P} deux opérateurs satisfaisant la relation de commutation $[\hat{T}, \hat{P}] = i$ avec les éléments de matrice $\langle t | \hat{P} | s \rangle = -i \frac{\partial}{\partial t} \delta(t - s)$, $\langle p | \hat{T} | q \rangle = i \frac{\partial}{\partial p} \delta(p - q)$, où $|t\rangle, |s\rangle$ et $|p\rangle, |q\rangle$ sont respectivement les vecteurs propres de \hat{T} et \hat{P} .

En écrivant la différence de deux logarithmes d'opérateurs définis positifs dans la forme paramétrique

$$\ln \hat{A} - \ln \hat{B} = \int_0^\infty \frac{ds}{s} \left(e^{-\hat{B}s} - e^{-\hat{A}s} \right) \quad (3.88)$$

nous arrivons à l'expression suivante

$$\begin{aligned} & \int dt Z_1(q(t)) \dot{q}^2(t) \\ &= \int dt \langle t | \int_0^\infty \frac{ds}{s} e^{-(m\hat{P}^2 + m\omega^2 + \frac{1}{2}\hat{Q}^2 U(q(t)))s} - e^{-(m\hat{P}^2 + m\omega^2 + \frac{1}{2}\hat{Q}^2 U(q(\hat{T})))s} | t \rangle \end{aligned} \quad (3.89)$$

L'idée est de développer $\partial_q^2 U(q(\hat{T}))$ au voisinage de t en ne gardant que les termes quadratiques en $\dot{q}(t)$ au plus. Nous écrivons alors

$$\partial_q^2 U(q(\hat{T})) = \partial_q^2 U(q(t)) + \hat{Q}a(t) + \frac{1}{2}\hat{Q}^2 b(t) \quad (3.90)$$

où $\hat{Q} = \hat{T} - t$, $a(t) = \partial_t \partial_q^2 U(q(t))$ et $b(t) = \partial_t^2 \partial_q^2 U(q(t))$. Tous les termes proportionnels à \hat{Q}^n , avec $n \geq 3$ sont négligeables. Ils ne contribuent pas à la détermination de $Z_1(q)$.

Avec le développement (3.90), (3.89) devient

$$\begin{aligned} & \int dt Z_1(q(t)) \dot{q}^2(t) \\ &= \int dt \int_0^\infty \frac{ds}{s} e^{-(m\omega^2 + \frac{1}{2}\hat{Q}^2 U(q(t)))s} \left(\langle t | e^{-m\hat{P}^2 s} | t \rangle - \langle t | e^{-(m\hat{P}^2 + \hat{Q}a(t) + \frac{1}{2}\hat{Q}^2 b(t))s} | t \rangle \right) \end{aligned} \quad (3.91)$$

Or, $\langle t | e^{-m\hat{P}^2 s} | t \rangle$ est la partie diagonale du noyau de l'opérateur $e^{-m\hat{P}^2 s}$ correspondant au propagateur quantique libre alors que $\langle t | e^{-(m\hat{P}^2 + \hat{Q}a(t) + \frac{1}{2}\hat{Q}^2 b(t))s} | t \rangle$ est la partie diagonale du noyau de l'opérateur $e^{-(m\hat{P}^2 + \hat{Q}a(t) + \frac{1}{2}\hat{Q}^2 b(t))s}$, correspondant au propagateur quantique de l'oscillateur harmonique. En insérant leurs expressions données respectivement par

(1.50) et (1.113) nous obtenons

$$\int dt Z_1(q(t)) \dot{q}^2(t) = \int dt \int_0^\infty \frac{ds}{s} \exp[-s(m\omega^2 + \partial_q^2 L(q(t)))] \sqrt{\frac{1}{4\pi ms}} \times \left(1 - \sqrt{\frac{2\nu ms}{\sinh(2\nu ms)}} \exp\left(\frac{2a^2(t)}{b(t)}s - \frac{\nu}{\sinh(2\nu ms)}(\cosh(2\nu ms) - 1)\frac{a^2(t)}{b^2(t)}\right) \right) \quad (3.92)$$

avec $r^2 = \frac{4L}{m}$.

Maintenant, nous effectuons un développement du membre de droite de (3.92) en puissances de $a(t)$ et $b(t)$ en ne gardant que les termes quadratiques en $a(t)$ et linéaires en $b(t)$. Le membre de droite de (3.92) devient alors

$$\int dt \int_0^\infty \frac{ds}{s} \exp[-s(m\omega^2 + \partial_q^2 L(q(t)))] \sqrt{\frac{m}{4\pi s}} \left(-\frac{a^2(t)}{12}s^3 + \frac{b(t)}{6}s^2 - \dots \right) \quad (3.93)$$

En remplaçant $a(t)$ et $b(t)$ par leurs expressions nous avons:

$$\int dt Z_1(q(t)) \dot{q}^2(t) - \dots = -\sqrt{\frac{m}{4\pi}} \int dt \int_0^\infty ds \exp[-s(m\omega^2 + \partial_q^2 L(q(t)))] \times \left(\frac{(\partial_q^3 L(q(t)))^2}{12} s^{\frac{3}{2}} q^2(t) - \frac{\partial_q^2 \partial_q^2 L(q(t))}{6} s^{\frac{5}{2}} + \dots \right) \quad (3.94)$$

Soit

$$Z_1(q) = \frac{\sqrt{m}(\partial_q^3 L(q))^2}{24\sqrt{\pi}} \int_0^\infty ds s^{\frac{3}{2}} \exp[-s(m\omega^2 + \partial_q^2 L(q))] = \frac{1}{32m^2} \frac{(\partial_q^3 L(q))^2}{(\omega^2 + \frac{1}{m}\partial_q^2 L(q))^{\frac{5}{2}}} \quad (3.95)$$

Si le potentiel classique n'a pas une forme convexe, $V_1(q)$ et $Z_1(q)$ deviennent imaginaires. En fait $Z_1(q)$ diverge aux points où $\omega^2 + \frac{1}{m}\partial_q^2 L(q) = 0$. Au voisinage de ces points, l'approximation de la phase stationnaire n'est pas valide.

Considérons comme application le cas du potentiel anharmonique.

$$V(q) = \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 + gL(q), \quad L(q) = q^4 \quad (3.96)$$

Nous supposons que g constitue un couplage faible, $g \ll 1$. D'après (3.86) nous avons

$$V_{\text{eff}}(q) = \frac{\omega}{2} \left[\left(1 + \frac{g}{m\omega^2} \partial_7^2 U(q) \right)^{1/2} - 1 \right] \quad (3.97)$$

Avec le développement de Taylor $(1 + \alpha)^{1/2} = 1 + \frac{1}{2}\alpha - \frac{1}{8}\alpha^2 + \mathcal{O}(\alpha^3)$ où $\alpha = \frac{g}{m\omega^2} \partial_7^2 U(q)$, (3.97) devient

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}(q) &= \frac{g}{4m\omega} \partial_7^2 U(q) - \frac{g^2}{16m^2\omega^3} (\partial_7^2 U(q))^2 + \mathcal{O}(g^3), \\ &= \frac{3g}{m\omega} q^2 - \frac{9g^2}{m^2\omega^3} q^4 + \mathcal{O}(g^3) \end{aligned} \quad (3.98)$$

À la limite asymptotique $T \rightarrow \infty$, correspondant à un temps d'amplitude large, le développement des paramètres du potentiel à l'ordre d'une boucle, s'écrit

$$\delta v_2 = \frac{3\hbar g}{m\omega} + \mathcal{O}(g^2\hbar^2) \quad (3.99)$$

$$\delta v_4 = -\frac{9\hbar g^2}{m^2\omega^3} + \mathcal{O}(g^3\hbar^2) \quad (3.100)$$

où v_2 et v_4 sont respectivement le terme quadratique et le terme quartique apparaissant dans le potentiel $V(q)$ ayant la forme (3.96).

3.3.4 Comparaison entre l'action renormalisée et l'action effective

En général, le développement (3.68) ne converge pas. De plus, du fait de la présence des termes dérivatifs d'ordre croissant, l'équation du mouvement (3.41) exprimée sous la forme de la dérivée fonctionnelle de $\Gamma_E[q]$ par rapport à q n'a pas la même structure que l'équation du mouvement classique (3.40). Son intégration exige l'imposition d'un nombre de conditions initiales supérieur à deux.

Ici, nous suggérons de décrire l'amplitude de transition en mécanique quantique par une action renormalisée ou une action quantique ayant la même structure que l'action classique mais avec des paramètres différents. Cette action quantique est différente de

l'action effective dans les aspects suivants: nous postulons que l'action quantique est libre de termes dérivatifs très élevés. L'action effective est donnée par la transformée de Legendre de l'amplitude vide-vide $\langle 0, +\infty | 0, -\infty \rangle$ et interprétée comme l'énergie de l'état fondamental. Elle correspond à une amplitude de transition de temps infini alors que l'action quantique est définie pour un temps T arbitraire. En fait, notre définition de l'action quantique est reliée à la méthode fonctionnelle de Schrödinger appliquée en théorie quantique des champs [52]. Cette méthode est utilisée aussi en théorie quantique des champs sur réseau où les effets de volume fini sont exploités pour déterminer les paramètres renormalisés et leur évolution avec l'échelle [53]. En choisissant des conditions aux frontières appropriées sur les champs et en faisant varier la taille du réseau il est possible de déterminer numériquement les paramètres renormalisés (la masse, le couplage, le facteur de renormalisation de l'amplitude du champ Z , etc.). Nous n'avons pas de preuves de l'existence de l'action quantique mais nous allons donner un argument numérique en sa faveur.

3.4 Validité de la conjecture: Argument numérique

3.4.1 Algorithme

Considérons un système à un degré de liberté en présence d'un potentiel local. Nous proposons de déterminer numériquement l'action quantique qui lui correspond. Pour cela, il faut d'abord évaluer le propagateur qui dans la version euclidienne s'écrit

$$G_E(\hat{q}_A, t_A, \hat{q}_B, t_B) = \int_{\hat{q}_A, t_A}^{\hat{q}_B, t_B} d[q(\cdot)] \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_E(q(\cdot))\right) \quad (3.101)$$

où

$$S_E = \int_{t_A}^{t_B} ds \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dq(s)}{ds} \right)^2 + V(q(s)) \right) \quad (3.102)$$

est l'action classique dans la version euclidienne. (3.32) devient alors

$$G_E(\hat{q}_A, t_A, \hat{q}_B, t_B) = \tilde{\mathcal{N}}_E \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \tilde{S}_E(\tilde{q}_{cl}^E(\cdot, \cdot))\Big|_{q_A, t_A}^{q_B, t_B}\right) \quad (3.103)$$

Dans (3.103), l'action euclidienne \tilde{S}_E est donnée par

$$\tilde{S}_E = \int_{t_A}^{t_B} ds \left(\frac{\tilde{m}}{2} \left(\frac{dq(s)}{ds} \right)^2 - \tilde{V}(q(s)) \right) \quad (3.104)$$

Le passage du temps réel au temps imaginaire fait que l'action euclidienne S_E diffère de S par le signe du potentiel ainsi que \tilde{S}_E et \tilde{S} . Désormais, nous travaillons dans la version euclidienne de l'intégrale de chemin en omettant l'indice E .

Spécifions tout d'abord la classe de potentiel. Soit une particule non relativiste de masse m , soumise à un potentiel local $V(q)$. Nous supposons que $V(q)$ est positif, ayant une borne inférieure et donné par la forme polynomiale

$$V(q) = \sum_{n=0}^N v_n q^n \quad (3.105)$$

L'action classique est paramétrisée par m, v_0, \dots, v_N . Nous fixons le potentiel correspondant à l'action renormalisée par la forme suivante

$$\tilde{V}(q) = \sum_{n=0}^N \tilde{v}_n q^n \quad (3.106)$$

L'action renormalisée est paramétrisée par $\tilde{m}, \tilde{v}_0, \dots, \tilde{v}_N$. (3.103) se réalise, une fois que les conditions aux limites $q(t_A) = q_A, q(t_B) = q_B$ sont fixées pour un intervalle de temps $T = t_B - t_A$ donné. Soit

$$P = \{q_1, \dots, q_J\} \quad (3.107)$$

un ensemble de points appartenant au bord du domaine d'espace de l'évolution de la particule. Pour chaque temps $T = t_B - t_A$ et une paire $q(t_A) = q_A, q(t_B) = q_B$ telle que $q_A, q_B \in P$ nous calculons le propagateur quantique euclidien que nous notons $G_{ij} \equiv G(q_i, q_j, T)$. Notons aussi l'action euclidienne le long du chemin classique \tilde{q}_{cl} par $\tilde{\Sigma}_{t_j} =$

$\tilde{S}(\tilde{q}_B) \big|_{\tilde{q}_A, 0}^{\tilde{q}_B, T}$. Etant donné que le facteur euclidien de normalisation $\tilde{\mathcal{N}}$ ne dépend pas de $q(t_A) = q_A$ et $q(t_B) = q_B$, nous le substituons dans

$$\tilde{\Sigma}_{ij}^{sub} = \tilde{\Sigma}_{ij} - \ln \tilde{\mathcal{N}} \quad (3.108)$$

(3.103) prend alors la forme

$$G_{ij} = \exp\left(-\tilde{\Sigma}_{ij}^{sub}\right), \quad i, j = 1, \dots, J \quad (3.109)$$

(3.109) représente $J^2/2 + O(J)$ équations indépendantes déterminant l'action quantique alors que cette dernière dépend de $N + 2$ paramètres.

Nous avons choisi un nombre d'équations supérieur au nombre de paramètres à déterminer. Dans ce cas, (3.109) est un système non linéaire surdéterminé. Pour le résoudre, nous avons utilisé la méthode des moindres carrés qui consiste à trouver une solution de (3.109) correspondant à un minimum de χ^2 défini par ¹

$$\chi^2 = \sum_{i,j=1}^J (G_{ij} - \exp[-\tilde{\Sigma}_{ij}^{sub}])^2 / \sigma_{ij}^2 \quad (3.110)$$

Dans (3.110), χ^2 est une fonction des paramètres de l'action quantique, $\chi^2(\tilde{m}, \tilde{v}_0, \dots, \tilde{v}_N)$.

3.4.2 Potentiel harmonique

Nous avons calculé le propagateur quantique euclidien en utilisant deux méthodes différentes, à savoir la méthode Monte-Carlo décrite au chapitre 2 et l'équation de Schrödinger. D'après la formule de Feynman-Kac, quand le temps T est large, l'expression asymptotique du propagateur quantique est dominée par la contribution de l'état fondamental. La résolution de l'équation de Schrödinger nous a fourni un nombre M de valeurs propres

¹Ce problème revient à à considérer la fonction non linéaire $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ avec $m > n$ et à chercher une solution de $f(\mathbf{x}) = 0$. Comme il y a plus de conditions que d'inconnues, la solution est déterminée en minimisant $\|f(\mathbf{x})\|_2$.

(état fondamental plus $M - 1$ premiers états excités) et les fonctions d'ondes propres correspondantes. Une somme spectrale sur ces M états quantiques nous donne l'expression asymptotique du propagateur.

La détermination du minimum global de (3.110), revient à résoudre un système non-linéaire surdéterminé. Pour ce faire, nous avons appliqué la méthode itérative de Gauss-Newton. À chaque itération, χ^2 est évaluée en déterminant l'action $\tilde{\Sigma}_{ij}^{sub}$. Le calcul de cette dernière nécessite de trouver le chemin classique, solution de l'équation du mouvement dans un temps imaginaire

$$\frac{\delta \tilde{\Sigma}^{sub}}{\delta \tilde{q}} = 0 \quad (3.111)$$

assujettie aux conditions aux limites

$$\tilde{q}(t_A) = q_i, \quad \tilde{q}(t_B) = q_j \quad (3.112)$$

Les équations (3.111) et (3.112) forment un problème aux limites (équation différentielle avec conditions aux bords). Pour le résoudre, nous avons utilisé la méthode de tir mettant en jeu l'algorithme de Runge-Kutta et l'algorithme de Newton-Raphson.

L'oscillateur harmonique correspond à $V(q) = v_2 q^2$, $v_2 = 1/2$ (avec les paramètres $m = \omega = \hbar = 1$). Le chemin classique, l'amplitude de transition et l'action renormalisée sont connus analytiquement, $\tilde{S} = S$. Le cas du potentiel harmonique sert à tester nos algorithmes, l'estimation des erreurs statistiques sur les éléments de matrice G_{ij} et leurs influences sur la propagation de l'erreur sur les paramètres de l'action. Les points $P = \{q_1, \dots, q_J\}$ appartenant au bord sont équidistants le long de l'intervalle $[-b, b]$. Les résultats sont résumés dans le **Tableau. 3.1**.

3.4.3 Potentiel anharmonique

Afin de comparer nos résultats numériques avec l'expression analytique du potentiel effectif déterminée en appliquant la théorie des perturbations, nous avons considéré l'oscillateur

	\tilde{m}	\tilde{v}_0	\tilde{v}_1	\tilde{v}_2	χ^2	b
Exact	1	1.186055	0	0.5		
Fit	1.000000	1.186055	0.000000	0.499995		
Fit MC	0.9998	1.1854	0.0000	0.5015	10.88	1
Erreur	0.0002	0.0006	0.0013	0.0028		
Fit MC	1.0001	1.1835	0.0000	0.5005	23.71	2
Erreur	0.0001	0.0007	0.0012	0.0012		
Fit MC	1.0001	1.1825	0.0000	0.5003	25.41	3
Erreur	0.0001	0.0009	0.0013	0.0008		
Moyenne	1.0000	1.1838	0.0000	0.5007	20.0	
Erreur	0.0001	0.0007	0.0013	0.0016		

Tableau 3.1: **Les paramètres renormalisés du potentiel harmonique.** $V(q) = \frac{1}{2}q^2$ avec $m = 1$, $\hbar = 1$ et $\omega = 1$. Comparaison de \tilde{S} avec S .

harmonique en présence d'une perturbation anharmonique faible

$$V(q) = v_2 q^2 + \lambda v_4 q^4 \quad (3.113)$$

avec $v_2 = 1$, $v_4 = 1$ et $\lambda \ll 1$. Dans les **Figure 3.1** et **Figure 3.2**, nous présentons la dépendance des paramètres renormalisés \tilde{m} , \tilde{v}_0 , \tilde{v}_2 et \tilde{v}_4 en fonction du temps de l'amplitude de transition T dans le cas de $\lambda = 0.01$. Ces deux figures illustrent la convergence des paramètres avec le temps T .

En faisant varier le paramètre λ le long de l'intervalle $0 \leq \lambda \leq 0.1$ (perturbation faible), nous avons calculé numériquement l'action quantique (au temps de transition $T = 4$) et l'avons comparée avec les prédictions de la théorie des perturbations de l'action effective à l'ordre le plus bas (équations (3.99) et (3.100)). Les résultats sont présentés dans la **Figure 3.3**. Nous constatons que le potentiel effectif et le résultat numérique du potentiel

de l'action quantique sont très proches. Le désaccord à $\lambda \sim 0.1$ est dû à la négligence des termes de correction d'ordre supérieur dans la série des perturbations.

3.4.4 Potentiel quartique

Maintenant, considérons une interaction de la forme

$$V(q) = v_4 q^4, \quad v_4 = 1 \quad (3.114)$$

avec les paramètres

$$m = \omega = \hbar = 1 \quad (3.115)$$

Nous avons calculé numériquement l'énergie de l'état fondamental, $E_0 = 0.667986$, et la variance de la fonction d'onde, $var_0 = 0.287333$. À partir de ces deux dernières quantités, nous introduisons une échelle de temps et une échelle de longueur.

$$T_e = \hbar / E_0 = 1.497, \quad L_e = \sqrt{var_0} = 0.5360 \quad (3.116)$$

Dans le domaine $0 < T < 2$, nous avons calculé le propagateur par Monte Carlo avec $N_{Monte} = 4000$, $N_{skip} = 2000$ et $N_{conf} = 1000$ alors que dans le domaine $T > 1$, nous l'avons calculé à partir de M états quantiques en résolvant l'équation de Schrödinger. Nous avons pris $M = 30$ dans le cas $1 < T < 2$ et $M = 7$ dans le cas $T > 2$. Concernant la détermination de $\tilde{S}[\tilde{q}_{cl}]$, nous avons dû résoudre les équations du mouvement classique avec un nombre de pas de l'ordre de 20 000.

Les résultats du cas $T = 0.5$ sont présentés dans le **Tableau. 3.2**. Nous remarquons que:

(i) le terme linéaire et le terme cubique du potentiel renormalisé sont compatibles, dans les limites des erreurs statistiques, avec la valeur zéro. C'est une conséquence de la conservation de la parité.

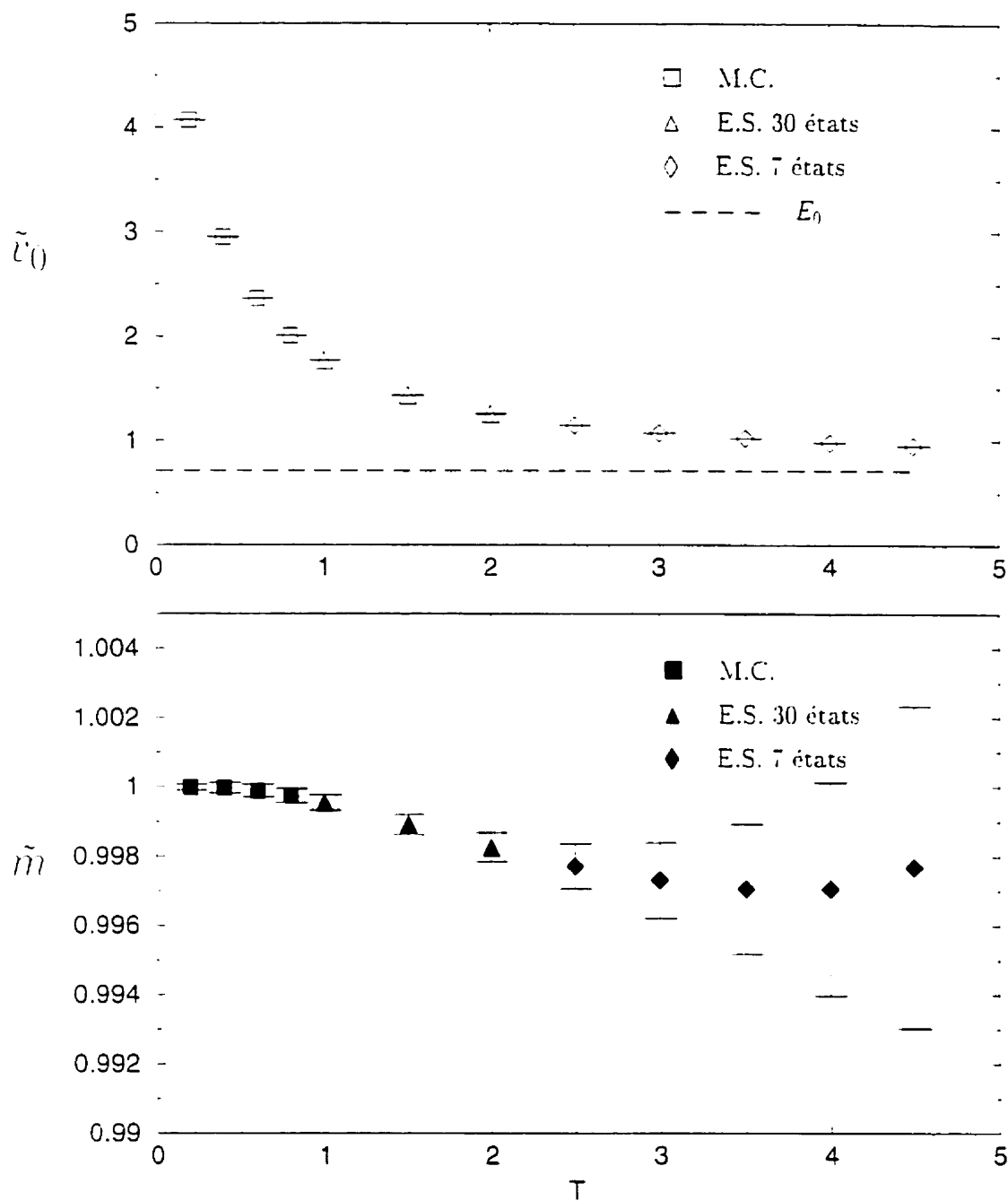


Figure 3.1: La masse renormalisée et le terme constant du potentiel harmonique plus une perturbation anharmonique. $V(q) = q^2 - \lambda q^4$ avec $\lambda = 0.01$, $m = 1$ et $\hbar = 1$. \tilde{m} et \tilde{v}_0 en fonction de T .

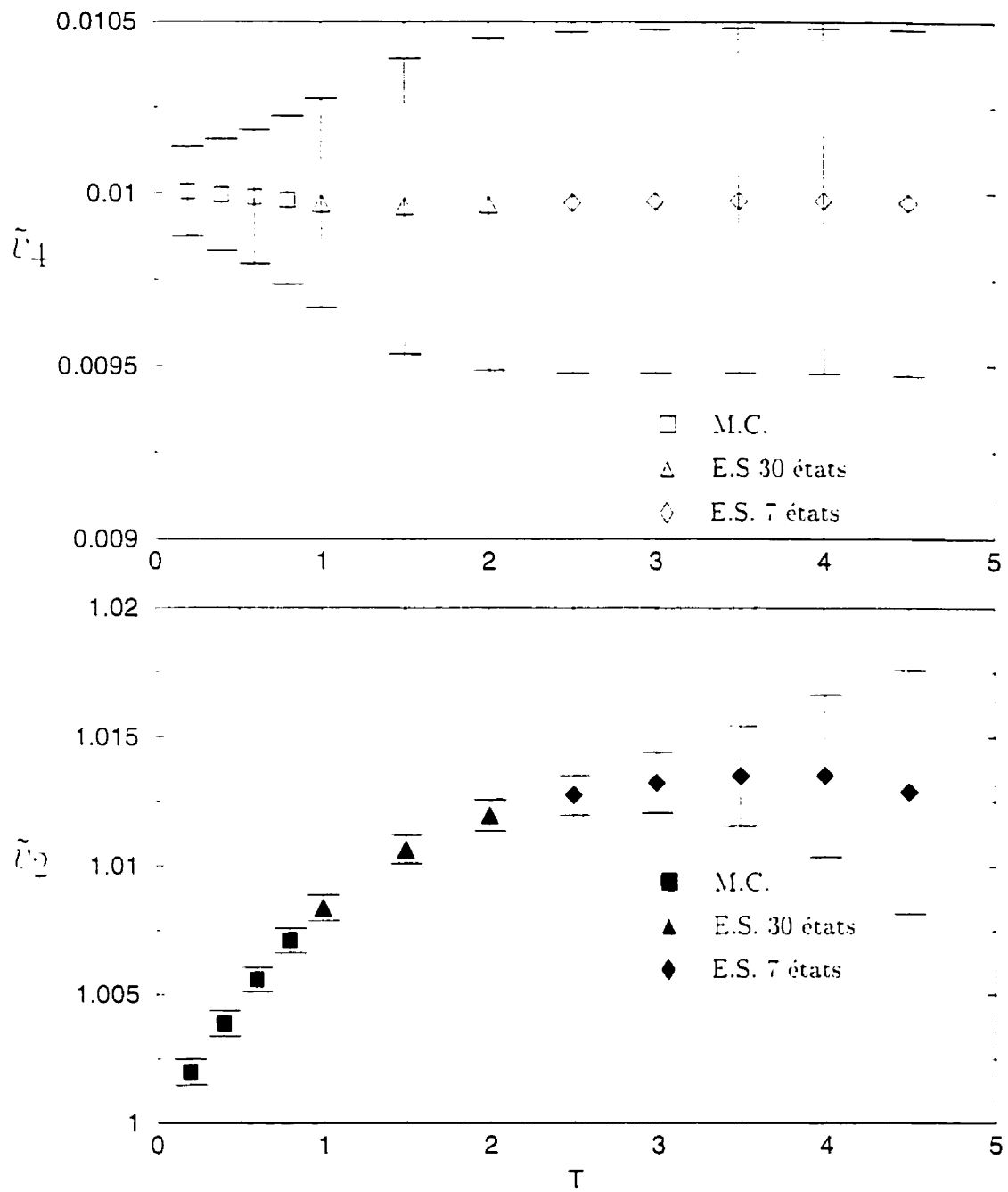


Figure 3.2: Les termes quadratique et quartique renormalisés du potentiel harmonique plus une perturbation anharmonique. $V(q) = q^2 + \lambda q^4$ avec $\lambda = 0.01$, $m = 1$ et $\hbar = 1$. \tilde{v}_2 et \tilde{v}_4 en fonction de T .

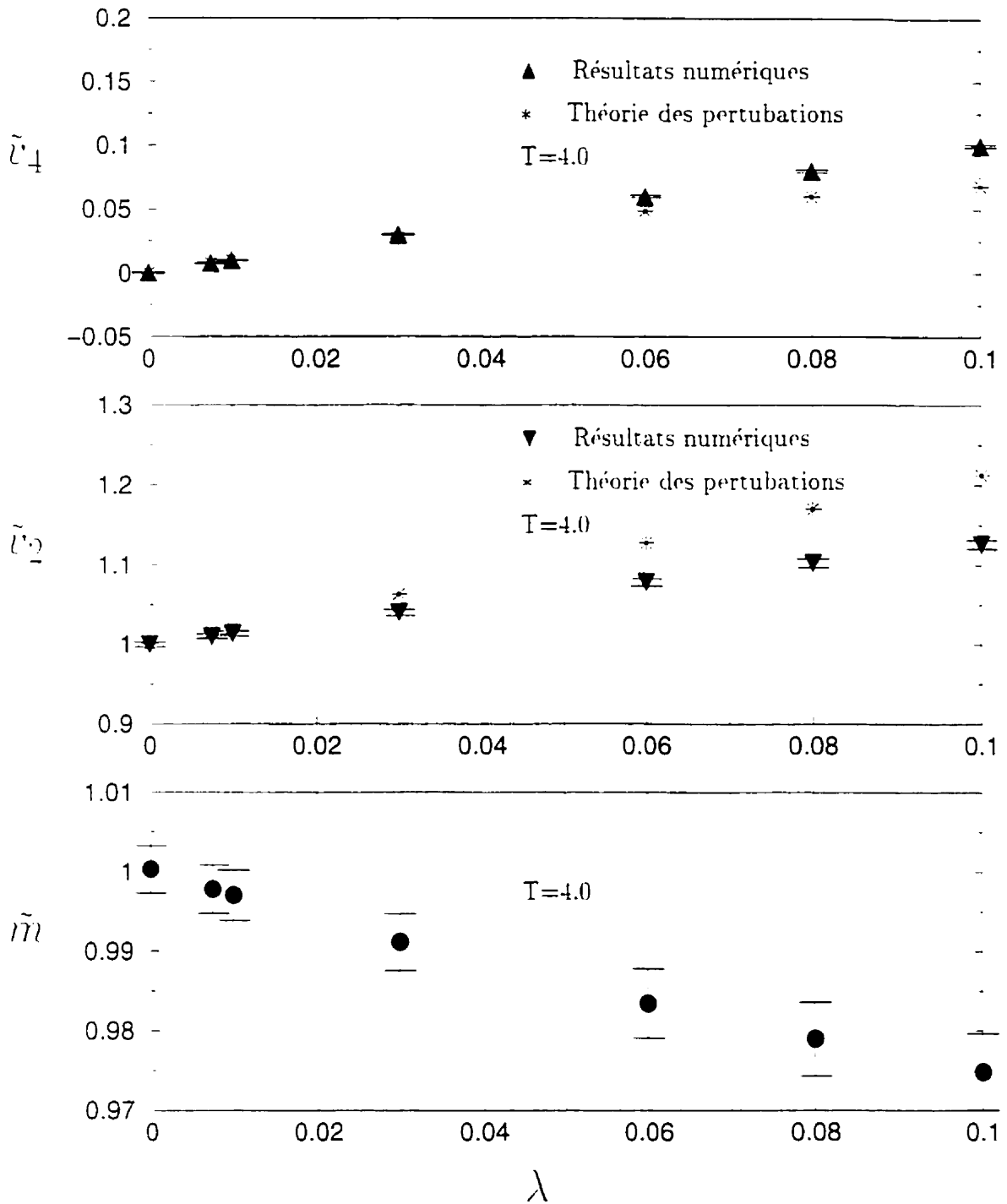


Figure 3.3: Le potentiel harmonique plus une perturbation anharmonique. $V(q) = q^2 - \lambda q^4$ avec $m = 1$ et $\hbar = 1$. \tilde{m} , \tilde{v}_2 et \tilde{v}_4 en fonction de λ .

(ii) un terme quadratique, absent dans l'action classique, a été généré par l'action renormalisée. Les coefficients varient légèrement avec les différents intervalles $[-b, b]$. Le terme quadratique est sensible, il manifeste une fluctuation considérable par rapport à sa valeur moyenne. En prenant $J = 6$, la valeur de χ^2 est de l'ordre 36. ($\chi^2/J^2 \simeq 1$). Ce résultat est en faveur de la validité du fit. L'algorithme fonctionne bien à partir de l'intervalle $[-1.0, -1.0]$ à $[-3.6, -3.6]$. D'une part, si l'intervalle est petit, avec des conditions aux bords $q_i \ll 1$, les termes q^2 et q^4 sont difficiles à distinguer. D'autre part, si l'intervalle est trop large avec des conditions aux bords $q_i \gg 1$, l'expression " $\exp[-q^4]$ " que nous avons traitée comme une observable dans l'algorithme de Monte Carlo devient très petite. De plus, le terme quartique dans l'action renormalisée l'emporte sur le terme quadratique, ce qui rend ce dernier difficile à distinguer. La précision numérique est limitée par les erreurs sur les éléments de matrice calculés par Monte Carlo.

La stabilité des paramètres renormalisés sous la variation de l'intervalle $[-b, b]$ contenant les conditions aux bords a été observée aussi pour d'autres valeurs du temps T . Nous présentons dans la **Figure 3.4** et la **Figure 3.5** la dépendance des paramètres renormalisés en T . En se basant sur les données numériques, nous observons que leur comportement change d'une manière qualitative avec le temps. Nous distinguons 3 régions: (i) $0 < T \ll T_{sc}$, (ii) $T \approx T_{sc}$, et (iii) $T \gg T_{sc}$. Quant T est au voisinage de zéro, les paramètres renormalisés ne diffèrent pas des paramètres classiques, l'action renormalisée et l'action classique coïncident. L'exception est \tilde{v}_4 à $T = 0.1$, qui vaut 10% de la valeur classique. Ce problème n'est pas d'origine physique mais est plutôt dû à la limitation de la précision numérique (rappelons que le propagateur tend vers $\delta(q - q_0)$ quand $T \rightarrow 0$). Lorsque $T \approx T_{sc}$, \tilde{m} , \tilde{v}_2 et \tilde{v}_4 changent d'une manière remarquable. Quant T est large, $T \gg T_{sc}$, les paramètres renormalisés convergent asymptotiquement. Quand on augmente T au-delà T_{sc} , nous avons constaté que la stabilité de la solution exige une croissance exponentielle du nombre de pas dans le calcul de l'action posant ainsi un effort numérique considérable. Dans nos calculs, nous nous sommes limités à $T = 5$ où le temps de CPU est raisonnable.

	\bar{m}	\bar{v}_0	\bar{v}_1	\bar{v}_2	\bar{v}_3	\bar{v}_4	b
Fit MC	0.9936(3)	1.1711(18)	0.000(7)	0.449(18)	0.000(16)	0.982(23)	1.0
Fit MC	0.9938(2)	1.1665(19)	0.000(7)	0.488(15)	0.000(13)	0.954(15)	1.2
Fit MC	0.9941(2)	1.1695(20)	0.000(7)	0.466(12)	0.000(11)	0.975(10)	1.4
Fit MC	0.9940(2)	1.1696(21)	0.000(8)	0.469(10)	0.000(10)	0.973(7)	1.6
Fit MC	0.9944(2)	1.1684(23)	0.000(8)	0.458(9)	0.000(9)	0.984(5)	1.8
Fit MC	0.9942(2)	1.1679(25)	0.000(9)	0.459(9)	0.000(9)	0.986(4)	2.0
Fit MC	0.9939(2)	1.1721(26)	0.000(9)	0.449(8)	0.000(8)	0.992(4)	2.2
Fit MC	0.9938(2)	1.1689(27)	0.000(10)	0.460(9)	0.000(8)	0.987(3)	2.4
Fit MC	0.9942(3)	1.1664(29)	0.000(11)	0.447(9)	0.000(8)	0.993(3)	2.6
Fit MC	0.9938(3)	1.1738(29)	0.000(12)	0.432(10)	0.000(8)	0.998(3)	2.8
Fit MC	0.9946(3)	1.1705(31)	0.000(13)	0.435(10)	0.000(9)	0.990(3)	3.0
Fit MC	0.9940(4)	1.1702(34)	0.000(13)	0.461(11)	0.000(9)	0.984(3)	3.2
Fit MC	0.9943(4)	1.1645(37)	0.000(15)	0.460(11)	0.000(10)	0.985(4)	3.4
Fit MC	0.9949(5)	1.1605(41)	0.000(16)	0.483(12)	0.000(11)	0.973(4)	3.6
Moyenne	0.9941(3)	1.1685(27)	0.000(10)	0.458(11)	0.000(10)	0.983(7)	

Tableau 3.2: Les paramètres renormalisés du potentiel quartique. $V(q) = q^4$ avec $m = 1$ et $h = 1$.

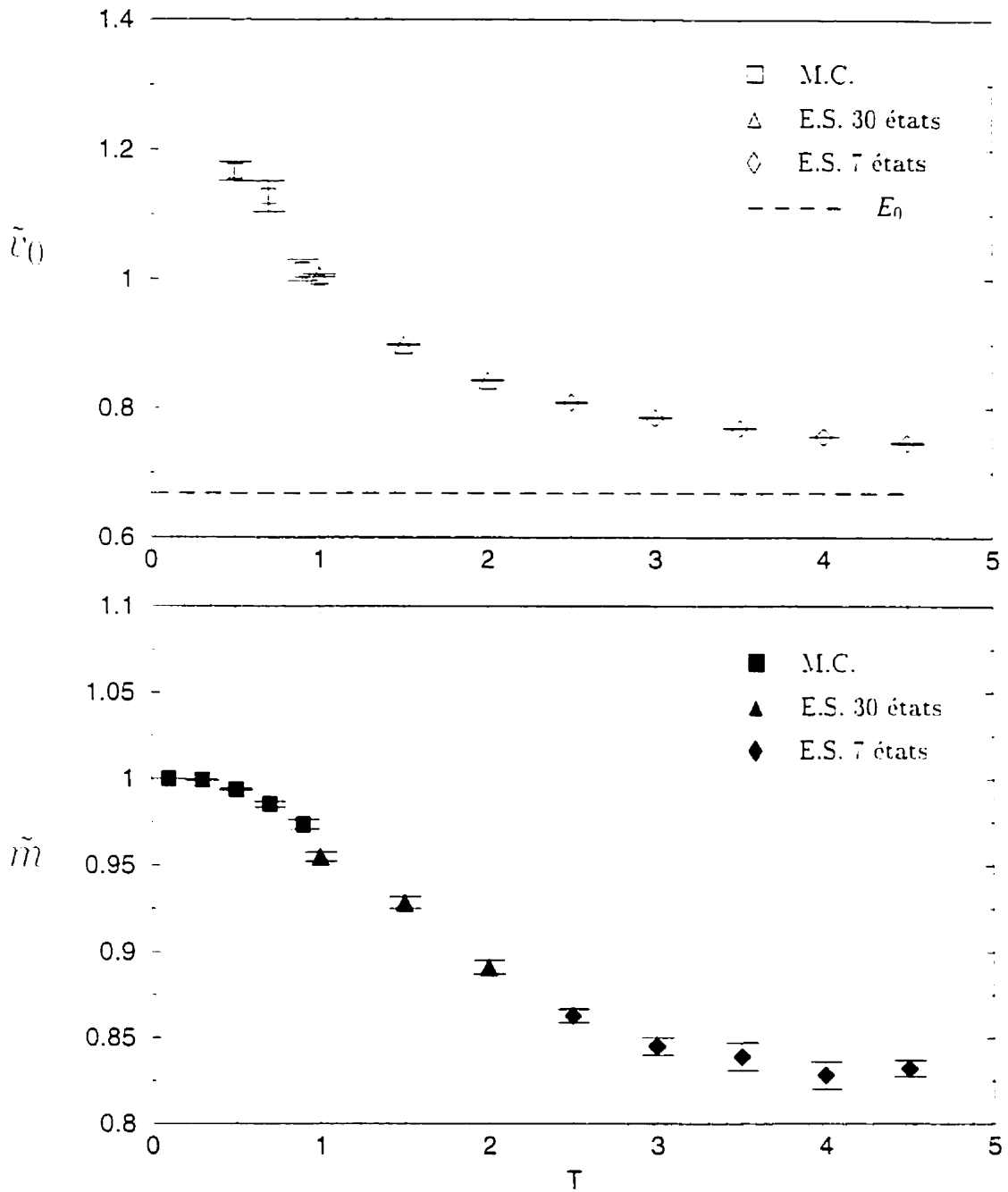


Figure 3.4: La masse renormalisée et le terme constant du potentiel quartique.
 $V(q) = q^4$ avec $m = 1$ et $\hbar = 1$.

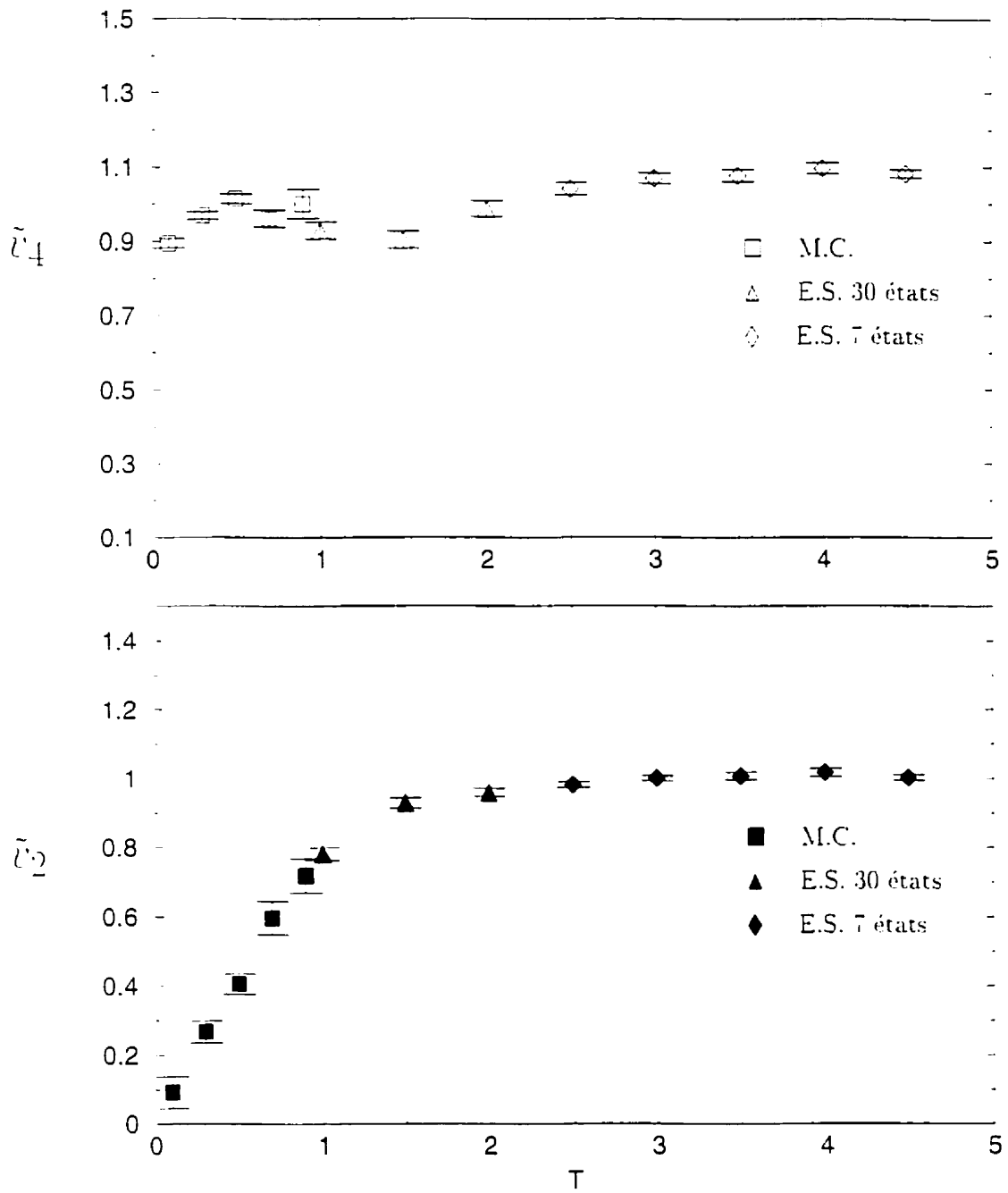


Figure 3.5: Les termes quadratique et quartique renormalisés du potentiel quartique. $V(q) = q^4$ avec $m = 1$ et $\hbar = 1$.

3.4.5 Double puits de potentiel et instantons quantiques

Depuis le milieu des années 70, certains aspects non-perturbatifs des théories de jauge, reliés à l'existence de configurations classiques des champs ayant des propriétés particulières, ont été étudiés. Les instantons forment un type de configurations intéressantes [57, 58]. Dans un premier cas, ils correspondent aux solutions auto-duales ou anti auto-duales des équations de Yang-Mills dans un espace euclidien. Les instantons doivent être inclus dans l'intégrale de chemin définissant la théorie, et contribuent aux différentes quantités physiques par des termes en $\exp(-8n\pi^2/g^2)$ (pour une contribution à n instantons) caractéristiques de l'effet tunnel. Ceci est à comparer aux termes en g^n générés par la série de perturbation. Les contributions des instantons ne sont pas toujours négligeables. Si les instantons ont joué un rôle dans la compréhension qualitative de la physique non-perturbative de la QCD (le confinement, la résolution du problème $U(1)$ [59]), ils n'ont pas permis d'effectuer des calculs quantitatifs. En fait, pour calculer les fonctions de Green, une intégration sur la taille de l'instanton est nécessaire et les grands instantons donnent en général une contribution infinie. On peut comprendre ce problème en se rappelant qu'à grande distance, la constante de couplage tend vers l'infini, et que dans ce régime, même une approximation non-perturbative mais de type semi-classique comme le calcul d'instantons n'est plus forcément valable. La quantification des instantons nécessite une approche non-perturbative. Ici, nous suggérons comment déterminer l'instanton quantique dans le contexte de la mécanique quantique [17, 18]. Nous considérons une particule à un degré de liberté de masse m interagissant avec un potentiel quartique ayant deux minima de profondeur égale (double puits de potentiel). Les deux minima sont l'analogie du vide dégénéré en théorie des champs. Le potentiel

$$V(q) = A^2(q^2 - a^2)^2 \quad (3.117)$$

a deux minima localisés à $q \pm a$. Nous avons choisi en particulier le potentiel

$$V(q) = \frac{1}{2} - q^2 + \frac{1}{2}q^4 \quad (3.118)$$

	\tilde{m}	\tilde{v}_0	\tilde{v}_1	\tilde{v}_2	\tilde{v}_3	\tilde{v}_4	interval
Fit MC	0.9959(1)	1.5701(54)	0.000(2)	-0.739(5)	0.000(2)	0.487(4)	[-1.2,+1.2]
Fit MC	0.9961(2)	1.5714(17)	0.000(2)	-0.747(10)	0.000(2)	0.489(7)	[-1.4,+1.4]
Fit MC	0.9961(1)	1.5732(11)	0.000(3)	-0.760(5)	0.000(3)	0.499(3)	[-1.6,+1.6]
Fit MC	0.9959(1)	1.5713(10)	0.000(2)	-0.747(4)	0.000(2)	0.495(2)	[-1.8,+1.8]
Fit MC	0.9959(1)	1.5744(11)	0.000(3)	-0.754(4)	0.000(2)	0.498(2)	[-2.0,+2.0]
Fit MC	0.9959(2)	1.5694(19)	0.000(2)	-0.739(6)	0.000(2)	0.492(3)	[-2.2,-2.2]
Fit MC	0.9964(2)	1.5718(16)	0.000(3)	-0.745(6)	0.000(2)	0.491(2)	[-2.4,+2.4]
Fit MC	0.9962(8)	1.5685(18)	0.000(2)	-0.740(7)	0.000(1)	0.492(3)	[-2.6,-2.6]
Fit MC	0.9963(2)	1.5731(7)	0.000(0)	-0.742(2)	0.000(2)	0.492(1)	[-2.8,-2.8]
Fit MC	0.9966(3)	1.5695(2)	0.000(4)	-0.744(8)	0.000(3)	0.492(2)	[-3.0,-3.0]
Moyenne	0.9961(2)	1.5710(17)	0.000(2)	-0.745(6)	0.000(2)	0.493(3)	

Tableau 3.3: Les paramètres renormalisés du double puits de potentiel. $V(q) = \frac{1}{2} - q^2 + \frac{1}{2}q^4$ avec $m = 1$ et $\hbar = 1$.

correspondant à $A = 1/\sqrt{2}$, $a = 1$. Nous avons pris $m = 1$ ($\hbar = 1$). Le double puits de potentiel possède un instanton comme solution de l'équation du mouvement classique dans un espace euclidien, avec les conditions initiales $q(t = -\infty) = -a$, $\dot{q}(t = -\infty) = 0$ [27], donné par

$$q_{inst}^cl(t) = a \tanh[\sqrt{2/m} A a t] \quad (3.119)$$

Cet instanton classique évolue du point $q = -a$ à $t = -\infty$ au point $q = +a$ à $t = +\infty$ (voir la **Figure 3.6**). La difficulté dans la détermination de l'instanton quantique est due aux relations d'incertitude d'Heisenberg. Il n'y a pas de solution quantique qui corresponde aux conditions initiales de l'instanton classique. On rencontre le même problème dans la définition de l'exposant de Lyapunov en chaos quantique, en conséquence de quoi, on ne

peut pas appliquer les concepts du chaos classique.

L'idée de l'action renormalisée ou l'action effective.

$$\tilde{S} = \int dt \left(\frac{1}{2} \tilde{m} \dot{q}^2 - \sum_{k=0}^4 \tilde{v}_k q^k \right) \quad (3.120)$$

nous permet de définir l'instanton quantique. Notons que des termes d'ordre supérieur devraient être inclus dans (3.120). Nous nous sommes restreints à un polynôme de degré quatre pour une question de simplicité dans le calcul numérique.

Les résultats de l'action renormalisée déterminée à $T = 0.5$ sont présentés dans le **Tableau. 3.3**. Les paramètres semblent être indépendants des conditions aux limites distribuées le long de l'intervalle $[-a, +a]$.

Les paramètres de l'action renormalisée en fonction de T sont présentés dans **Figure 3.7** et **Figure 3.8**. Dans le cas du double puits de potentiel, $E_0 = 0.568893$ et $T_{sc} = 1.7559$. La masse change légèrement dans la région $0 < T < T_{sc}$. Mais elle subit une chute dans la région $T_{sc} < T < 7$ et se stabilise à partir de $T > 7$. L'ensemble des paramètres converge asymptotiquement quand T/T_{sc} devient large. Dans ce régime, les paramètres renormalisés ne changent pas quand les conditions aux limites varient. Mais la région du temps T large est le régime de l'instanton évoluant de $t = -\infty$ à $t = +\infty$. Nous suggérons alors la définition suivante:

Définition de l'instanton quantique: L'instanton quantique est la solution de l'action renormalisée dans le régime de la convergence asymptotique avec le temps T .

Prenons par exemple $T = 0.5$, nous avons $\tilde{m} = 0.9961(2)$, $\tilde{v}_0 = 1.5710(17)$, $\tilde{v}_1 = 0.000(2)$, $\tilde{v}_2 = -0.745(6)$, $\tilde{v}_3 = 0.000(2)$, $\tilde{v}_4 = 0.493(3)$. En ajoutant une constante, le potentiel renormalisé peut être exprimé par

$$\tilde{V}(x) = \tilde{A}^2 (x^2 - \tilde{a}^2)^2 \quad (3.121)$$

où $\tilde{A}^2 = \tilde{v}_4$ et $\tilde{a}^2 = -\tilde{v}_2/(2\tilde{v}_4)$, donnant $\tilde{A} = 0.702(2)$ et $\tilde{a} = 0.869(6)$. Les minima du potentiel \tilde{V} sont localisés à $\pm\tilde{a}$. L'action renormalisée a un vide dégénéré, tout comme

l'action classique. Elle possède alors un instanton comme une solution donnée par

$$\begin{aligned} x_{\text{inst}}^{T=0.5}(t) &= \tilde{a} \tanh[\sqrt{2/\tilde{m}} \tilde{A} \tilde{a} t] \\ &= 0.869(6) \tanh[0.865(3) t] \end{aligned} \quad (3.122)$$

De façon similaire, nous avons un instanton pour chaque valeur de T . L'instanton quantique est obtenu dans la limite asymptotique $T \rightarrow \infty$. L'évolution de l'instanton avec la variation de T est présentée à la **Figure 3.6**. À partir de $T > 7$, nous observons une convergence de la solution et un changement considérable entre l'instanton classique ($T = 0$) et l'instanton quantique ($T > 9$). L'action correspondant à chaque instanton est présentée à la **Figure 3.9**. L'action de l'instanton classique est de l'ordre de $\hbar = 1$ alors que l'action de l'instanton quantique est plus petite d'un ordre de grandeur un. Cela est dû au fait que la hauteur de la barrière de potentiel de l'action quantique est moins élevée.

3.4.6 Interprétation

Afin de comprendre la dépendance des paramètres renormalisés en temps T , il faut revenir à la définition (3.50) de la fonctionnelle génératrice $Z[J]$. D'après cette définition $Z[J]$ est proportionnelle à l'amplitude de transition entre l'état du vide à l'instant $T' = -\infty$ et l'instant $T = +\infty$

$$Z[J] \propto \langle 0|0 \rangle^J = \lim_{\substack{T \rightarrow \infty \\ T' \rightarrow -\infty}} \langle q', T' | q, T \rangle^J \quad (3.123)$$

où $J(t)$ est une source différente de zéro uniquement entre deux instants t et t' tels que $-T' < t' < t < T$.

Dans nos calculs numériques, nous avons considéré l'amplitude de transition de la position q à la position q' dans un temps T . Les paramètres renormalisés dépendraient alors de la grandeur T .

D'après la formule de Feynman-Kac, le comportement asymptotique du propagateur

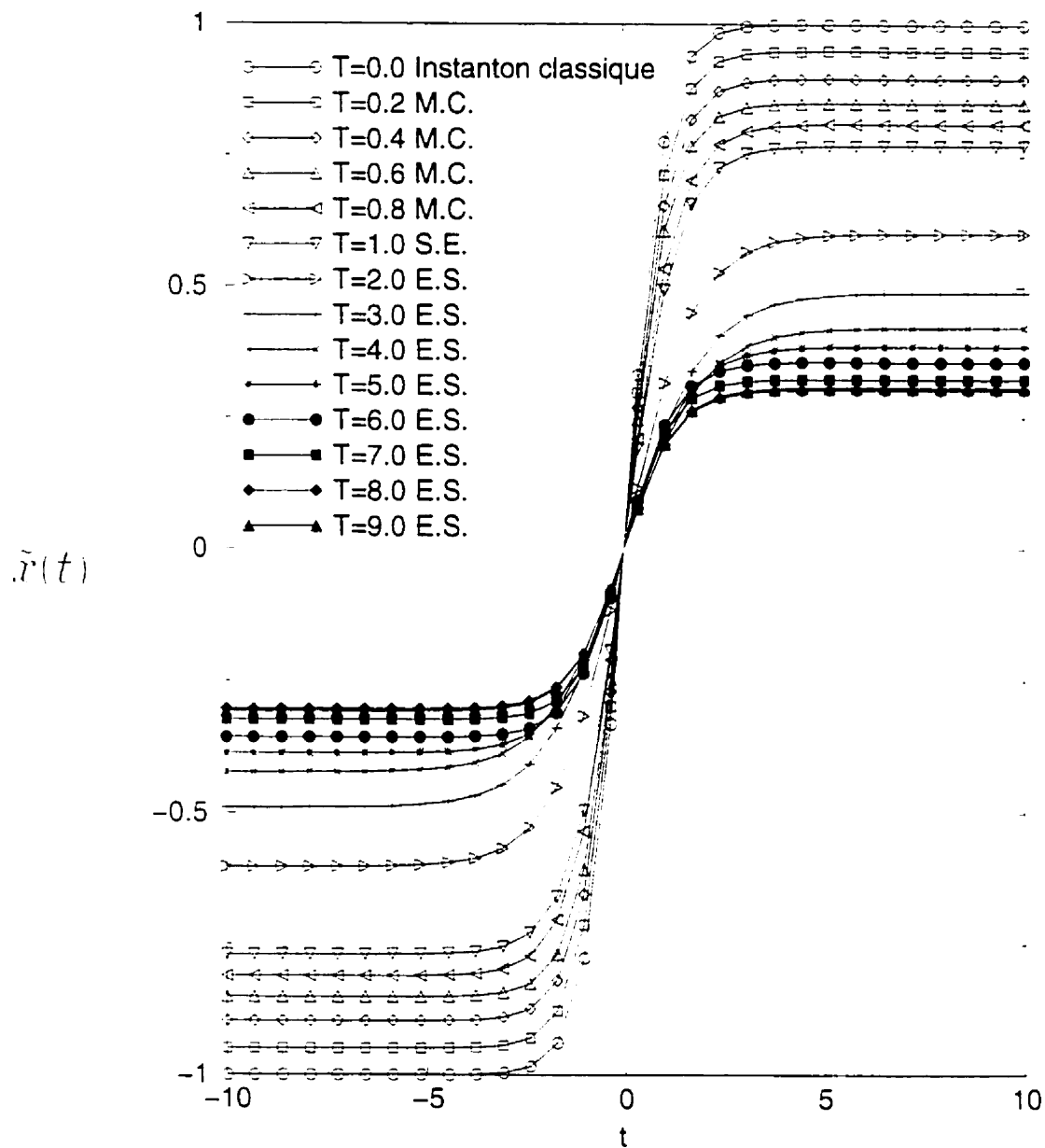


Figure 3.6: Transition de l'instanton classique à l'instanton quantique.

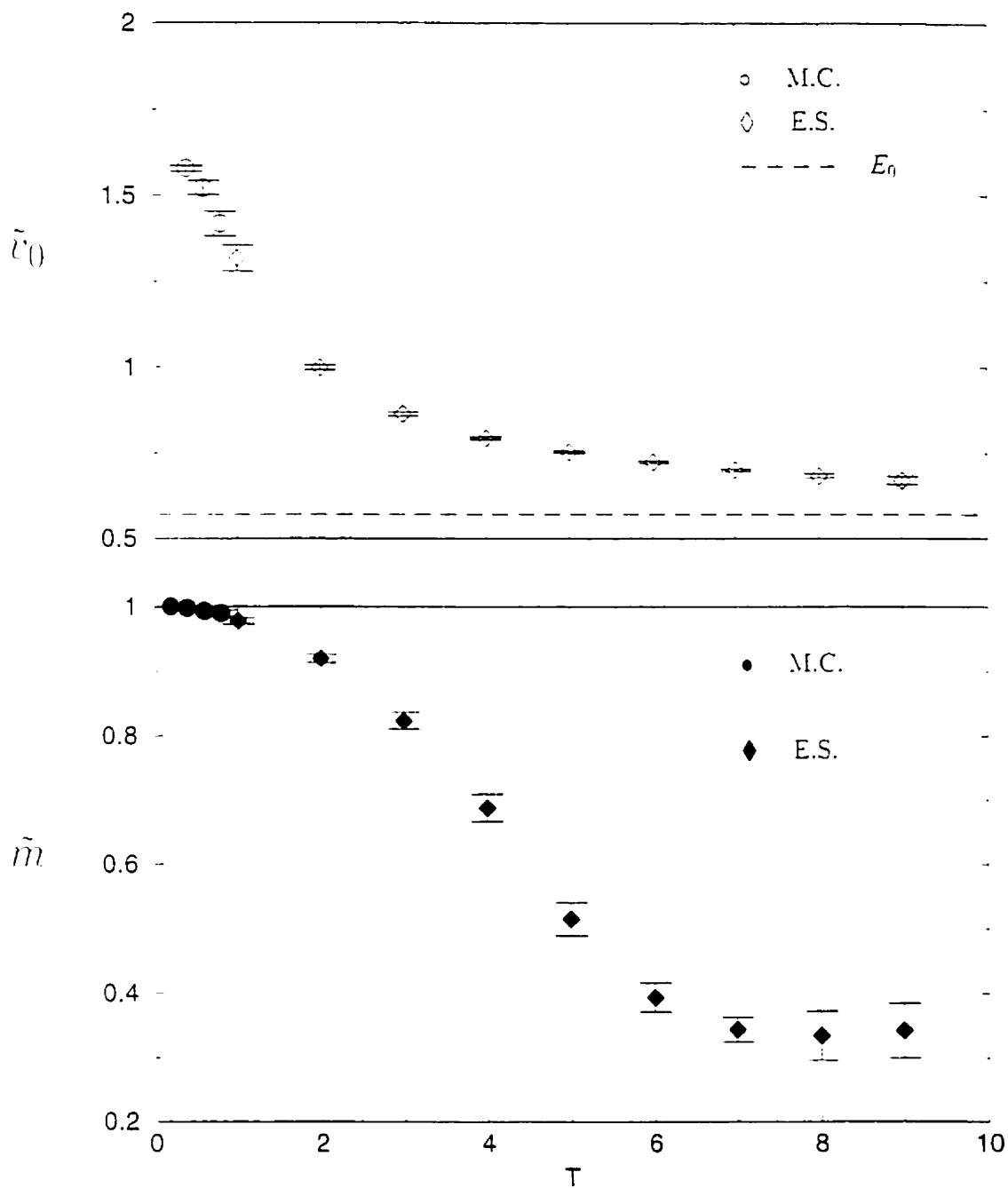


Figure 3.7: La masse renormalisée et le terme constant du double puits de potentiel quartique. $V(q) = \frac{1}{2} - q^2 + \frac{1}{2}q^4$ avec $m = 1$ et $\hbar = 1$.

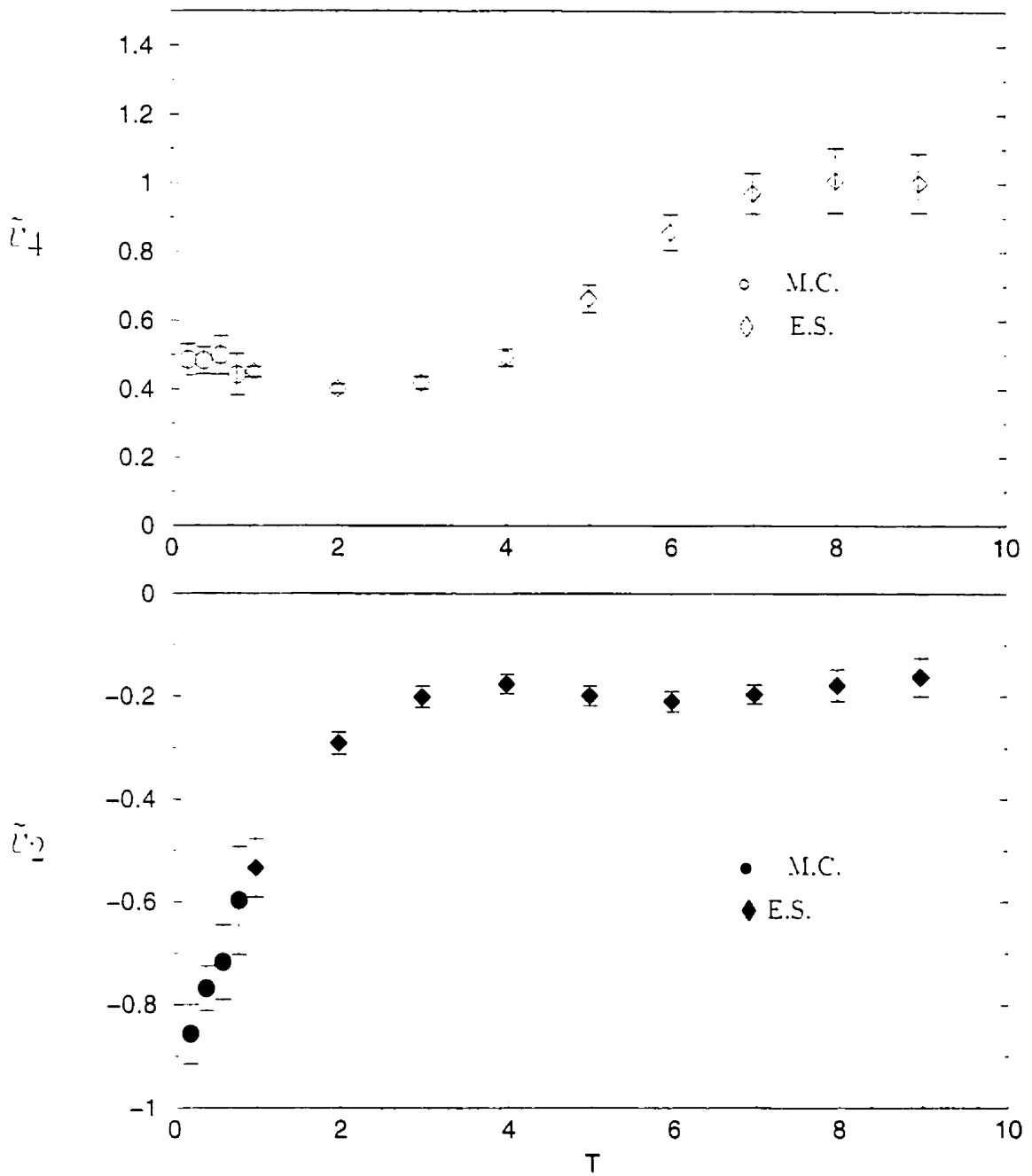


Figure 3.5: Les termes quadratique et quartique renormalisés du double puits de potentiel. $V(q) = \frac{1}{2} - q^2 + \frac{1}{2}q^4$ avec $m = 1$ et $\hbar = 1$.

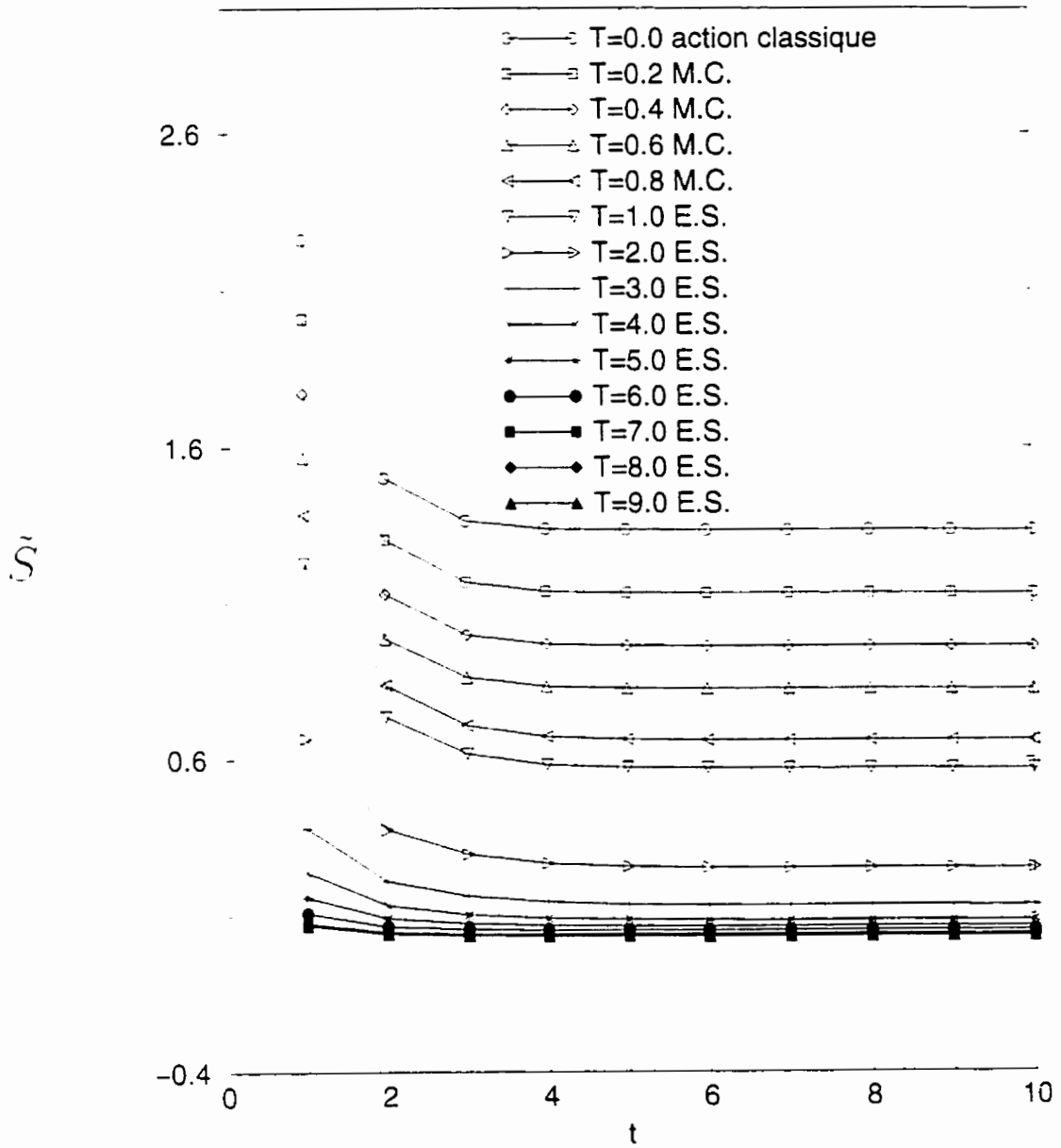


Figure 3.9: Transition de l'action de l'instanton classique à l'action de l'instanton quantique..

est donné par

$$G(q, T; q_0, 0) \sim_{T \rightarrow \infty} \psi_0(q) \exp(-E_0 T/\hbar) \psi_0(q_0) \quad (3.124)$$

dans un temps imaginaire. Dans (3.124), E_0 est l'énergie fondamentale du système quantique et ψ_0 la fonction d'onde qui lui correspond. Dans le cas de l'oscillateur harmonique, d'après (3.29) nous avons,

$$\tilde{v}_0 \sim_{T \rightarrow \infty} \hbar\omega/2 = E_0 \quad (3.125)$$

Concernant le potentiel quartique, les résultats numériques montrent que \tilde{v}_0 a un comportement lisse en fonction de T . Le fit \tilde{v}_0 par la fonction $A + B/T$ donne $\tilde{v}_0 \rightarrow 0.6686$ qui est un résultat compatible avec

$$\tilde{v}_0 \sim_{T \rightarrow \infty} E_0 \quad (3.126)$$

Dans le cas du double puits de potentiel, le fit $\tilde{v}_0 \sim A + B/T$ donne le comportement asymptotique $\tilde{v}_0 \rightarrow 0.5677$ qui est aussi compatible avec (3.126).

La définition de l'action renormalisée (3.103) et la formule de Feynman-Kac donnent

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^T dt \tilde{v}_0\right) &= \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^T dt \left[\frac{\tilde{m}}{2} \dot{\tilde{q}}_{cl}^2 + \tilde{V}(\tilde{q}_{cl})\right]\right) \\ &\xrightarrow{T \rightarrow \infty} \psi_0(q) \exp(-E_0 T/\hbar) \psi_0(q_0) \end{aligned} \quad (3.127)$$

En excluant le terme \tilde{v}_0 , (3.126) et (3.127) impliquent que l'action renormalisée tend vers une limite asymptotique quand T est large,

$$-\frac{1}{\hbar} \int_0^T dt \left[\frac{\tilde{m}}{2} \dot{\tilde{x}}_{cl}^2 + \tilde{V}(\tilde{x}_{cl})\right] \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \ln(\psi_0(x) \psi_0(x_0)) \quad (3.128)$$

Ceci constitue un argument heuristique de la convergence de \tilde{S} avec le temps T qui fait partie de nos résultats numériques.

Les résultats du formalisme de l'action effective présentés à la section 3.3 donnent le comportement des paramètres renormalisés à la limite asymptotique $T \rightarrow \infty$. En

particulier, les résultats (3.99) montrent comment les paramètres renormalisés du potentiel anharmonique sont indépendants du temps T .

La convergence avec le temps T des paramètres renormalisés calculés numériquement est un résultat important de ce travail.

3.5 Une nouvelle approche du chaos quantique

Les systèmes classiques ayant plus d'un degré de liberté présentent une variété très riche de phénomènes physiques, en particulier, un comportement chaotique. Considérons le système décrit par l'action [60]

$$S = \int dt \left(\frac{1}{2} m (\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2) - \frac{1}{2} m \omega^2 (q_1^2 + q_2^2) - g q_1^2 q_2^2 \right) \quad (3.129)$$

Ce système a quatre paramètres libres: m , ω , g et l'énergie E . Par contre, la transformation $t \rightarrow t/\omega$, $q_i \rightarrow q_i \sqrt{m\omega^2/g}$, $\dot{q}_i \rightarrow \dot{q}_i \sqrt{m\omega^4/g}$, pour $i = 1, 2$, conduit à

$$S \rightarrow \frac{m^2 \omega^4}{g} \int dt \left[\frac{1}{2} (\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2) - \frac{1}{2} (q_1^2 + q_2^2) - q_1^2 q_2^2 \right] \quad (3.130)$$

où, maintenant, \dot{q}_i , q_i et t sont sans dimension. L'énergie du système (3.129) est alors $E = (m^2 \omega^4/g) \varepsilon$, où ε est une énergie sans dimension associée au lagrangien sans dimension $L = \frac{1}{2} (\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2) - \frac{1}{2} (q_1^2 + q_2^2) - q_1^2 q_2^2$. Donc, ε est le seul paramètre libre du système sous notre considération. Les équations du mouvement

$$\ddot{q}_1 = -q_1(1 - 2q_2^2) \quad (3.131)$$

$$\ddot{q}_2 = -q_2(1 + 2q_1^2) \quad (3.132)$$

peuvent être intégrées numériquement en utilisant la méthode standard de Runge-Kutta d'ordre quatre ou plus [61]. Une description qualitative de leurs solutions basée sur la construction des sections de Poincaré et l'évaluation de l'exposant de Lyapunov a été faite [62]. Le degré de chaoticité dépend du rapport entre le nombre des orbites régulières et l'énergie ε .

Le système quantique correspondant pourrait être décrit par une approche basée sur l'action renormalisée. Conformément à notre conjecture, il y a une action \tilde{S} correspondant à l'action classique S donnée par (3.129) et toutes les amplitudes de transitions quantiques pourraient être exprimées par une somme sur les chemins classiques correspondant à l'action renormalisée. Nous pouvons alors appliquer la théorie du chaos classique au système décrit par l'action \tilde{S} afin de déterminer s'il exhibe un comportement chaotique. Comme \tilde{S} décrit l'aspect quantique, nous suggérons le critère suivant pour décider si l'oscillateur anharmonique 2-D quantique présente un comportement chaotique:

Définition du chaos quantique: Considérons un système classique, décrit par une action classique S . Le système quantique qui lui correspond exhibe un comportement chaotique si l'action quantique \tilde{S} , dans le régime de la convergence asymptotique avec le temps, exhibe un comportement chaotique.

L'action renormalisée \tilde{S} décrivant le système quantique correspondant à l'oscillateur anharmonique 2-D est donnée par

$$\tilde{S} = \int dt \left(\frac{1}{2} Z_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j - \tilde{V}(\mathbf{q}) \right) \quad (3.133)$$

où $\mathbf{q} = (q_1, q_2)$ et $\dot{\mathbf{q}} = (\dot{q}_1, \dot{q}_2)$. La détermination à l'ordre d'une boucle de $\tilde{V}(\mathbf{q})$ en appliquant l'approximation de la phase stationnaire nous guidera sur la paramétrisation de \tilde{S} dont nous devons nous servir dans le calcul numérique.

3.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons calculé numériquement l'action quantique dans le cas des systèmes à un degré de liberté. Dans le cas du potentiel anharmonique, les résultats numériques étaient en bonne concordance avec les prédictions de la théorie des perturbations. Concernant le potentiel quartique, les paramètres de l'action quantique étaient complètement différents de leurs valeurs classiques. En effet, les fluctuations quantiques

changent le comportement classique d'une manière considérable. Le même phénomène a été observé dans le cas des instantons interprétés comme des solutions du double puits de potentiel.

Chapitre 4

Formulation hamiltonienne de la QCD sur un réseau bidimensionnel

La nature semble tirer profit des représentations mathématiques simples des lois de symétrie. Un profond sentiment de respect à l'égard de la puissance des lois de symétrie ne manque jamais de se développer lorsqu'on réfléchit à l'élégance et à l'étonnante perfection d'un raisonnement mathématique, surtout lorsqu'on le compare à la complexité et à l'étonnante portée de ses conséquences physiques.

C. N. YANG, Discours lors de la réception du prix Nobel.

Dans ce chapitre, nous étudions la QCD en deux dimensions ou encore le modèle de 't Hooft. Plus précisément, nous investiguons la version discrète de ce modèle en appliquant une approche hamiltonienne [19, 20]. Dans cette formulation, le temps est traité comme une variable continue, mais l'espace est discrétisé. Nous appliquerons la notion d'algorithme amélioré qui consiste à réduire l'erreur due à la discrétisation sans diminuer la valeur du pas du réseau en reformulant l'expression de l'hamiltonien décrivant le modèle étudié sur le réseau.

4.1 Discrétisation de la QCD

Dans le but de calculer numériquement les amplitudes de transition, nous devons discrétiser la QCD. Cette discrétisation devrait se faire de manière à préserver l'invariance de jauge locale. Le maintien de la symétrie de jauge garantit l'unitarité de la matrice S . Cette formulation a été complétée par Wilson en 1974 [63].

4.1.1 Description sommaire de la QCD

L'action euclidienne de la QCD décrit l'interaction des gluons avec un ensemble de champs fermioniques ψ_I , les quarks. Elle est de la forme:

$$S_E = \sum_{I=u,d,s,c,\dots} \int \bar{\psi}_I (\not{D} + m_I) \psi_I dx^4 - \frac{1}{2} \int \text{Tr}(F_{\mu\nu} F_{\mu\nu}) dx^4 \quad (4.1)$$

où l'intégrale est évaluée sur l'espace euclidien \mathbb{R}^4 . $\not{D} = D_\mu \gamma_\mu$ avec γ_μ les matrices de Dirac satisfaisant $\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu}$ et D_μ la dérivée covariante, exprimée en terme de champs de jauge $A_\mu = A_\mu^a T^a$,

$$D_\mu = \partial_\mu - ig A_\mu \quad (4.2)$$

Les matrices T^a sont les générateurs de l'algèbre de Lie $su(3)$ du groupe de Lie $SU(3)$

$$[T^a, T^b] = if^{abc} T^c, \quad \text{tr}(T^a T^b) = \frac{1}{2} \delta_{ab} \quad (4.3)$$

Le principe d'invariance de jauge associe à chaque générateur de la base de l'algèbre de jauge une connexion ou un champ de jauge A_μ^a . Les quarks $\bar{\psi}_I$, avec un indice de couleur implicite forment un triplet de couleurs et appartiennent à la représentation fondamentale du groupe de jauge. Finalement, le champ de force ou la courbure est donné par

$$F_{\mu\nu} = F_{\mu\nu}^a T^a = \frac{i}{g} [D_\mu, D_\nu] = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu - ig [A_\mu, A_\nu] \quad (4.4)$$

¹ La relation entre les matrices de Dirac dans un espace minkowskien et un espace euclidien est de la forme $\gamma_{2,3}^E \equiv -i\gamma_{2,3}^M$, $\gamma_4^E \equiv -i\gamma_4^M \equiv \gamma_0^M$ avec $\gamma_\mu = \gamma_\mu^E = \gamma_\mu^M$.

Une transformation de jauge locale $SU(3)$ est décrite par l'élément $V(x) \in SU(3)$ ($V^{-1} = V^\dagger$, $\det(V) = 1$) dépendant de l'espace-temps:

$$\psi_I \rightarrow V(x)\psi_I \quad \bar{\psi}_I(x) \rightarrow \bar{\psi}_I(x)V^{-1}(x) \quad (4.5)$$

$$A_\mu(x) \rightarrow V(x)A_\mu(x)V^{-1}(x) + \frac{i}{g}V(x)\partial_\mu V^{-1}(x) \quad (4.6)$$

$$F_{\mu\nu}(x) \rightarrow V(x)F_{\mu\nu}(x)V^{-1}(x) \quad (4.7)$$

$$[D_\mu\psi_I](x) \rightarrow V(x)[D_\mu\psi_I](x) \quad (4.8)$$

À l'aide de (4.7) et (4.8), on montre que S_E est invariante sous la transformation de jauge.

Introduisons maintenant l'objet suivant

$$L(x, y) = P \exp\left\{ig \int_y^x dz_\mu A_\mu(z)\right\} \quad (4.9)$$

appelé la ligne de Wilson, partant de x et aboutissant à y . P signifie produit ordonné, par exemple, $A_\mu(x)$ est toujours à gauche de $A_\mu(y)$. La transformation de jauge a la propriété d'être indépendante du chemin d'intégration, elle ne dépend que des extrémités de L

$$L(x, y) \rightarrow V(x)L(x, y)V^{-1}(y) \quad (4.10)$$

La ligne de Wilson transporte l'action du groupe de jauge dans l'espace des couleurs d'un point à l'autre de façon à ce que la quantité

$$\bar{\psi}_I(x)L(x, y)\psi_I(y) \quad (4.11)$$

soit un invariant de jauge. Une autre quantité invariante de jauge est la fameuse boucle de Wilson

$$\text{Tr}[L(x, x)] \rightarrow \text{Tr}[V(x)L(x, x)V^{-1}(x)] = \text{Tr}[L(x, x)] \quad (4.12)$$

À l'aide de (4.11) et (4.12), nous pouvons en principe discrétiser la QCD en préservant l'invariance de jauge. Nous pouvons simplement mettre les quarks et les champs de jauge sur les sites d'un réseau. Mais comme les champs de jauge transmettent l'information sur la transformation de jauge d'une position à l'autre, ils seront définis sur les liens (*links*)

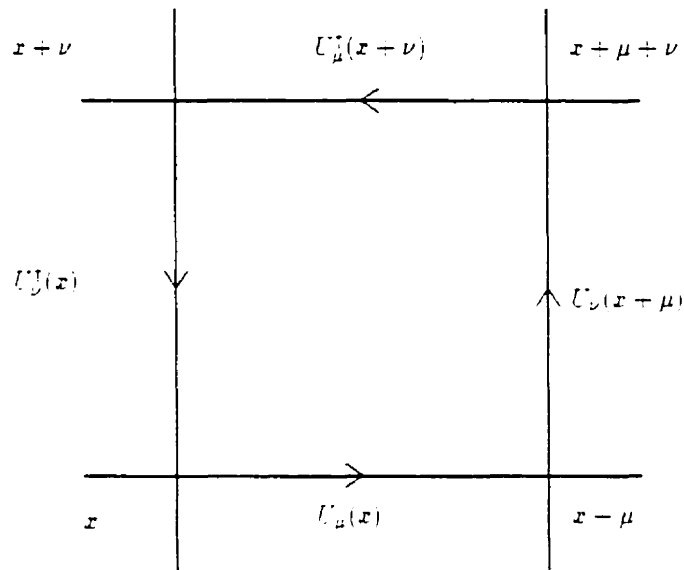


Figure 4.1: Une plaquette élémentaire.

connectant les sites du réseau. En fait, il y a plusieurs façons de discrétiser l'espace-temps [64]. Nous choisissons un réseau hypercubique, communément utilisé, que nous définissons par:

$$\Lambda = a\mathbb{Z}^4 = \{x : x_\mu/a \in \mathbb{Z}\} \quad (4.13)$$

La notation que nous adoptons est présentée dans la **Figure 4.1**.

La discrétisation des fermions pose des problèmes qui ne sont pas directement liés à la symétrie de jauge. Nous considérons alors en premier lieu la partie de l'action ne faisant intervenir que les degrés de liberté de jauge. La version discrétisée de cette action est construite à partir de l'élément du groupe $SU(3)$, $U(x, x + \hat{\mu}) \equiv U_\mu(x)$, associé au lien entre le site $x \in \Lambda$ et le site $x + \mu \in \Lambda$:

$$\begin{aligned} U(x, x + \hat{\mu}) &\sim L(x, x + a\hat{\mu}) \\ &= e^{igaA_\mu(x + \frac{\hat{\mu}}{2})} \\ &= 1 + ig a_\mu A_\mu(x + \frac{\hat{\mu}}{2}) + O(a^2) \end{aligned} \quad (4.14)$$

Après la discrétisation, les champs de jauge A_μ , éléments de l'algèbre du groupe de jauge, sont remplacés par les éléments du groupe de jauge, les variables liens U . L'expansion dans la dernière ligne est utile pour comprendre la signification de U et pour prendre la limite classique du continu.

Les propriétés de la transformation de jauge des liens $U_\mu(x)$ sont les mêmes que celles qui correspondent à L

$$U_\mu(x) \rightarrow V_x U_\mu(x) V_{x+\hat{\mu}}^\dagger \quad (4.15)$$

où $V_x \equiv V(x) \in SU(3)$ sont les matrices de transformation de jauge définies sur les sites du réseau. Nous avons adopté la notation abrégée $x - \mu$ qui signifie $x - a\hat{\mu}$. En correspondance avec le résultat dans le continu $L(x, y) = L(y, x)^\dagger$, nous introduisons la variable

$$U(x, x - \hat{\mu}) \equiv U_{-\mu}(x) = e^{-ia_\mu A_\mu(x - \frac{\hat{\mu}}{2})} = U^\dagger(x - \hat{\mu}, x) \quad (4.16)$$

associée au lien entre x et $x - \mu$. Notons que nous pouvons multiplier les liens U le long d'une courbe fermée et prendre la trace. Nous obtenons alors un objet invariant sous les transformations de jauge, puisque $V_x V_x^\dagger = 1$. C'est la version de la boucle de Wilson sur le réseau.

Nous pouvons construire une action de jauge pure sur le réseau en utilisant une boucle de Wilson. Par exemple, une boucle autour d'un carré élémentaire ou "plaquette"

$$P_{\mu\nu} = U_\mu(x) U_\nu(x + \hat{\mu}) U_\mu^\dagger(x + \hat{\nu}) U_\nu^\dagger(x) \quad (4.17)$$

Il est raisonnable qu'une telle boucle soit reliée à $F_{\mu\nu}$, parce que le champ de force est la courbure associée à la connexion A_μ . La limite classique du continu de la plaquette $P_{\mu\nu}$ résultant de sa définition est de la forme

$$P_{\mu\nu} = 1 + i g a^2 F_{\mu\nu} - \frac{g^2}{2} a^4 (F_{\mu\nu}^2) + O(a^6) \quad (4.18)$$

Nous pouvons alors utiliser la plaquette $\mu\nu$ comme une version discrète des composantes du champ de force, $F_{\mu\nu}$. Étant donné que nous sommes intéressés par un objet invariant

de jauge, si nous prenons la trace, nous avons:

$$\text{Re Tr} P_{\mu\nu} = \mathcal{N}_c - \frac{g^2}{2} a^4 \text{Tr}(F_{\mu\nu}^2) + O(a^6) \quad (4.19)$$

où $\mathcal{N}_c = 3$ est le nombre de couleurs. Nous avons alors:

$$\sum_{\square} \frac{2}{g^2} (\mathcal{N}_c - \text{Re Tr} \square) \cong \int d^4x \sum_{\mu\nu} \frac{1}{2} \text{Tr} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} + O(a^2) \quad (4.20)$$

Le facteur 2 est dû au nombre de plaquettes par site, 6 et au nombre de termes parcourant la somme dans (4.20), 12.

Il est usuel de remplacer la constante de couplage par $\beta = \frac{2\mathcal{N}_c}{g^2}$, de façon à ce que

$$S_{\beta} = -\beta \sum_{\square} \frac{\text{Re Tr} \square}{\mathcal{N}_c} + \text{terme constant non pertinent} \quad (4.21)$$

S_{β} est appelé "action de Wilson". Il est important de réaliser que le choix de la plus petite boucle pour définir l'action n'a rien de spécial. Une boucle rectangulaire contenant, dans son expansion, des termes proportionnels aux combinaisons linéaires des composantes de $(F_{\mu\nu})^2$ fonctionnera aussi. En construisant des combinaisons appropriées de boucles, nous pouvons obtenir l'action dans le continu. L'avantage de la plus petite boucle est que les corrections proportionnelles aux puissances du pas du réseau sont plus faibles par rapport à celles d'une boucle plus large.

À cette jonction, notons qu'à cause de la discrétisation, l'erreur dans (4.20) est de l'ordre a^2 . Nous reviendrons plus tard à la notion de l'action améliorée (*Improvement action*) qui consiste à réduire l'erreur due à la discrétisation sans diminuer la valeur du pas du réseau a , en ajoutant dans l'action S_{β} , des opérateurs composites non pertinents au sens du groupe de renormalisation. Ce procédé d'amélioration de l'action définie sur le réseau permet d'accélérer la convergence vers la limite du continu.

Pour compléter la définition, nous devons spécifier la mesure dans l'intégrale de chemin. Chaque variable lien est intégrée en utilisant la mesure de Haar définie sur

le groupe de jauge considéré comme une variété différentielle. Cette mesure satisfait (V et W sont des éléments arbitraires du groupe)

$$\int dU F(U) = \int dU F(UV) = \int dU F(WU) \quad (4.22)$$

Avec cette définition, l'intégrale fonctionnelle

$$Z_{\text{gauge}} = \int \prod_{\text{links}} dU_{n,\mu} \exp \left(\beta \sum_{\square} \frac{1}{N_c} \text{Re Tr} \square \right) \quad (4.23)$$

est invariante sous les transformations de jauge. Nous avons accompli une régularisation non-perturbative de la théorie de jauge pure préservant la symétrie de jauge. Par contre, nous avons sacrifié l'invariance euclidienne: rotation et translations (le groupe euclidien E_4). Nous souhaitons que ces symétries soient restituées quand on s'approchera de la limite du continu.

La théorie de jauge pure $SU(3)$ est différente de la QCD. Mais, c'est une théorie des champs non-triviale, ayant des propriétés en commun avec la QCD. En particulier, son spectre se compose de particules massives baptisées *glueballs*. Il s'agit d'états liés de gluons ayant une interaction propre. Des progrès considérables ont été réalisés dans la simulation numérique de cette théorie [65].

4.1.2 Limite du continu et production des nombres en MeV

Au cours des simulations numériques, on choisit une valeur de $\beta = 6/g^2$ et non pas la valeur du pas du réseau. Le résultat du calcul est l'ensemble des masses exprimées en unités du pas du réseau: $am_{\text{glue}}(a)$. On détermine la valeur de a en fixant une masse à partir de l'expérience. Toutes les autres masses et les quantités physiques en général sont alors prédites.

Si nous choisissons différentes valeurs de β (i.e. pour $g^2(a)$), nous obtenons alors une série de valeurs de a . Pour s'approcher de la limite du continu, nous ajustons β de façon

à ce que $a \rightarrow 0$. En faisant cela, la masse calculée sur le réseau s'annule $am_{\text{glue}} \rightarrow 0$. Le comportement asymptotique de la fonction de corrélation est

$$C(t) \propto \exp(-am_{\text{glue}}t) \quad (4.24)$$

Il est conventionnel en mécanique statistique de décrire ce comportement en terme de divergence de la longueur de corrélation exprimée en unités du pas du réseau:

$$C(t) \propto \exp(-t/\xi), \quad \xi = 1/(am_{\text{glue}}) \rightarrow \infty \quad (4.25)$$

L'endroit où ξ diverge est appelé le point critique, et c'est au voisinage de ce point qu'on prend la limite du continu.

La théorie de jauge pure et la QCD avec quelques saveurs sont asymptotiquement libres. Nous connaissons alors le point critique situé à $g^2 = 0$, $\beta = \infty$. La dépendance de g^2 en a est déterminée quand g^2 est faible en appliquant la théorie des perturbations. Nous arrivons au résultat familier:

$$g^2 \propto 1/\ln(1/a) \quad (4.26)$$

En inversant (4.26), nous avons

$$a = (1/\Lambda) \exp(-1/2\beta_0 g^2) \quad (4.27)$$

de sorte que $a \rightarrow 0$ pour $g^2 \rightarrow 0$. Dans (4.27), β_0 est le coefficient du flot du groupe de renormalisation à l'ordre le plus bas (la fonction-beta). Ce que nous ne connaissons pas a priori est la constante de proportionnalité $1/\Lambda$. Elle devrait être déterminée numériquement. Une fois Λ fixé, nous sommes alors capables de prédire la variation de a avec g^2 quand g^2 est suffisamment faible. Ceci fonctionne très bien tant qu'on choisit un schéma de renormalisation approprié pour définir la constante de couplage [66].

4.1.3 Discrétisation des fermions

La discrétisation de l'action fermionique.

$$S_F = \int \bar{\psi} (\not{D}_E + m) \psi dx^4 \quad (4.28)$$

semble à première vue directe². Pour discrétiser S_F nous mettons les quarks et les anti-quarks sur les sites, $\psi(x) \rightarrow \psi_x$, et appliquons la transformation de jauge:

$$\psi_x \rightarrow V_x \psi_x, \quad \bar{\psi}_x \rightarrow \bar{\psi}_x V_x^\dagger \quad (4.29)$$

Pour obtenir une dérivée discrète, nous devons séparer les champs ψ , $\bar{\psi}$ et construire un invariant de jauge à l'aide des variables liens. En choisissant, par exemple, une dérivée symétrique sur le réseau et en adoptant la notation $\psi_x \equiv \psi(x)$, nous avons

$$\bar{\psi}(x) D_\mu \psi(x) \longrightarrow \frac{1}{2a} \bar{\psi}(x) [U_\mu(x) \psi(x + \hat{\mu}) - U_\mu^\dagger(x - \hat{\mu}) \psi(x - \hat{\mu})] \quad (4.30)$$

Nous retrouvons la dérivée covariante dans la limite du continu, $a \rightarrow 0$, en faisant un développement de Taylor de $U_\mu(x)$ et de $\psi(x \pm \hat{\mu})$ en puissances du pas du réseau a . En ne gardant que les termes d'ordre le plus bas en a , (4.30) devient

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2a} \bar{\psi}(x) \left[\left(1 + iag A_\mu(x + \frac{\hat{\mu}}{2}) + \dots\right) (\psi(x) + a\psi'(x) + \dots) - \right. \\ & \quad \left. \left(1 - iag A_\mu(x - \frac{\hat{\mu}}{2}) + \dots\right) (\psi(x) - a\psi'(x) + \dots) \right] \\ &= \bar{\psi}(x) (\partial_\mu + \frac{a^2}{6} \partial_\mu^3 + \dots) \psi(x) \\ & \quad - ig \bar{\psi}(x) \left[A_\mu + \frac{a^2}{2} \left(\frac{1}{4} \partial_\mu^2 A_\mu + (\partial_\mu A_\mu) \partial_\mu + A_\mu \partial_\mu^2 \right) + \dots \right] \psi(x) \end{aligned} \quad (4.31)$$

À des termes d'ordre a^2 près, nous obtenons la dérivée covariante usuelle. Avec un choix de la dérivée covariante (4.30), l'action fermionique sur le réseau est de la forme

$$\begin{aligned} S_N(\bar{\psi}, \psi, U) &= \frac{1}{2a} \sum_{x,\mu} \bar{\psi}(x) \gamma_\mu [U_\mu(x) \psi(x + \hat{\mu}) - U_\mu^\dagger(x - \hat{\mu}) \psi(x - \hat{\mu})] \\ & \quad + \sum_x m \bar{\psi}(x) \psi(x) \end{aligned} \quad (4.32)$$

²Nous avons omis l'indice I spécifiant les différents saveurs.

Pour des raisons que nous allons préciser, (4.32) est l'action fermionique naïve. La fonction de partition de la QCD est alors

$$Z_{\text{QCD}} = \int \prod_{\text{links}} dU_{x,\mu} [d\psi][d\bar{\psi}] \exp [-S_g(U) - S_N(\bar{\psi}, \psi, U)] \quad (4.33)$$

Étant donné que le jacobien d'une transformation unitaire est égal à un, la mesure $[d\psi][d\bar{\psi}]$ est invariante sous les transformations de jauge et par suite Z_{QCD} l'est aussi.

L'action (4.32) donne lieu au problème suivant: dans un espace de dimensions d , elle représente 2^d fermions de Dirac dégénérés plutôt qu'un. Cette prolifération des degrés de liberté est connue sous le nom "du problème de dédoublement". Ce problème n'a rien à voir avec les champs de jauge. Pour en discuter, nous considérons des fermions libres définis sur le réseau. Le spectre des états peut être déterminé en analysant les pôles de la fonction à deux points dans l'espace des impulsions. Ils sont localisés à l'impulsion complexe euclidienne: $k^2 = -m^2$ où m est la masse de l'état.

Pour évaluer la fonction à deux points, i.e. le propagateur, rappelons la formule de l'intégrale de chemin euclidienne sur des fermions traités comme des variables grassmanniennes:

$$Z = \int [d\psi][d\bar{\psi}] e^{-\bar{\psi}(\mathcal{D}-m)\psi} = \det(\mathcal{D} - m) \quad (4.34)$$

$$G(x, y) = Z^{-1} \int [d\psi][d\bar{\psi}] e^{-\bar{\psi}(\mathcal{D}+m)\psi} \psi(x) \bar{\psi}(y) = [\frac{1}{\mathcal{D}+m}]_{xy} \quad (4.35)$$

Dans les simulations numériques, on ne travaille pas directement avec des variables grassmanniennes, on évalue plutôt les déterminants et les propagateurs des membres de droite de (4.34) et de (4.35).

Pour diagonaliser l'opérateur \mathcal{D} , nous passons à l'espace des impulsions. À cause de la périodicité sur le réseau, nous nous restreignons à la première zone de Brillouin

$$\psi(x) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} e^{ikx} \psi(k), \quad \bar{\psi}(x) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} e^{-ikx} \bar{\psi}(k) \quad (4.36)$$

En fonction de ces champs, nous avons

$$S_N = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \bar{\psi}(k) (i \sum_{\mu} s_{\mu} \gamma_{\mu} + m) \psi(k) \quad (4.37)$$

avec $s_{\mu} = \sin k_{\mu}$. Le propagateur est alors donné par

$$G(k) = \frac{1}{i\hat{k} + m} = \frac{-i\hat{k} + m}{s^2 + m^2} \quad (4.38)$$

Il est utile de restituer le facteur a , nous avons alors $m = am_{phys}$ et $k = ak_{phys}$. Dans la limite du continu $a \rightarrow 0$, avec la masse physique des quarks fixe, $m \rightarrow 0$. Il y a alors un pôle proche de $k = 0$. Le développement $s_{\mu} = ak_{\mu,phys}(1 + O(a^2))$, donne:

$$aG(k) = \frac{-i\gamma_{\mu}k_{\mu,phys} + m_{phys}}{k_{phys}^2 + m_{phys}^2} \quad (4.39)$$

À un facteur de normalisation près, (4.39) est le propagateur d'un fermion libre. Le pôle de ce propagateur est localisé à $k_{phys}^2 = -m_{phys}^2$, représentant le fermion usuel de la limite du continu.

La fonction s_{μ} s'annule aussi bien en $k_{\mu} = 0$ qu'en $k_{\mu} = \pi$. En introduisant les nouvelles variables $k'_1 = \pi - k_1$, $k'_\mu = k_{\mu}$, $\mu = 2 - 4$, le propagateur au voisinage de l'impulsion $(\pi, 0, 0, 0)$, devient:

$$G(k') \approx \frac{-i \sum_{\mu} k'_{\mu} \gamma'_{\mu} + m}{k'^2 + m^2} \quad (4.40)$$

Pour ramener le propagateur à sa forme standard dans le continu, nous avons introduit de nouvelles matrices-gammas $\gamma'_1 = -\gamma_1$, $\gamma'_{\mu} = \gamma_{\mu}$, $\mu = 2 - 4$, unitairement équivalentes aux matrices de Dirac dans leur forme standard. (4.40) montre qu'il y a un second pôle, localisé à $k'^2 = -m^2$, représentant aussi un fermion dans le continu. C'est notre premier "doublet". s^2 s'annule si une des quatre composantes de k_{μ} est égale à 0 ou π . Il y a un pôle proche de chacune de ces 16 positions possibles. Notre seul fermion sur le réseau représente 16 états dégénérés.

Ce n'est pas la prolifération des fermions qui est la partie compliquée du problème mais plutôt le fonctionnement de la symétrie chirale sur le réseau. Si $m = 0$, nous pouvons

introduire l'opérateur de projection chirale $\gamma_\mu \rightarrow \gamma_\mu(1 + \gamma_5)/2$, qui dans le continu restreint le champ spinoriel à sa composante gauche ψ_L . Dans le cas du réseau, le pôle proche de $k = 0$ décrit ψ_L . Le second pôle représente vraisemblablement le spineur de composantes droites ψ_R parce que $\gamma'_5 = -\gamma_5$ et alors $(1 + \gamma_5) = (1 - \gamma'_5)$. Quand chaque composante de k est proche de π , la chiralité s'inverse de sorte que nous finissons avec huit fermions ψ_L et huit fermions ψ_R . Il est important de noter que lorsqu'on introduit un champ de jauge, tous les fermions sont couplés de la même manière. Dans ce cas, le spineur de composantes gauches ψ_L et le spineur de composantes droites ψ_R appartiennent à la même représentation et ne sont pas indépendants. Ce résultat est dû aux théorèmes de Nielsen-Ninomiya [67] et de Karsten-Smit [68] qui stipulent que la théorie des fermions sur réseau suscite le même nombre de spineurs de composantes gauches que de spineurs de composantes droites. Quels sont alors les conséquences de ces théorèmes?

- On ne peut pas discrétiser une théorie chirale sans anomalie. En particulier, on ne peut pas discrétiser la théorie électrofaible.
- On ne peut pas non plus discrétiser QCD avec N_f quarks sans masse. Une telle théorie possède $SU_L(N_f) \times SU_R(N_f)$ comme groupe de symétrie chirale, sous lequel les quarks ψ_L et ψ_R se transforment indépendamment les uns des autres, mais sur le réseau, tous les fermions de composantes gauches ou droites sont couplés de la même façon.

En résumé, le réseau a un problème avec la symétrie chirale.

Comment peut-on remédier à cette pathologie? Énormément d'efforts ont été consacrés à cette question. Il existe plusieurs approches, chacune avec ses avantages et ses inconvénients:

- On peut briser la symétrie chirale explicitement et veiller à la restituer dans la limite du continu. Après tout, c'est ce qu'on fait dans le cas de la symétrie de rotation

et de translation. C'est une approche originale de Wilson [72]. Je discuterai cette approche car nous l'avons utilisée dans le modèle étudié.

- La formulation des fermions de Kogut-Susskind (*Staggered fermions*) [69]. Elle consiste à réduire le nombre de fermions de 16 à 4 en utilisant une seule composante du champ fermionique plutôt qu'un spineur de Dirac à quatre composantes. Les spineurs de Dirac sont construits en combinant les champs définis sur les différents sites du réseau.
- Pour éviter les conséquences des théorèmes de Nielsen-Ninomiya et de Karsten-Smit, on utilise un réseau aléatoire [64]. Il s'agit d'une approche difficile parce que même le cas libre devrait être étudié numériquement [70].
- *Domain-wall fermions*. La mise en place de ce schéma d'une manière pratique est aujourd'hui controversée [71].

Actuellement, on utilise les fermions de Wilson [72] dans la plupart des simulations. Dans la régularisation d'une théorie des champs quantiques sur réseau, l'action n'est pas unique. Nous avons la liberté d'ajouter un nombre arbitraire d'opérateurs non pertinents du fait que ces derniers ne changent pas la limite du continu. Le problème de dédoublement des fermions existe parce que l'hamiltonien de Dirac est un opérateur différentiel d'ordre un. La solution de Wilson au problème de dédoublement est d'ajouter dans l'action l'opérateur $a\bar{\psi}\partial^2\psi$ de dimension canonique 5, ce qui ajoute le terme

$$S_W = -\frac{r}{2a} \sum_{z,u} \bar{\psi}(z) [U_u(z)\psi(z+\hat{\mu}) - 2\psi(z) + U_u^\dagger(z-\hat{\mu})\psi(z-\hat{\mu})] \quad (4.41)$$

où r est un paramètre. Le propagateur fermionique libre qui en résulte est

$$G(k) = \frac{-i\not{s} + (m - \frac{r}{2}\hat{k}^2)}{s^2 + (m + \frac{r}{2}\hat{k}^2)^2} \quad (4.42)$$

où $\hat{k} = 2 \sin(\frac{k_a a}{2})$. Si $k_a = \pi$, alors $s_a = 0$, mais $\hat{k}_a = 2$, le pôle additionnel acquiert une masse effective $m_{eff} = m + 2r$ ($am_{eff,phys} = am_{phys} + 2r/a$ si nous restituons le facteur a).

Si on garde r fini dans la limite du continu, la masse effective devient infinie étant donné que $m = m_{phys}a \rightarrow 0$. Le même argument s'applique aux autres fermions additionnels. Dans la limite du continu, ils se découplent des particules physiques et peuvent être interprétés comme des champs fantômes (*ghosts*). En présence d'une interaction, les fermions additionnels se découplent aussi, mais ils causent une renormalisation des paramètres du lagrangien original. En effet, la masse du quark est renormalisée par un facteur multiplicatif et un facteur additif. La symétrie chirale devrait être restituée dans la limite du continu parce que le terme de Wilson est une discrétisation de $a\bar{q}\partial^2q$ qui s'annule quand $a \rightarrow 0$.

4.1.4 Propriétés des fermions de Wilson

Nous donnons en résumé les propriétés des fermions de Wilson.

- Les fermions additionnels reçoivent une masse infinie proportionnelle à $2r/a$ et se découplent de la théorie dans la limite du continu.
- La symétrie chirale est brisée explicitement. Les identités de Ward traduisant l'invariance de l'action naïve sous les transformations de jauge chirales

$$\begin{aligned} \psi(x) &\rightarrow e^{i\theta\gamma_5}\psi(x) \\ \bar{\psi}(x) &\rightarrow \bar{\psi}(x)e^{i\theta\gamma_5} \end{aligned} \quad (4.43)$$

s'écrivent:

$$\left\langle \frac{\partial\delta\mathcal{S}}{\partial\theta} \mathcal{O} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial\delta\mathcal{O}}{\partial\theta} \right\rangle \quad (4.44)$$

La variation de l'action de Wilson sous (4.43) est

$$\frac{\partial\delta\mathcal{S}}{\partial\theta} = \partial_\mu A_\mu - 2mP + r\alpha X \quad (4.45)$$

où X est un opérateur additionnel dû au terme de Wilson dépendant de r [73]. En général, toutes les relations basées sur les identités de Ward recevront une correction

d'ordre ra et incluront des combinaisons d'opérateurs qui seraient normalement absentes si la symétrie chirale était conservée.

- Le terme de Wilson change l'erreur due à la discrétisation de $O(a^2)$ à $O(a)$.
- La masse du quark est renormalisée par un facteur multiplicatif et un facteur additif.

4.1.5 Confinement

Le critère le plus simple du confinement est l'évaluation de l'énergie potentielle $V(R)$ d'un quark (Q) et d'un anti-quark (\bar{Q}), supposés infiniment lourds, comme fonction de la distance qui les sépare. La formulation standard du confinement consiste en un tube de flux de champ électrique coloré reliant les deux particules chargées, le quark et l'anti-quark [74, 75]. Le tube s'allonge au fur et à mesure que nous les séparons. Ceci suggère que $V(R) \propto R$ pour des distances nettement supérieures à la largeur du tube. La force, $F = -dV/dR$, qui relie les deux particules tend vers une constante quand R est large. Le module de cette constante s'appelle la tension de la corde, σ .

$V(R)$ peut être évalué à partir de la fonction de partition d'un champ de jauge en présence d'une distribution de courant extérieur

$$Z_J = \int [dU] \exp(-3S_g + i \int J_u A_u d^4x) \quad (4.46)$$

Si J_u représente une particule ponctuelle se déplaçant le long d'une ligne d'univers, J_u est alors une distribution de Dirac définie sur cette ligne paramétrisée par ℓ_u :

$$i \int J_u A_u d^4x = i \oint A_u dl_u \quad (4.47)$$

L'invariance de jauge, impliquant la conservation du courant, fait que la ligne de courant est une boucle fermée. Pour simplifier, nous prenons une boucle rectangulaire ayant une longueur R dans la direction spatiale et une distance T dans la direction temporelle. Il s'agit de la boucle de Wilson.

Z_J est la fonction de partition du système physique, la paire $Q\bar{Q}$. Pour trouver l'énergie de ce système, nous différencions $\ln(Z)$ par rapport à T (physiquement nous voulons mesurer la réponse du système quand nous allongeons la boucle). Cela revient à calculer le changement de l'énergie du système quand la paire est créée et quand elle est annihilée.

$$E_{Q\bar{Q}} = -\frac{\partial}{\partial T} [\ln Z_J - \ln Z_{J=0}] \quad (4.48)$$

$$= -\frac{\partial}{\partial T} \ln(Z_J/Z_{J=0}) \quad (4.49)$$

$$= -\frac{\partial}{\partial T} \ln \frac{\int [dU] e^{-\beta S[U] + \int A \cdot dt}}{\int [dU] e^{-\beta S}} \quad (4.50)$$

$$= -\frac{\partial}{\partial T} \ln \langle W \rangle_{J=0} \quad (4.51)$$

où $\langle W \rangle$ est la valeur moyenne de la boucle de Wilson dans un champ de gluons semi-classique. Le comportement de $\langle W \rangle$ indiquera s'il y a confinement ou pas.

Si par exemple $\langle W \rangle \simeq \exp(-m(2R + 2T))$ (la loi des périmètres), nous avons $E = 2m$ où m peut être interprétée comme la masse du quark. L'énergie de la paire est indépendante de la distance R et les quarks peuvent être séparés d'une distance arbitraire. Par contre, si $\langle W \rangle \simeq \exp(-\sigma RT)$ (la loi des aires) $E = \sigma R$ et les quarks sont confinés par un potentiel linéaire. En général, $\ln \langle W \rangle$ est compliqué:

$$-\ln \langle W \rangle = \sigma RT + 2m(R + T) + \text{constant} + T/R + \dots \quad (4.52)$$

Néanmoins, le terme de la loi des aires dominera quand R et T sont larges. Nous nous attendons alors à:

$$\langle W \rangle \xrightarrow{T \rightarrow \infty} C e^{-V(R)T} \xrightarrow{R \rightarrow \infty} C e^{-\sigma RT} \quad (4.53)$$

Le critère qu'on vient de donner du confinement dans la QCD n'est pas réaliste, parce que le tube de flux peut être brisé par la création d'une paire $\bar{q}q$ donnant naissance à des mésons $\bar{Q}q$ et $\bar{q}Q$ ayant une énergie indépendante de R . Mais ce processus n'existe pas dans l'approximation de "fermions gelés" (*Quenched QCD*) où on exclut les boucles

internes de quarks. En fait, la fonction de partition de la QCD sur réseau s'écrit

$$Z = \int [dU] \prod_{\vec{i}} [dq][d\bar{q}] e^{-S_g - S_N - S_W} \quad (4.54)$$

où S_g est l'action de jauge et $\mathcal{D} + m$ est l'opérateur de Dirac apparaissant dans la somme de l'action naïve avec le terme de Wilson $S_N + S_W$. En effectuant l'intégrale gaussienne sur les variables grassmanniennes, la mesure s'écrit

$$d\mu = [dU] \prod_{\vec{i}} \det(\mathcal{D} + m_{\vec{i}}) e^{-S_g} \quad (4.55)$$

L'approximation "Quenched" consiste à approximer $d\mu$ par

$$d\mu_{\text{QCD}} = [dU] \prod_{\vec{i}} \det(\mathcal{D} + m_{\vec{i}}) e^{-S_g} \longrightarrow d\mu_{\text{QCD}} = [dU] \exp(-S_g) \quad (4.56)$$

Cela revient à poser le déterminant des fermions égal à une constante et par conséquent exclure les boucles internes de quarks et d'anti-quarks. Dans les simulations Monte Carlo, les configurations sont générées par le poids de probabilité e^{-S_g} , cela permet de réduire le temps de CPU d'un facteur $\sim 10^2 - 10^3$.

En utilisant la méthode de l'expansion du couplage fort, on a établi que la loi des aires se manifeste quand g^2 est large. La question qui se pose est comment étendre ou extrapoler ce résultat à la limite du continu $g^2 \rightarrow 0$ et s'il existe une transition de phase à un couplage g^2 fini qui risque de briser le lien analytique entre les régions de couplage fort et faible. La plupart des résultats numériques suggèrent que cela ne se produit pas [65].

4.2 Notion d'action améliorée

Dans les simulations numériques de la QCD, la convergence pauvre vers la limite du continu et la vérification de la propriété de l'invariance d'échelle des observables physiques posent un problème. Nous devons utiliser un réseau dont le pas a n'est pas très large.

Cela est très coûteux. Le temps de CPU des simulations Monte Carlo dans un réseau de taille physique L et de pas a est proportionnel à [84]

$$\left(\frac{L}{a}\right)^4 \left(\frac{1}{a}\right)^{1-2} \left(\frac{1}{m_\tau}\right)^{2-3} \quad (4.57)$$

où le premier terme est le nombre de sites, le deuxième terme le ralentissement critique dû à l'augmentation du temps d'autocorrélation des configurations, et le dernier terme le prix de l'inversion du propagateur fermionique. D'où le besoin d'un ordinateur très puissant pour faire les calculs.

Les simulations numériques se font avec un choix particulier d'action. L'action de jauge est construite par exemple à partir d'une plaquette alors que l'action fermionique est construite soit à partir des fermions de Wilson, soit à partir des fermions de Kogut-Susskind (Staggered fermions). Tandis que ces actions sont simples à utiliser dans les simulations, elles forment un choix arbitraire d'action nues. Pouvons-nous inventer une bonne méthode de discrétisation ayant une violation d'invariance d'échelle faible?

Regardons le lien qui existe entre la notion d'échelle et les propriétés d'une action nue arbitraire, définie avec une coupure ultraviolette a . L'action est caractérisée par un nombre infini de constantes de couplage $\{g\}$. Quand g a une valeur arbitraire, l'échelle typique de toutes les grandeurs physiques est de l'ordre de la coupure: $m \simeq 1/a$, la longueur de corrélation $\xi \simeq a$. Les effets dus à la coupure seront importants.

La meilleure façon d'aborder la notion d'invariance d'échelle est l'application du groupe de renormalisation [25]. Prenons une action définie avec une coupure a et intégrons sur les degrés de liberté correspondant aux échelles les plus courtes. Nous obtenons ainsi une nouvelle action effective définie avec une nouvelle coupure $a' > a$ et décrivant moins de degrés de libertés. Cette action effective a une forme similaire à l'action originale mais avec un couplage modifié. En répétant le procédé, nous obtenons une suite d'actions effectives qui décrivent toutes la même physique de longue distance mais dans lesquelles la physique de courte distance est progressivement éliminée. Nous générons ainsi un flot

de constantes de couplage:

$$S(a, c_j) \rightarrow S(2a, c'_j) \rightarrow S(4a, c''_j) \rightarrow \dots \quad (4.58)$$

Si la suite de ces actions tend vers une limite, si un point fixe existe à ces transformations du groupe de renormalisation

$$S(a_n, c_j^n) \rightarrow S(a_{n+1}, c_j^{n+1} = c_j^n) \quad (4.59)$$

les observables physiques sont alors indépendantes de la coupure a et en particulier la longueur de corrélation ξ doit être nulle ou infinie.

Ce point fixe existe si les paramètres c_j appartiennent à un ensemble restreint appelé "la surface critique." Toutes les actions, qui après les transformations du groupe de renormalisation convergent, vers le même point fixe appartiennent à la même classe d'universalité. À longue distance, la théorie effective est l'action au point fixe où tous les couplages ont convergé indifféremment de leurs valeurs nues originales. Mais $\xi = \infty$ est différente de ξ large. Imaginons qu'on ajuste les paramètres nus de façon à ce qu'ils tendent vers un point appartenant à un voisinage de la surface critique. Le système évoluera vers un point proche du point fixe, puis il s'en éloignera. Le flot, dans l'espace des paramètres ou des constantes de couplage, s'approchera asymptotiquement d'une trajectoire particulière appelée trajectoire renormalisée attachée à $\xi = \infty$ au point fixe. Le long de la trajectoire renormalisée ξ est fini. Mais comme elle est attachée au point fixe, elle jouit des propriétés d'invariance d'échelle du point fixe, traduisant l'absence complète des effets de la coupure sur le spectre et les fonctions de Green.

Le but ultime du "programme de l'amélioration de l'action" est de trouver une action parfaite, sans effets de la coupure, le long de la trajectoire renormalisée d'une transformation du groupe de renormalisation.

Dans la pratique, le groupe de renormalisation est très difficile à construire puisqu'il s'agit de se mouvoir dans l'espace de dimension infinie des actions possibles. La détermi-

nation de la trajectoire renormalisée est une tâche difficile. Par la suite, nous décrirons la construction de l'action améliorée par la méthode basée sur l'analyse dimensionnelle.

4.2.1 Amélioration de l'action de jauge

Commençons par la description de la construction de l'action améliorée à partir de la méthode naïve basée sur l'analyse dimensionnelle. Considérons l'opérateur plaquette apparaissant dans l'action de jauge pure S_g (4.21). Cet opérateur implique le produit des variables liens autour d'un carré localisé au site x dans le plan $\mu\nu$

$$P_{\mu\nu} = U_\mu(x)U_\nu(x + \hat{\mu})U_\mu^\dagger(x + \hat{\nu})U_\nu^\dagger(x) \quad (4.60)$$

Supposons que le champ de jauge classique A_μ est faible au voisinage du point x

$$U_\mu \sim e^{iagA_\mu(x + \frac{\hat{\mu}}{2})} \quad (4.61)$$

Ceci implique que

$$\frac{1}{3}\text{ReTr}P_{\mu\nu} \sim 1 \quad (4.62)$$

Les termes de correction à (4.62) ont la forme d'un polynôme en a de coefficients donnés par des opérateurs invariants de jauge. Ces opérateurs contiennent des combinaisons du champ $A_\mu(x)$ et ses dérivés

$$\begin{aligned} 1 - \frac{1}{3}\text{ReTr}P_{\mu\nu} = & r_0 a^4 \text{Tr}F_{\mu\nu}^2 + a^6 [r_1 \sum_{\mu\nu} \text{Tr}D_\mu F_{\mu\nu} D_\mu F_{\mu\nu} + \\ & r_2 \sum_{\mu\nu\sigma} \text{Tr}D_\mu F_{\nu\sigma} D_\mu F_{\nu\sigma} + \\ & r_3 \sum_{\mu\nu\sigma} \text{Tr}D_\mu F_{\mu\sigma} D_\nu F_{\nu\sigma}] + \\ & + O(a^8) \end{aligned} \quad (4.63)$$

Les coefficients du développement ont une série de puissance en terme de couplage

$$r_j = A_j + g^2 B_j + \dots \quad (4.64)$$

D'autres boucles ont une expansion similaire, mais avec des coefficients différents.

Maintenant, l'idée est de sélectionner un ensemble minimal de boucles et d'éliminer les termes a^2 ordre par ordre des observables physiques en formant une combinaison linéaire adéquate de boucles

$$S = \sum_j c_j O_j \quad (4.65)$$

avec

$$c_j = c_j^0 + g^2 c_j^1 + \dots \quad (4.66)$$

L'amélioration au niveau de l'approximation des diagrammes en arbre $c_j = c_j^0$ (approximation classique) élimine les corrections sous forme de loi de puissance pure d'ordre a^2 . Ce processus a pour but de réduire l'erreur due à l'approximation des dérivées par des différences finies dans la discrétisation des théories de jauge. Nous pouvons aussi considérer des corrections d'ordre quantique en éliminant à chaque ordre a^2 les termes g^n aussi [78, 79, 80].

La version ancienne du programme de l'amélioration de l'action utilise la théorie des perturbations sur réseau pour calculer les coefficients des opérateurs figurant dans l'expansion de l'action [81]. L'application de la théorie des perturbations sur un système quelconque est basée sur trois étapes: la première étape consiste à spécifier le schéma de renormalisation définissant ainsi le couplage. Le schéma de soustraction minimale modifiée ($\overline{\text{MS}}$) est l'un des schémas les plus populaires. La deuxième étape consiste à spécifier l'échelle d'énergie où le couplage est défini et la dernière consiste à déterminer la valeur numérique du couplage à cette échelle. L'ensemble de ces choix est arbitraire.

Chaque opérateur, ou champ composite, a une expansion perturbative qui s'écrit de la manière suivante:

$$O(Q) = c_0 + c_1(Q/\mu, RS)\alpha_s(\mu, RS) + c_2(Q/\mu, RS)\alpha_s(\mu, RS)^2 + \dots \quad (4.67)$$

Les coefficients $c_i(Q/\mu, RS)$ et le couplage $\alpha_s(\mu, RS)$ dépendent des choix du schéma de renormalisation et de l'échelle μ . Le rôle de la théorie des perturbations est de faire des

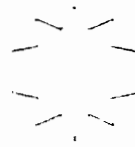


Figure 4.2: Exemple de diagramme de tadpole.

choix permettant que les termes d'ordre élevé dans l'expansion soient faibles. Un mauvais choix fournit des coefficients très élevés.

Le couplage nu est un mauvais paramètre d'expansion [82]. En effet, supposons que nous soyons intéressés à déterminer l'évolution du couplage physique avec la variation de l'échelle³. La comparaison d'une masse d'une particule mesurée en unités du pas de réseau à sa valeur expérimentale permet d'extraire la valeur de a

$$a = \frac{(am)_{\text{lat}}}{(m)_{\text{expt}}} \quad (4.68)$$

où nous avons négligé les corrections d'ordre a^2 . Cette méthode permet d'obtenir les valeurs de a pour plusieurs valeurs de g^2 ou d'une façon équivalente g^2 en fonction de a , $g^2(a)$. Du point de vue de la théorie des perturbations, le réseau est une régularisation de la divergence UV. Le quadri-vecteur d'énergie impulsion est restreint au domaine $|p_i| \leq \pi/a$.

Chaque quantité physique définie sur le réseau peut être rattachée à sa version dans le continu à l'aide de

$$O^{\text{cont}}(\mu) = Z(\mu a, g(a)) O^{\text{lat}}(a) \quad (4.69)$$

³Running coupling constant.

Dans la théorie des perturbations, Z a un développement en série de puissance de g^2 . En particulier $g^2(a)$ peut être rattaché au couplage défini dans le schéma de renormalisation de soustraction minimale modifié [81].

$$g^2(a) = g_{\overline{\text{MS}}}^2(\mu = \pi/a) [1 - 0.31g^2 + O(g^4)] \quad (4.70)$$

Étant donné que $g^2 \sim 1$ dans les calculs sur réseau, le terme g^2 dans (4.70) est de l'ordre $\sim 30\%$. Il y a alors des corrections très larges au développement (4.70) provenant des termes inconnus d'ordres supérieurs.

Pour convertir les résultats obtenus à partir du calcul sur le réseau aux résultats de $g_{\overline{\text{MS}}}$, on propose dans [83, 84] une méthode non perturbative. Quand le couplage est faible, nous pouvons effectuer le développement

$$\bar{v}Uv = \bar{v}[1 + i ga.A + \dots]v \quad (4.71)$$

Le terme d'ordre plus élevé $\bar{v}\frac{1}{2}g^2a^2.A^2v$ est un vertex supplémentaire. Il ne joue aucun rôle en théorie des champs classiques puisqu'il contient des termes de puissance en a . Il est supprimé dans la limite du continu. Mais en théorie des champs quantiques, la situation est différente. La contraction d'une paire de champs A génère un diagramme nommé "*tadpole*" illustré dans **Figure 4.2**. La divergence UV de ce diagramme (boucle de gluons) $\simeq 1/a^2$ compense le terme a^2 figurant dans le vertex supplémentaire. La même chose arrive à des ordres plus élevés, et les tadpoles ajoutent une contribution effective $a^0 \sum c_n g^{2n}$. Pour éliminer ces contributions Lepage, Mackenzie [84] et Parisi [83] ont suggéré de remplacer

$$U_a \rightarrow \frac{U_a(x)}{u_0} \quad (4.72)$$

où u_0 est un terme de champ moyen ou terme d'amélioration. L'action améliorée s'écrit

$$S = \frac{1}{g^2 u_0^4} \sum \text{Tr} \square \leftrightarrow \frac{1}{g_{\text{lat}}^2} \sum \text{Tr} \square \quad (4.73)$$

où $g^2 \equiv g_{\text{lat}}^2$, u_0^4 est le nouveau paramètre d'expansion. Souvent, on prends $u_0^4 = (\langle \text{Tr} \square \rangle / 3)$, sa valeur est déterminée numériquement. Dans cette méthode basée sur des considérations

quantiques, on utilise les données numériques pour éliminer à chaque ordre les grandes contributions des tadpoles qui causent une pauvre convergence dans le développement (4.70).

Un formalisme canonique, utilisant un hamiltonien amélioré, a été développé par Luo, Guo, Kröger et Schütte [85]. Cette construction est basée d'une part sur des considérations classiques ayant pour objet de diminuer l'erreur d'ordre a^2 due à la discrétisation et, d'autre part sur des considérations quantiques ayant pour but d'éliminer les contributions des tadpoles.

4.2.2 Amélioration de l'action fermionique

Contrairement au cas des degrés de liberté de jauge, l'erreur de l'action de Wilson décrivant les fermions

$$\begin{aligned}
 S_W &= m_f \sum_x \bar{\psi}(x)\psi(x) \\
 &- \frac{1}{2a} \sum_{x,\mu} \bar{\psi}(x)\gamma_\mu [U_\mu(x)\psi(x+\hat{\mu}) - U_\mu^\dagger(x-\hat{\mu})\psi(x-\hat{\mu})] \\
 &- \frac{r}{2a} \sum_{x,\mu} \bar{\psi}(x) [U_\mu(x)\psi(x-\hat{\mu}) - 2\psi(x) + U_\mu^\dagger(x-\hat{\mu})\psi(x-\hat{\mu})] \quad (4.74)
 \end{aligned}$$

est plus large à cause du deuxième terme dans (4.74) introduit par Wilson pour remédier au doublement des degrés de liberté fermioniques. Cette erreur est d'ordre a .

Le premier coup d'essai de l'amélioration de l'action de Wilson éliminant les termes de corrections $O(a)$ a été tenté par Hamber et Wu [86]. Ils ont ajouté dans l'action de Wilson (4.74) un terme contenant deux liens:

$$\begin{aligned}
 S_{HW} &= S_W + \frac{r\kappa}{4a} \sum_{x,\mu} \bar{\psi}(x) \left[U_\mu(x)U_\mu(x+\hat{\mu})\psi(x+2\hat{\mu}) + \right. \\
 &\quad \left. U_\mu^\dagger(x-\hat{\mu})U_\mu^\dagger(x-2\hat{\mu})\psi(x-2\hat{\mu}) \right] \quad (4.75)
 \end{aligned}$$

où $\kappa = 1/(2ma + 8r)$. En faisant un développement de Taylor de $U_\mu(x)$ et de $\psi(x + \hat{\mu})$ figurant dans (4.75) en terme de puissance du pas du réseau a , semblable à (4.31), nous constatons que les termes d'ordre a sont éliminés à l'approximation des diagrammes en arbre (approximation classique). On peut inclure des corrections quantiques en déterminant les coefficients relatifs en théorie des perturbations.

L'action qui a suscité un intérêt énorme est celle de Sheikholeslami-Wohlert [87]. Ils ont proposé une addition d'un second opérateur de dimension canonique cinq à l'action de Wilson S_W (4.74). Il s'agit d'un terme contenant le moment magnétique anormal du fermion. L'action de Sheikholeslami-Wohlert éliminant les termes $O(a)$ figurant dans l'action de Wilson est donnée par:

$$S_{SW} = S_W - \frac{iaC_{SW}\kappa r}{4} \bar{\psi}(x)\sigma_{\mu\nu}F_{\mu\nu}\psi(x) \quad (4.76)$$

À l'approximation des diagrammes en arbre $C_{SW} = 1$. Son expansion perturbative à l'ordre d'une boucle est d'après [88]

$$C_{SW} = 1 + 0.2659(1)g_0^2 + O(g_0^4) \quad (4.77)$$

Grâce à cette expansion, l'erreur est réduite d'un ordre a (action de Wilson) à un ordre a^2 au moins. L'avantage de l'action de Sheikholeslami-Wohlert est qu'elle est locale et permet ainsi d'appliquer la théorie des perturbations sans énormes difficultés [91].

La détermination non-perturbative de C_{SW} est possible en se basant sur les identités de Ward [89, 90]. Pour éliminer les termes $O(a)$, il faut ajuster le coefficient C_{SW} de façon à ce que les identités de Ward soient satisfaites. Dans cette méthode non perturbative, les courants, le couplage g^2 et la masse des quarks m font l'objet de la renormalisation.

4.3 Formalisme canonique

En complément de l'approche de l'intégrale de chemin appliquée à la QCD sur réseau, discutée à ce point, il est important aussi d'investiguer l'espace des états et le spectre de la

théorie. Schématiquement, nous pouvons le faire en élaborant un formalisme hamiltonien [76].

4.3.1 Degrés de liberté de jauge

Considérons un système de jauge ayant comme groupe de symétrie de jauge $SU(\mathcal{N}_c)$. Dans le formalisme canonique, le temps est traité comme une variable continue, mais l'espace est discrétisé. Le réseau spatial a la forme cubique suivante

$$\Gamma = a\mathbb{Z}^3 = \{x : x_i/a_s \in \mathbb{Z}\} \quad (4.78)$$

Soient $[x, j, k]$ des plaquettes orientées de sommets $x, x+j, x+j+k, x+k$ et d'orientations \hat{j}, \hat{k} . Le champ de jauge $U_{x,k} \equiv U(x, k)$ est associé au lien entre x et $x+k$ que nous notons $(x, x+k)$. $U_{x,k}$ est un élément du groupe de jauge $SU(\mathcal{N}_c)$ tel que $U(x, k) = U^\dagger(x+k, k)$. Le champ électrique $E^a_{x,k} \equiv E^a(x, k)$, associé au lien $(x, x+k)$, est un élément de l'algèbre de Lie $su(\mathcal{N}_c)$

$$[E^a(x, j), E^b(y, k)] = if^{abc} E^c(x, j) \delta_{jk} \delta_{xy} \quad (4.79)$$

$$[E^a(x, j), U(y, k)] = T^a U(y, k) \delta_{jk} \delta_{xy} \quad (4.80)$$

où $T^a = (T^a)^\dagger, a = 1, \dots, \mathcal{N}_c^2 - 1$ sont les générateurs de l'algèbre de Lie $su(\mathcal{N}_c)$ satisfaisant

$$[T^a, T^b] = if^{abc} T^c \quad (4.81)$$

L'hamiltonien d'un système de jauge pur sur un réseau [76], s'écrit

$$H_g = \sum_{x,k} \frac{g^2}{2a_s} E^a(x, k)^2 + \left(\sum_{x,j,k} \frac{1}{2g^2 a_s} \text{Tr}(U(x, j)U(x+j, k)U^\dagger(x+k, j)U^\dagger(x, k)) + \text{h.c.} \right) \quad (4.82)$$

où $\text{Tr}(\cdot)$ est la trace de la matrice $\mathcal{N}_c \times \mathcal{N}_c$.

Pour arriver à (4.82), on utilise le formalisme de la matrice de transfert dans la jauge temporelle $A_0 = 0$, [77]. Cette jauge est un cas particulier de la jauge axiale $\alpha^\mu A_\mu = 0$

avec $\alpha^\mu = (1, \vec{0})$. Il est connu que la jauge axiale ne fixe pas tous les degrés de liberté de jauge [21]. Il reste alors une symétrie de jauge résiduelle exprimée par les relations (4.79) et (4.80). Cette symétrie de jauge résiduelle peut aussi être traduite par des identités de Ward écrites sous la forme de la loi de Gauss

$$\mathcal{G}^a(x)|\psi_{\text{phys}}\rangle = 0 \quad (4.83)$$

où

$$\mathcal{G}^a(x) = \sum_k E^a(x, k), \quad a = 1, \dots, N_c^2 - 1 \quad (4.84)$$

sont les générateurs de la transformation de jauge résiduelle, satisfaisant à leur tour l'algèbre de Lie

$$[\mathcal{G}^a(x), \mathcal{G}^b(y)] = if^{abc}\mathcal{G}^c(x)\delta_{xy} \quad (4.85)$$

4.3.2 Inclusion des fermions

L'équation de Dirac découle de l'action

$$S_F = \int d^4x \bar{\psi} \gamma_\mu (\partial_\mu + m) \psi \quad (4.86)$$

Le moment conjugué associé à ψ est $-\psi^\dagger$. L'hamiltonien s'obtient en effectuant une transformation de Legendre de la densité lagrangienne apparaissant dans S_F

$$H_F = \int d^3x \bar{\psi} (\vec{\gamma} \cdot \vec{\partial} + m) \psi \quad (4.87)$$

La discrétisation de (4.87) donne l'hamiltonien

$$H_N = \frac{1}{2a} \sum_{z, \hat{k}} \bar{\psi}(z) \gamma_{\hat{k}} [\psi(z + \hat{k}) - \psi(z - \hat{k})] + \sum_z m \bar{\psi}(z) \psi(z) \quad (4.88)$$

L'interaction des fermions avec les champs de jauge est introduite via l'élément du groupe de jauge $U(x - k)$,

$$\begin{aligned} H_N(\bar{\psi}, \psi, U) &= \frac{1}{2a} \sum_{z, \hat{k}} \bar{\psi}(z) \gamma_{\hat{k}} [U_{\hat{k}}(z) \psi(z + \hat{k}) - U_{\hat{k}}^\dagger(z - \hat{k}) \psi(z - \hat{k})] \\ &\quad - \sum_z m \bar{\psi}(z) \psi(z) \end{aligned} \quad (4.89)$$

À cause du problème de dédoublement, nous devons ajouter le terme de Wilson à H_N

$$H_W = -\frac{r}{2a} \sum_{x,k} \bar{\psi}(x) [U_k(x) \psi(x+k) - 2\psi(x) + U_k^\dagger(x-k) \psi(x-k)] \quad (4.90)$$

L'hamiltonien total décrivant l'interaction des fermions avec des champs de jauge est alors

$$H = H_J + H_N + H_W \quad (4.91)$$

avec H_J , H_N et H_W donnés respectivement par (4.82), (4.89) et (4.90).

En présence de la matière, la loi de Gauss devient

$$\mathcal{G}^a(x) |\psi_{\text{phys}}\rangle = 0, \quad \mathcal{G}^a(x) = \sum_k E^a(x,k) + \psi_A^\dagger(x) T_{AB}^a \psi_B(x) \quad (4.92)$$

avec $a = 1, \dots, N_c^2 - 1$. On montre que H est invariant sous les transformations de jauge

$$[\mathcal{G}^a(x), H] = 0 \quad (4.93)$$

Dans le formalisme canonique, la dynamique du problème de la théorie de jauge ou de la QCD sur réseau, consiste à trouver le spectre de l'opérateur hamiltonien (4.91), formé par des états satisfaisant la contrainte (4.92).

4.4 Hamiltonien amélioré et QCD2 sur réseau

4.4.1 QCD2 dans la limite N_c grand et description sommaire du modèle de 't Hooft

L'idée du développement pour N_c grand a été exploitée par 't Hooft pour investiguer la $U(N_c)$ -chromodynamique en deux dimensions (QCD₁₊₁) où il est possible d'additionner

les diagrammes planaires. Cette version simplifiée de la QCD illustre la propriété du confinement. Avec \mathcal{N}_f saveurs de fermions, l'action du modèle de 't Hooft s'écrit

$$S = \int d^2x \left[\sum_{a=1}^{\mathcal{N}_c} \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_f} \bar{\psi}^{\alpha a} (\gamma_\mu D^\mu + m_\alpha) \psi_a^\alpha - \sum_{a,b=1}^{\mathcal{N}_c} \frac{1}{2} F_{\mu\nu}^a F^{b\mu\nu} \right] \quad (4.94)$$

où les premières lettres grecques α, β, \dots forment les indices de saveur, les lettres latines a, b, \dots forment les indices de couleur alors que les lettres μ, ν, \dots forment les indices de Lorentz. Nous avons

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + ig_s [A_\mu, A_\nu]^a \quad (4.95)$$

$$D_\mu \psi_a^\alpha = \partial_\mu \psi_a^\alpha + g_s A_\mu^a \psi_a^\alpha \quad (4.96)$$

$$A_{\mu a}^b(x) = (A_{\mu b}^a(x))^* \quad (4.97)$$

Dans le cas $\mathcal{N}_f = 2$, l'action est invariante sous le groupe de symétrie

$$SU(\mathcal{N}_f) \supseteq SU_L(2) \otimes SU_R(2) \otimes U_V(1) \otimes U_A(1) \quad (4.98)$$

Les générateurs du groupe agissent sur un isodoublet de fermions

$$SU(\mathcal{N}_f): \psi_{\alpha a}(x) \longrightarrow (e^{i\Theta_A(x)T^A})_{ab} \psi_{\alpha b}(x), \quad \bar{\psi}_{\alpha a}(x) \longrightarrow \bar{\psi}_{\alpha b}(x) (e^{-i\Theta_A(x)T^A})_{ba} \quad (4.99)$$

$$SU_L(2): \psi_{\alpha a}(x) \longrightarrow (e^{i\theta_B \frac{\sigma^B}{2} P_L})_{\alpha\beta} \psi_{\beta a}(x), \quad \bar{\psi}_{\alpha a}(x) \longrightarrow \bar{\psi}_{\beta a}(x) (e^{-i\theta_B \frac{\sigma^B}{2} P_R})_{\beta\alpha} \quad (4.100)$$

$$SU_R(2): \psi_{\alpha a}(x) \longrightarrow (e^{i\theta_B \frac{\sigma^B}{2} P_R})_{\alpha\beta} \psi_{\beta a}(x), \quad \bar{\psi}_{\alpha a}(x) \longrightarrow \bar{\psi}_{\beta a}(x) (e^{-i\theta_B \frac{\sigma^B}{2} P_L})_{\beta\alpha} \quad (4.101)$$

$$U_V(1): \psi_{\alpha a}(x) \longrightarrow (e^{i\theta(x)\mathbf{1}})_{\alpha\beta} \psi_{\beta a}(x), \quad \bar{\psi}_{\alpha a}(x) \longrightarrow \bar{\psi}_{\beta a}(x) (e^{-i\theta(x)\mathbf{1}})_{\beta\alpha} \quad (4.102)$$

$$U_A(1): \psi_{\alpha a}(x) \longrightarrow (e^{i\phi(x)\mathbf{1}})_{\alpha\beta} \psi_{\beta a}(x), \quad \bar{\psi}_{\alpha a}(x) \longrightarrow \bar{\psi}_{\beta a}(x) (e^{-i\phi(x)\mathbf{1}})_{\beta\alpha} \quad (4.103)$$

où les T^A sont les $\mathcal{N}_f^2 - 1$ générateurs du groupe de jauge $SU(\mathcal{N}_f)$, les σ^B sont les matrices de Pauli du groupe de saveur, $\Theta_A(x), \theta_B, \theta(x)$ et ϕ sont des coefficients réels et

$$P_L = \frac{1}{2}(1 - \gamma_5), \quad P_R = \frac{1}{2}(1 + \gamma_5) \quad (4.104)$$

À l'approximation des diagrammes en arbre, les symétries (4.99-4.103) conduisent aux lois de conservation des courants de Noether suivants

$$j^{\mu A}(x) = \bar{v}_{\alpha a}(x) \gamma^{\mu} (T^A)_{ab} v_{\alpha b}(x) \quad (4.105)$$

$$j_B^{\mu}(x)_R = \bar{v}_{\alpha a}(x) \gamma^{\mu} P_R \left(\frac{\sigma_B}{2}\right)_{\alpha\beta} v_{\beta a}(x) \quad (4.106)$$

$$j_B^{\mu}(x)_L = \bar{v}_{\alpha a}(x) \gamma^{\mu} P_L \left(\frac{\sigma_B}{2}\right)_{\alpha\beta} v_{\beta a}(x) \quad (4.107)$$

$$j^{\mu}(x) = \bar{v}_{\alpha a}(x) \gamma^{\mu} v_{\alpha a}(x) \quad (4.108)$$

$$j_5^{\mu}(x) = \bar{v}_{\alpha a}(x) \gamma^{\mu} \gamma^5 v_{\alpha a}(x) \quad (4.109)$$

La quantification de ce modèle ne permet pas, à cause du phénomène de l'anomalie, de préserver à la fois les symétries de jauge vectorielle et axiale. Si la régularisation préserve l'invariance de jauge (4.102), les courants vectoriels sont alors conservés mais les courants axiaux ne le sont pas, ils sont victimes d'une anomalie [92]. Les courants axiaux associés aux générateurs du groupe de jauge $SU(N_f)$ satisfont l'équation de l'anomalie pour N_f saveurs [93],

$$\partial_{\mu} j^{5\mu A} + ig [A_{\mu}, j^{5\mu A}] = N_f \frac{g^2}{2\pi} \epsilon_{\mu\nu} F^{A\mu\nu}, \quad A = 1, \dots, N_f^2 - 1 \quad (4.110)$$

où $A_{\mu}(x) = A_{\mu}^C(x) T^C$, avec $T^C, C = 1, \dots, N_f^2 - 1$, les générateurs de $SU(N_f)$. Le courant abélien satisfait l'équation de l'anomalie

$$\partial_{\mu} j^{\mu 5} = N_f \frac{g^2}{2\pi} \epsilon_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \quad (4.111)$$

La valeur moyenne dans le vide des champs composites $(\bar{v}v)(x)$ et $(\bar{v}\sigma^3 v)(x)$, qui ne sont pas invariants sous chiralité, est différente de zéro. En fait, ils brisent non seulement la symétrie $U_A(1)$ anormale (équation (4.111)) mais aussi la symétrie globale chirale $SU_L(2) \otimes SU_R(2) \rightarrow SU_V(2)$.

Si nous considérons le modèle de 't Hooft correspondant à $N_f = 1$, l'action est invariante sous le groupe de symétrie

$$SU(N_f) \otimes U_V(1) \otimes U_A(1) \quad (4.112)$$

et dans ce cas l'action des générateurs du groupe est donnée par (4.99), (4.102) et (4.103) avec $\alpha = \beta = 1$. Or, la symétrie $U_A(1)$ est brisée à cause de l'équation de l'anomalie (4.111), on peut alors s'attendre à ce que $\langle \bar{u}v \rangle \neq 0$. Ce modèle se caractérise par deux limites distinctes [95]:

- (i) faire tendre $\Lambda_c^2 \rightarrow \infty$ en premier, après $m_\tau \rightarrow 0$.
- (ii) faire tendre $m_\tau \rightarrow 0$ en premier, ensuite $\Lambda_c^2 \rightarrow \infty$.

La première limite correspond à $g \ll m_\tau$, il s'agit d'un régime où le couplage est faible. Ce premier cas, où les relations suivantes

$$\Lambda_c^2 \rightarrow \infty, \quad g^2 \Lambda_c^2 = \text{const.}, \quad m_\tau \gg g \sim 1/\sqrt{\Lambda_c^2} \quad (4.113)$$

sont valables, a été considérée par 't Hooft [96, 97]. Dans la limite Λ_c^2 large, en additionnant les diagrammes planaires dominants ayant les lignes de quarks et antiquarks vivant sur le bord, 't Hooft est arrivé à l'équation de Bethe-Salpeter

$$\mu^2 \phi(x) = \left(\frac{M_1^2}{\pi} + \frac{M_2^2}{1-\pi} \right) \phi(x) - \frac{\pi^2}{\pi} P \int_0^1 dy \frac{1}{(x-y)^2} \phi(y) \quad (4.114)$$

où P indique la valeur principale de l'intégrale, ϕ est définie sur l'intervalle $[0, 1]$ et s'annule sur le bord et

$$M_{1,2} = m_{1,2}^2 - \left(\frac{\pi^2}{\pi} \right) \quad (4.115)$$

À chaque valeur propre de l'équation (4.114), il y a un état lié de masse μ . L'équation (4.114) n'est pas résolue analytiquement mais une solution approximative conduit à un spectre linéaire d'états liés de quarks formant des mésons donné par

$$\mu_n^2 = g_c^2 \pi n - (m_1^2 + m_2^2 - 2\frac{\pi^2}{\pi}) \ln n - \dots, \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.116)$$

μ_n est la masse de l'état lié, le méson. La fonction à deux points (le condensat chirale) a été déterminée par Zhitnitsky [95],

$$\langle \bar{u}v \rangle = -\Lambda_c^2 \left(\frac{\pi^2 \Lambda_c^2}{12\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.117)$$

Witten [98] a donné une interprétation originale des baryons dans le schéma d'approximation pour le développement \mathcal{N}_c grand. Les baryons sont des états complètement antisymétriques de \mathcal{N}_c quarks et leur masse est de l'ordre de \mathcal{N}_c [98]. Dans la limite du couplage faible, le spectre non perturbatif du modèle QCD_{1+1} contient en plus des mésons, des états additionnels dont la masse diverge comme l'inverse de la constante du couplage: les solitons. Witten a suggéré que les baryons sont de tels solitons et que leur masse diverge avec \mathcal{N}_c où $1/\mathcal{N}_c$ est "la constante du couplage" de l'interaction forte. Dans [99, 100] les baryons sont interprétés comme des solitons d'un lagrangien effectif.

La seconde limite correspond à un régime où le couplage est fort, $g \gg m_f$. Dans ce cas, le spectre est différent [101, 102, 103]. Steinhardt [103] a calculé la masse des états liés suivants: soliton (baryon), anti-soliton (anti-baryon) et soliton-antisoliton (baryon-antibaryon) et Bhattacharya [102] a montré que le spectre dans la limite chirale est

$$M = g \sqrt{\frac{\mathcal{N}_c - 1}{2\pi}} \quad (4.118)$$

Notons que dans le cas $\mathcal{N}_c = 1$, (4.118) coïncide avec la masse du boson du modèle de Schwinger. Grandou et *al.* [104] ont déterminé le condensat chiral.

$$\langle \bar{u}u \rangle \sim -g \mathcal{N}_c^{3/2} \quad (4.119)$$

où g est arbitraire. (4.119) confirme le résultat de Zhitnitsky (4.117) obtenu dans le régime du couplage faible.

4.4.2 Amélioration de l'hamiltonien

Hamer a étudié la QCD_{1+1} sur réseau en utilisant les fermions de Kogut-Susskind et $SU(2)$ comme groupe de jauge [105]. Le spectre dans la phase de 't Hooft (4.113) a été investigué. Ici, nous considérons le cas des fermions de Wilson [19]. Comme nous allons le voir, les résultats montrent que les observables physiques dépendent du paramètre non physique

r , le coefficient du terme $O(a)$ introduit par Wilson pour remédier au problème de dédoublement. Dans le but de réduire l'erreur due à ce terme, nous proposons un hamiltonien amélioré en nous inspirant de l'action de Hamber et Wu (4.75). Nous introduisons des termes de correction évalués uniquement à l'approximation des diagrammes en arbre dans l'hamiltonien fermionique. Étant donné que l'erreur de discrétisation dans l'hamiltonien de jauge est d'ordre a^2 , nous considérons seulement l'amélioration de la partie fermionique de l'hamiltonien.

Dans la section 4.3, nous avons décrit le formalisme canonique. Considérons pour l'instant uniquement les degrés de liberté fermioniques. D'après (4.89), (4.90) et (4.91) nous avons

$$H_F = \frac{1}{2a} \sum_{x,k} \bar{\psi}(x) \gamma_k [U_k(x) \psi(x+k) - U_k^\dagger(x-k) \psi(x-k)] - \sum_x m \bar{\psi}(x) \psi(x) - \frac{r}{2a} \sum_{x,k} \bar{\psi}(x) \gamma_k [U_k(x) \psi(x+k) - 2\psi(x) + U_k^\dagger(x-k) \psi(x-k)] \quad (4.120)$$

où $a \equiv a_s$ est le pas du réseau spatial. k est un vecteur unitaire ayant une seule composante, étant donné que la dimension spatiale est égale à un. Les γ_k sont maintenant les matrices de Pauli. Nous écrivons l'hamiltonien (4.120) dans la forme suivante:

$$H_F = H_m + H_k + H_r \quad (4.121)$$

$$H_m = m \sum_x \bar{\psi}(x) \psi(x) \quad (4.122)$$

$$H_k = \frac{1}{2a} \sum_{x,k} \bar{\psi}(x) \gamma_k U(x,k) \psi(x+k) \quad (4.123)$$

$$H_r = \frac{r}{2a} \sum_{x,k} [\bar{\psi}(x) \psi(x) - \bar{\psi}(x) U(x,k) \psi(x+k)] \quad (4.124)$$

Nous avons utilisé une notation condensée, la somme est sur les deux directions opposées, $\pm k$ et $\gamma_{-k} = -\gamma_k$. Le champ de jauge $U_k(x) \equiv U(x,k)$ est associé au lien entre x et $x+k$. $U_{x,k}$ est un élément du groupe de jauge $SU(N_f)$ tel que $U(x,k) = U^\dagger(x-k,k)$.

De façon similaire à l'action de Hamber et Wu (4.75) où un nouveau terme d'interaction a été ajouté à l'action de Wilson pour éliminer l'erreur d'ordre a , nous proposons

l'hamiltonien amélioré [107],

$$H_F^{\text{improved}} = H_m + H_k^{\text{improved}} + H_r^{\text{improved}} \quad (4.125)$$

$$H_k^{\text{improved}} = \frac{b_1}{2a} \sum_{x,k} \bar{\psi}(x) \gamma_k U(x,k) \psi(x+k) + \frac{b_2}{2a} \sum_{x,k} \bar{\psi}(x) \gamma_k U(x,2k) \psi(x+2k) \quad (4.126)$$

$$H_r^{\text{improved}} = \frac{r}{2a} \sum_{x,k} \bar{\psi}(x) \psi(x) - c_1 \frac{r}{2a} \sum_{x,k} \bar{\psi}(x) U(x,k) \psi(x+k) - c_2 \frac{r}{2a} \sum_{x,k} \bar{\psi}(x) U(x,2k) \psi(x+2k) \quad (4.127)$$

où $U(x,2k) = U(x,k)U(x-k,k)$.

Déterminons maintenant les coefficients b_1, b_2, c_1 et c_2 . En posant toutes les variables liens égales à l'identité, nous avons dans l'espace des impulsions

$$H_k^{\text{improved}} = \frac{b_1}{2a} \sum_{k,p} \bar{\psi}(p) \gamma_k e^{ip \cdot ka} \psi(p) + \frac{b_2}{2a} \sum_{k,p} \bar{\psi}(p) \gamma_k e^{2ip \cdot ka} \psi(p) \quad (4.128)$$

En sommant sur $k = \pm j$, nous avons

$$H_k^{\text{improved}} = \frac{ib_1}{a} \sum_{j,p} \bar{\psi}(p) \gamma_j \sin(p_j a) \psi(p) + \frac{ib_2}{a} \sum_{j,p} \bar{\psi}(p) \gamma_j \sin(2p_j a) \psi(p) \quad (4.129)$$

Le développement de Taylor donne

$$H_k^{\text{improved}} = i \sum_{j,p} \bar{\psi}(p) \gamma_j \left[p_j (b_1 + 2b_2) - \frac{1}{8} p_j^3 a^2 (b_1 + 8b_2) \right] \psi(p) + O(a^4) \quad (4.130)$$

La comparaison de (4.130) avec le terme cinétique de l'hamiltonien de Dirac dans le continu, nous permet d'établir les relations

$$\begin{cases} b_1 + 2b_2 = 1 \\ b_1 + 8b_2 = 0 \end{cases} \quad (4.131)$$

De même

$$\begin{aligned}
 H_r^{\text{improved}} &= \frac{r}{a} \sum_{p,j} \bar{\psi}(p) \psi(p) - c_1 \frac{r}{a} \sum_{p,j} \bar{\psi}(p) \cos(p_j a) \psi(p) \\
 &- c_2 \frac{r}{a} \sum_{p,j} \bar{\psi}(p) \cos(2p_j a) \psi(p)
 \end{aligned} \tag{4.132}$$

Si on effectue le développement de Taylor nous obtenons.

$$\begin{aligned}
 H_r^{\text{improved}} &= \frac{r}{a} \sum_{p,j} \bar{\psi}(p) \psi(p) - \frac{r}{a} \sum_{p,j} \bar{\psi}(p) \psi(p) (c_1 + c_2) \\
 &- \frac{r}{a} \sum_{p,j} \bar{\psi}(p) \psi(p) p_j^2 a^2 (c_1 + 4c_2) + O(a^4)
 \end{aligned} \tag{4.133}$$

Dans la limite du continu $a \rightarrow 0$, le terme de Wilson disparaît. Nous avons alors

$$\begin{cases} c_1 + c_2 = 1 \\ c_1 + 4c_2 = 0 \end{cases} \tag{4.134}$$

Les systèmes (4.131) et (4.134) ont comme solution

$$b_1 = \frac{4}{3}, \quad b_2 = -\frac{1}{6}, \quad c_1 = \frac{4}{3}, \quad c_2 = -\frac{1}{3} \tag{4.135}$$

À l'approximation des diagrammes en arbre, ces coefficients ont la même valeur quelle que soit la dimension ($d + 1$) considérée et quel que soit le groupe de symétrie de jauge. Notons que le cas particulier

$$b_1 = 1, \quad b_2 = 0, \quad c_1 = \frac{4}{3}, \quad c_2 = -\frac{1}{3} \tag{4.136}$$

correspond uniquement à l'amélioration du terme de Wilson.

La QCD en deux dimensions a certaines propriétés qui simplifient énormément son étude:

- le terme d'interaction magnétique est absent et le facteur des tadpoles vaut $U_0 = 1$ à cause du fait que $U_p = U_p^\dagger = 1$. Seul le terme électrique apparaît dans l'hamiltonien

décrivant les degrés de liberté de jauge qui, d'après (4.82) s'écrit

$$H_g = \sum_{x,k,c} \frac{g_{latt}^2}{2a} E^2(x,k)^2 \quad (4.137)$$

avec $k = \vec{1}$ et $a = 1, \dots, \Lambda_s^2 - 1$.

• une théorie de jauge en $1+1$ dimensions est super-renormalisable, il y a juste un nombre fini de diagrammes de Feynman qui divergent. La dimension canonique du couplage est une puissance inverse d'une longueur

$$g_{latt} = ga \quad (4.138)$$

Les effets quantiques des tadpoles sont alors supprimés dans le secteur fermionique comme $O(g_{latt}^2 a) \rightarrow O(a^3)$ et comme $O(g_{latt}^2 a^2) \rightarrow O(a^4)$ dans le secteur gluonique.

Par conséquent, la restriction de l'amélioration de l'hamiltonien uniquement à l'approximation des diagrammes en arbre est suffisante. Nous nous limitons alors aux valeurs des coefficients b_1, b_2, c_1 et c_2 données par (4.135). Ce programme d'amélioration a été testé dans le cas du modèle de Schwinger [107]. Dans ce qui suit, nous déterminons le spectre de la QCD₁₊₁ sur réseau et la valeur moyenne du champ composite $(\bar{\psi}\psi)(x)$ (le condensat chirale [19], après avoir diagonalisé l'hamiltonien par une méthode variationnelle utilisée aussi dans [107]).

4.4.3 Formulation de l'approche variationnelle et transformation de Foldy-Wouthuysen

Pour illustrer la formulation variationnelle, considérons le cas des fermions libres. D'après (4.126) l'hamiltonien s'écrit:

$$H \equiv H_{free}^{improved} = \frac{b_1}{2a} \sum_{x,k} \bar{\psi}(x) \gamma_k \psi(x+k) + \frac{b_2}{2a} \sum_{x,k} \bar{\psi}(x) \gamma_1 \psi(x+2k)$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{r}{2a} \sum_{z,k} \bar{\psi}(z) \psi(z) - c_1 \frac{r}{2a} \sum_{z,k} \bar{\psi}(z) \psi(z+k) \\
& - c_2 \frac{r}{2a} \sum_{z,k} \bar{\psi}(z) \psi(z+2k)
\end{aligned} \tag{4.139}$$

Ecrivons le spineur ψ à deux composantes sous la forme suivante

$$\psi(z) = \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} \tag{4.140}$$

Nous définissons le vide nu (*bare vacuum*) par

$$\xi|0\rangle = \eta|0\rangle = 0 \tag{4.141}$$

Les deux composantes du spineur sont couplées dans (4.139) via les matrices γ_k . le vide nu n'est pas un état propre de H . Soit $|\Omega_{free}\rangle$ le vide physique et $E_{\Omega_{free}}$ son énergie. Pour découpler les deux composantes du spineur, nous introduisons la transformation unitaire [108],

$$H' = \exp(-iS) H \exp(iS) \tag{4.142}$$

Il s'agit d'une transformation similaire à celle de Foldy-Wouthuysen [109]. Le vide physique peut être exprimé par

$$|\Omega_{free}\rangle = \exp(iS)|0\rangle \tag{4.143}$$

L'opérateur S peut être construit explicitement. Dans les cas des fermions de Wilson ($r \neq 0$) ou des fermions naïfs ($r = 0$), il est donné par [108]

$$\begin{aligned}
S &= \sum_p \theta_p S_p \\
S_p &= -\frac{1}{A_p} \sum_j \psi^\dagger_p \gamma_j \psi_p \frac{\sin p_j a}{2} \\
A_p &= \left[\sum_j \left(\frac{\sin p_j a}{2} \right)^2 \right]^{1/2}
\end{aligned} \tag{4.144}$$

où p est l'opérateur impulsion. Dans l'espace des impulsions, le nouvel hamiltonien H' s'écrit

$$\begin{aligned}
 H' &= \sum_p \left\{ \left[m + \frac{\tau}{2} \left(1 - \sum_j (c_1 \cos p_j a - c_2 \cos 2p_j a) \right) \right] \cos 2\theta_p \right. \\
 &\quad \left. - A_p \left(b_1 + b_2 \sum_j \cos p_j a \right) \sin 2\theta_p \right\} \bar{\psi}(p) \psi(p) \\
 &\quad - \sum_p \left\{ \cos 2\theta_p - \left[m + \frac{\tau}{2} \left(1 - \sum_j (c_1 \cos p_j a - c_2 \cos 2p_j a) \right) \right] \right. \\
 &\quad \left. \frac{\sin 2\theta_p}{A_p (b_1 + b_2 \sum_j \cos p_j a)} \right\} \sum_j \bar{\psi}(p) i\gamma_j \psi_p \frac{\sin p_j a}{4} \psi(p)
 \end{aligned} \tag{4.145}$$

Le choix de θ_p tel que

$$\tan 2\theta_p = \frac{A_p (b_1 + b_2 \sum_j \cos p_j a)}{m + \frac{\tau}{2} \left(1 - \sum_j (c_1 \cos p_j a - c_2 \cos 2p_j a) \right)} \tag{4.146}$$

élimine le terme (impair) couplant les deux composantes du spineur dans (4.145) et minimise l'énergie du vide

$$\begin{aligned}
 E_{\Omega_{free}} &= \langle \Omega_{free} | H | \Omega_{free} \rangle = \langle 0 | H' | 0 \rangle \\
 &= -\mathcal{N}_c \mathcal{N}_f \left\{ \sum_p \left[m + \frac{\tau}{2} \left(1 - \sum_j (c_1 \cos p_j a - c_2 \cos 2p_j a) \right) \right] \cos 2\theta_p \right. \\
 &\quad \left. - A_p \left(b_1 + b_2 \sum_j \cos p_j a \right) \sin 2\theta_p \right\}
 \end{aligned} \tag{4.147}$$

où \mathcal{N}_c et \mathcal{N}_f sont respectivement le nombre de couleurs et le nombre de saveurs. La transformation (4.142) permet de diagonaliser l'hamiltonien décrivant des fermions de Wilson libres. Nous avons

$$H | \Omega_{free} \rangle = E_{\Omega_{free}} | \Omega_{free} \rangle \tag{4.148}$$

avec

$$E_{\Omega_{free}} = -\mathcal{N}_c \mathcal{N}_f \sum_p A'_p \tag{4.149}$$

où

$$A'_p = \sum_p \left\{ \left[m + \frac{c}{a} \left(1 - \sum_j (c_1 \cos p_j a - c_2 \cos 2p_j a) \right) \right]^2 - \left[A_p \left(b_1 + b_2 \sum_j \cos p_j a \right) \right]^2 \right\}^{1/2} \quad (4.150)$$

L'expression (4.150) de A'_p est simplement la relation de dispersion. Dans la limite du continu $a \rightarrow 0$, avec $p_j a$ fixe, nous avons

$$A'_p \rightarrow \sqrt{m^2 + p^2} \quad (4.151)$$

obtenant ainsi la bonne relation de dispersion dans le continu.

4.4.4 État du vide et spectre mésonique du modèle: une seule saveur de quarks

Considérons maintenant l'hamiltonien total

$$H \equiv H^{\text{improved}} = H_F^{\text{improved}} + H_g \quad (4.152)$$

où H_F^{improved} et H_g sont donnés respectivement par (4.126) et (4.137). $H \equiv H^{\text{improved}}$ est un opérateur invariant de jauge

$$[\mathcal{G}^a(x), H] = 0 \quad (4.153)$$

où $\mathcal{G}^a(x)$ est le générateur de la transformation de jauge donnée par (4.92). Nous définissons maintenant le vide physique interactif par

$$|\Omega\rangle = \epsilon^{iS} |0\rangle \quad (4.154)$$

où l'opérateur unitaire S est défini dans l'espace de configuration par

$$S = \sum_{n=1}^{N_{\text{trun}}^{\text{F}}} \theta_n S_n$$

$$\begin{aligned}
 S_1 &= i \sum_{x,k} \psi^\dagger(x) \gamma_k U(x,k) \psi(x+k) \\
 S_2 &= i \sum_{x,k} \psi^\dagger(x) \gamma_k U(x,2k) \psi(x+2k) \\
 S_3 &= i \sum_{x,k} \psi^\dagger(x) \gamma_k U(x,3k) \psi(x+3k) \\
 &\dots
 \end{aligned} \tag{4.155}$$

et $|0\rangle$ est le vide nu défini par

$$\xi(x)|0\rangle = \eta(x)|0\rangle = E_k^2(x)|0\rangle = 0 \tag{4.156}$$

Notons que $\mathcal{G}^2(x)|\Omega\rangle = 0$. Les angles θ_n sont des paramètres variationnels fixés en minimisant l'énergie de l'état fondamental. Ils sont solutions des équations

$$\frac{\partial E_\Omega}{\partial \theta_i} = 0 \tag{4.157}$$

$$\frac{\partial^2 E_\Omega}{\partial \theta_i^2} > 0, \quad i = 1, \dots, N_{\text{trun}}^S \tag{4.158}$$

traduisant la stationnarité de l'énergie de l'état fondamental

$$E_\Omega = \frac{\langle \Omega | H | \Omega \rangle}{\langle \Omega | \Omega \rangle} = \langle 0 | H' | 0 \rangle \tag{4.159}$$

sous leurs variations. La base de la détermination du nouveau hamiltonien H' est l'algèbre de jauge définie par les relations de commutation (4.79), (4.80) et la règle de quantification canonique

$$\{U_{ix}^\dagger, U_{by}\} = \delta_{ab} \delta_{xy} / a \tag{4.160}$$

Les excitations dynamiques ou encore les états massifs sont créés par des opérateurs invariants de jauge de la forme suivante:

$$\hat{O}_n(x) = \sum_{a,b=1}^{N_c} U_{ix}^\dagger U_{x+n}^a \left(\prod_{j=x}^{x+n} U(j) \right)_{ab} U_{bx} \tag{4.161}$$

Cet opérateur annihile une particule au site x et en crée une autre au site $x \pm |n|$. En agissant sur $|\Omega\rangle$ par une superposition d'opérateurs de la forme [107, 110]

$$\hat{O}_n = \sum_{x=1}^N \hat{O}_n(x) \tag{4.162}$$

nous créons un méson de quantité de mouvement nulle et ayant une énergie telle qu'une paire de quark-antiquark soit reliée par un tube de flux électrique (coloré) de longueur na .

Le méson vectoriel formant un état singulet du groupe de jauge est créé en agissant sur $|\Omega\rangle$ par une superposition d'opérateurs V_n , de la forme \hat{O}_n (4.162)

$$\begin{aligned} V_0 &= i \sum_x \bar{v}(x) \gamma_1 v(x) \\ V_1 &= i \sum_{x,k} \bar{v}(x) \gamma_1 U(x,k) v(x+k) \\ V_2 &= i \sum_{x,k} \bar{v}(x) \gamma_1 U(x,2k) v(x+2k) \\ V_3 &= i \sum_{x,k} \bar{v}(x) \gamma_1 U(x,3k) v(x+3k) \\ &\dots \end{aligned} \quad (4.163)$$

Ce premier état excité est décrit par l'état variationnel

$$|V\rangle = \sum_{n=0}^{N_{\text{trun}}^V} A_n [V_n - \langle \Omega | V_n | \Omega \rangle] |\Omega\rangle \quad (4.164)$$

Pour que $|V\rangle$ soit orthogonal à l'état fondamental, nous avons soustrait la valeur moyenne $V_{n,\Omega}$ de l'opérateur V_n . Sa norme est donnée par

$$\langle V | V \rangle = \sum_{n_1, n_2=0}^{N_{\text{trun}}^V} A_{n_2} A_{n_1} U_{n_2 n_1}^V \quad (4.165)$$

où

$$U_{n_2 n_1}^V = \langle V_{n_2} | V_{n_1} \rangle \quad (4.166)$$

La moyenne de l'hamiltonien dans l'état $|V\rangle$ s'écrit

$$\langle V | H | V \rangle = \sum_{n_1, n_2=0}^{N_{\text{trun}}^V} A_{n_2} A_{n_1} H_{n_2 n_1}^V \quad (4.167)$$

où

$$H_{n_2 n_1}^V = \langle V_{n_2} | H | V_{n_1} \rangle \quad (4.168)$$

La stationnarité de

$$E_V = \frac{\langle V|H|V \rangle}{\langle V|V \rangle} \quad (4.169)$$

sous la variation des coefficients A_n

$$\frac{\partial E_V}{\partial A_0} = \frac{\partial E_V}{\partial A_1} = \dots = \frac{\partial E_V}{\partial A_n} = 0 \quad (4.170)$$

est équivalente à

$$\begin{aligned} \sum_{n_1=0}^{N_{\text{trun}}^V} (H_{n_2 n_1}^V - E_V U_{n_2 n_1}^V) A_{n_1} &= 0 \\ \det|H^V - E_V U^V| &= 0 \end{aligned} \quad (4.171)$$

Si nous classons les valeurs propres par ordre croissant $E_0 \leq E_1 \leq \dots \leq E_{N_{\text{trun}}^V}$, la masse du méson vectoriel est donnée par:

$$M_V = E_0 - E_\Omega \quad (4.172)$$

Le choix des paramètres de troncature N_{trun}^V et N_{trun}^S est guidé par la convergence des résultats physiques. Nous pouvons estimer la masse du meson vectoriel dans la limite du continu à partir de la relation

$$\frac{M_V}{g} = \frac{a M_V}{g_{\text{lat}}} \quad (4.173)$$

La formulation de la théorie des champs quantiques sur réseau à l'aide des fermions de Wilson brise explicitement la symétrie chirale. Cette brisure de symétrie chirale est traduite par les identités de Ward (4.45). Par conséquent, le condensat fermionique $\langle \bar{v}v \rangle_{free}$ est différent de zéro dans la limite $m \rightarrow 0$ et devrait être soustrait [111, 112]

$$\langle \bar{v}v \rangle_{sub} = \langle \bar{v}v \rangle - \langle \bar{v}v \rangle_{free} \quad (4.174)$$

où, dans le cas d'une seule saveur,

$$\langle \bar{v}v \rangle = \frac{1}{L \mathcal{N}_z} \langle \Omega | \bar{v}v | \Omega \rangle_{m=0} \quad (4.175)$$

et

$$\begin{aligned}
\langle \bar{\psi}\psi \rangle_{free} &= \frac{1}{L N_c} \frac{\partial E_{\Omega_{free}}}{\partial m} \Big|_{m=0} \\
&= -\frac{1}{2^r} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dpa \left\{ \frac{r}{2} \left(1 - \sum_j (c_1 \cos p_j a - c_2 \cos 2p_j a) \right) \right\} / \\
&\quad \left\{ \left[\frac{r}{2} \left(1 - \sum_j (c_1 \cos p_j a - c_2 \cos 2p_j a) \right) \right]^2 \right. \\
&\quad \left. - \left[\frac{\sum_j \sin p_j a}{a} \left(b_1 + b_2 \sum_j \cos p_j a \right) \right]^2 \right\}^{1/2} \quad (4.176)
\end{aligned}$$

Dans (4.176) L est le nombre de sites sur le réseau et $j = \hat{i}$. $\langle \bar{\psi}\psi \rangle_{free}$ dépend de la valeur de r choisi. Si $b_1 = 1$, $b_2 = 0$, $c_1 = 1$ et $c_2 = 0$ (fermions de Wilson non améliorés)

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle_{free} = -\frac{1}{2^r} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dpa \frac{2r \sin^2 pa/2}{[(2r \sin^2 pa/2)^2 + \sin^2 pa]^{1/2}} \quad (4.177)$$

si $r = 1$

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle_{free} = -\frac{1}{2} \quad (4.178)$$

qui ne s'annule pas à cause du terme de Wilson.

Dans la limite du continu, le condensat chirale est donné par

$$\frac{\langle \bar{\psi}\psi \rangle_{cont}}{g} = \frac{\langle \bar{\psi}\psi \rangle_{sub}}{g_{latt}} \quad (4.179)$$

Nous supposons que les membres de droite de (4.173) et (4.179) sont indépendants g_{latt} .

La brisure spontanée de la symétrie chirale est causée par le phénomène de l'anomalie chirale. Il n'y a pas de pions interprétés comme des bosons de Goldstone dans le spectre de la théorie des champs quantiques en $1+1$ dimensions [94]. Dans le cas des fermions de Wilson, nous ne pouvons pas ajuster le couple (r, m) appartenant à l'espace des paramètres de façon à atteindre la limite chirale comme dans le cas de la QCD $_{3+1}$. Par contre, elle peut être approximée par la limite $m \rightarrow 0$ pour autant que l'erreur due à la discrétisation soit suffisamment petite. Dans le cas des fermions de Wilson, cette approximation n'est

pas justifiée [113] quand g_{lat} et a ont des valeurs finies à cause de l'erreur $O(ra)$. Mais si on introduit des termes d'amélioration, elle devient physiquement raisonnable [114, 107] parce que le terme de brisure de la symétrie chirale est assez petit, i.e., $O(ra^2)$.

4.4.5 Résultats numériques

Nous avons diagonalisé l'hamiltonien en adoptant une méthode variationnelle. La précision de la méthode variationnelle, fréquemment appliquée à des cas où l'énergie fondamentale ne peut être obtenue perturbativement, dépend d'un choix judicieux de la classe des fonctions d'essai. Dans notre problème, cette classe est donnée par (4.154) dans le cas de l'état du vide et par (4.164) dans le cas du premier état excité, le méson vectoriel. Les deux classes de fonctions d'essai (4.154), (4.164) dépendent respectivement des paramètres de troncature N_{trun}^S et N_{trun}^V correspondant chacun à des nombres de paramètres variationnels.

Dans le calcul numérique, nous avons pris $N_{trun}^S = 3$ et $N_{trun}^V = 2$. Si $N_{trun}^S = 3$, l'énergie de l'état fondamental

$$E_\Omega = \frac{\langle \Omega | H | \Omega \rangle}{\langle \Omega | \Omega \rangle} = \langle 0 | H' | 0 \rangle \quad (4.180)$$

et le condensat chirale

$$\chi = \langle \bar{\psi} \psi \rangle = \frac{1}{L\Lambda_c} \langle \Omega | \bar{\psi} \psi | \Omega \rangle_{m=0} \quad (4.181)$$

dépendent de trois paramètres variationnels:

$$E_\Omega = E_\Omega(\theta_1, \theta_2, \theta_3), \quad \chi = \chi(\theta_1, \theta_2, \theta_3) \quad (4.182)$$

Pour chaque valeur fixe du couplage $1/g_{lat}$, nous avons déterminé les paramètres θ_1 , θ_2 et θ_3 en cherchant une solution du système non-linéaire

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_\Omega}{\partial \theta_i} &= 0 \\ \frac{\partial^2 E_\Omega}{\partial \theta_i^2} &> 0, \quad i = 1, \dots, 3 \end{aligned} \quad (4.183)$$

Donc à chaque valeur de $1/g_{latt}$, correspond une solution de (4.183) nous permettant de déterminer le condensat chirale ainsi que l'énergie de l'état fondamental.

Après cette étape, avec $N_{trun}^V = 2$, la diagonalisation de la matrice (4.171) de taille 3×3 nous a fourni la masse du méson vectoriel.

Dans le domaine $1 \leq 1/g_{latt}^2 \leq 2$, les résultats semblent converger mais leur dépendance au paramètre de Wilson r persiste. Cette dépendance n'est pas due en fait à la valeur du nombre de paramètres variationnels mais plutôt au terme de Wilson $O(ra)$ qui est la principale source de l'erreur. L'hamiltonien amélioré corrige cette erreur, permettant ainsi de réduire la dépendance des résultats physiques du paramètre de Wilson et la violation d'invariance d'échelle.

Dans la **Figure 4.3** et la **Figure 4.4**, nous présentons $(\bar{u}u)_{sub}/g_{latt}$ en fonction de $1/g_{latt}^2$, en prenant des fermions de Wilson. Dans la **Figure 4.3** le groupe de jauge est $SU(2)$, alors que dans le cas de la **Figure 4.4** le groupe de jauge est $SU(3)$. De nouveau, avec des fermions de Wilson, la **Figure 4.5** et la **Figure 4.6** présentent respectivement aM_V/g_{latt} en fonction de $1/g_{latt}^2$ dans les cas des groupes de jauge $SU(2)$ et $SU(3)$. Nous constatons que les résultats correspondant à $r = 0.1$ diffèrent d'une manière considérable des résultats correspondant à $r = 1.0$. Cette différence est due à l'erreur d'ordre $O(ra)$ du terme de Wilson.

Les résultats dans le cas de l'hamiltonien amélioré sont présentés dans les **Figure 4.7**, **Figure 4.8**, **Figure 4.9** et **Figure 4.10**. D'après ces figures, nous observons que la différence entre le cas $r = 0.1$ et $r = 1.0$ est réduite. Les résultats du condensat chirale coïncident complètement.

Nous avons étudié le comportement du condensat chirale ainsi que la masse du premier état excité dans la limite Λ_s^2 large.

Dans la **Figure 4.11**, nous présentons $(\bar{u}u)$ en fonction de $1/\Lambda_s^2$, $\Lambda_s^2 = 3, 4, 5, 6$. Nous avons comparé nos résultats numériques avec le calcul théorique de Zhitnitsky [115]

(équation (4.117) dans le régime du couplage faible). Nos résultats numériques sont en parfait accord avec les prédictions théoriques de Zhitnitsky.

Dans la **Figure 4.12**, nous présentons la masse du premier état excité en fonction de $1/\Lambda^2$, $\Lambda^2 = 3, 4, 5, 6$. Les résultats numériques sont de nouveau en accord avec les prédictions théoriques de Bhattacharya [102] (équation (4.118)).

4.4.6 Conclusion

Nous avons discuté dans ce chapitre les notions de bases de la théorie de jauge sur un réseau espace-temps sous sa forme hamiltonienne et lagrangienne. Nous avons montré son utilité comme théorie physique. Nous avons montré aussi comment en préservant l'invariance de jauge, les techniques du réseau permettent une régularisation non-perturbative de la QCD. Nous avons discuté les difficultés de cette méthode de régularisation comme le dédoublement des fermions et la symétrie chirale, la violation d'invariance d'échelle et la limite du continu. Une discussion des solutions à ces problèmes était apportée. Dans le cadre du programme d'amélioration de la discrétisation, nous avons étudié la QCD en $1 + 1$ dimensions en utilisant une formulation hamiltonienne. Nous avons calculé le condensat chirale et la masse de l'état singulet du groupe de jauge, le méson vectoriel, en utilisant un hamiltonien amélioré $O(a^2)$. En comparaison avec les résultats correspondant aux fermions de Wilson sans amélioration, nous avons observé une réduction significative de l'erreur $O(ra)$. Nous avons présenté aussi des résultats dans le cas de différents groupes de jauge ($\Lambda^2 = 2, 3, 4, 5, 6$). Nous avons abouti à une bonne concordance avec les calculs analytiques.

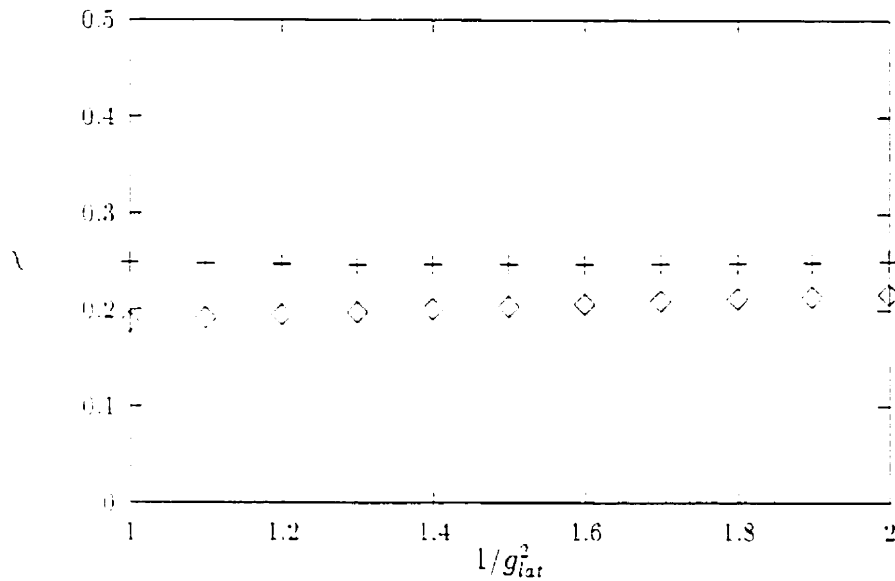


Figure 4.3: Le condensat chiral avec des fermions de Wilson et groupe de jauge $SU(2)$. $\chi = -(\bar{\psi}\psi)_{sub}/(g_{lat}^2 \mathcal{N}_c)$ en fonction de $1/g_{lat}^2$ dans le cas $\mathcal{N}_c = 2$. Croix: $r = 0.1$, losanges: $r = 1$.

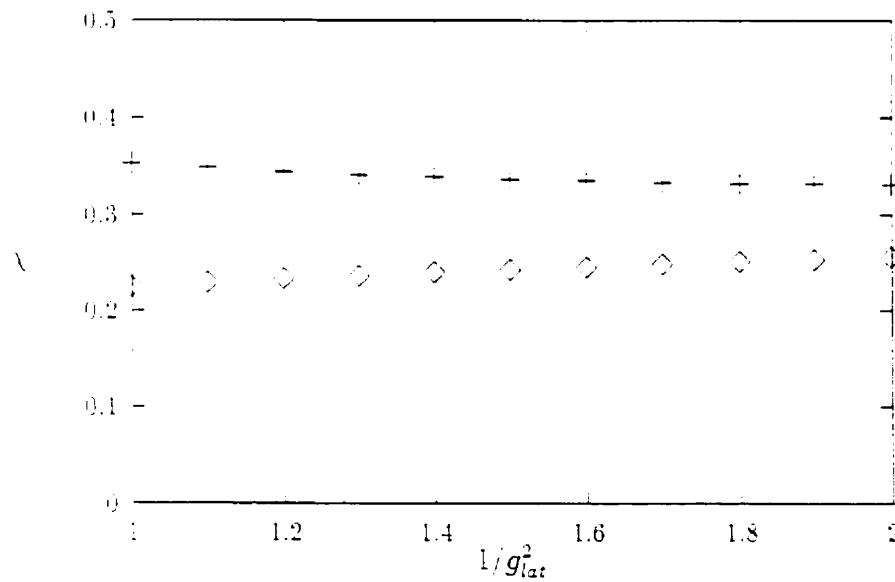


Figure 4.4: Le condensat chiral avec des fermions de Wilson et groupe de jauge $SU(3)$. $\chi = -(\bar{\psi}\psi)_{sub}/(g_{lat}^2 \mathcal{N}_c)$ en fonction de $1/g_{lat}^2$ dans le cas $\mathcal{N}_c = 3$. Croix: $r = 0.1$, losanges: $r = 1$.

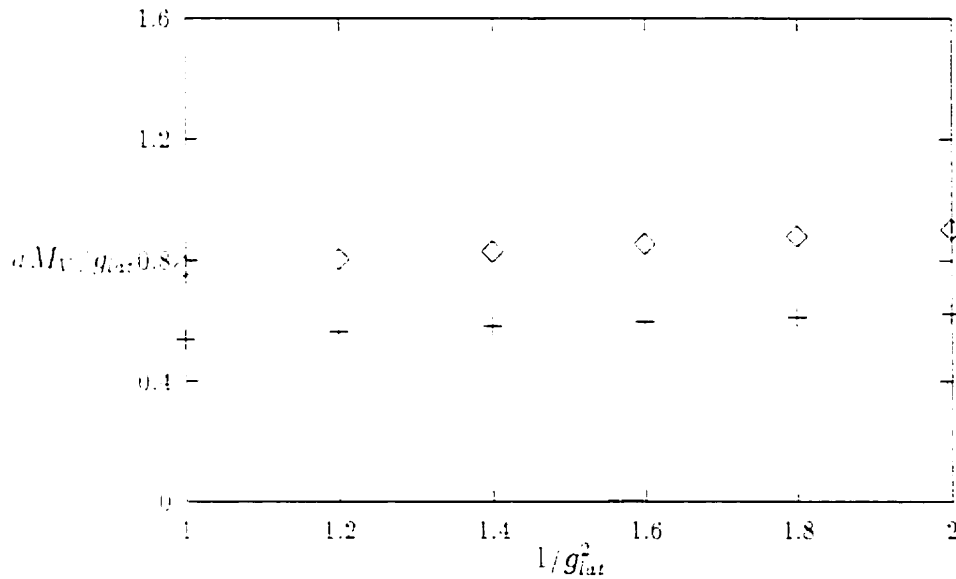


Figure 4.5: La masse du boson vectoriel avec avec des fermions de Wilson et groupe de jauge $SU(2)$. aM_V/g_{lat} en fonction de $1/g_{lat}^2$ dans le cas $N_c = 2$. Croix: $r = 0.1$. losanges: $r = 1$.

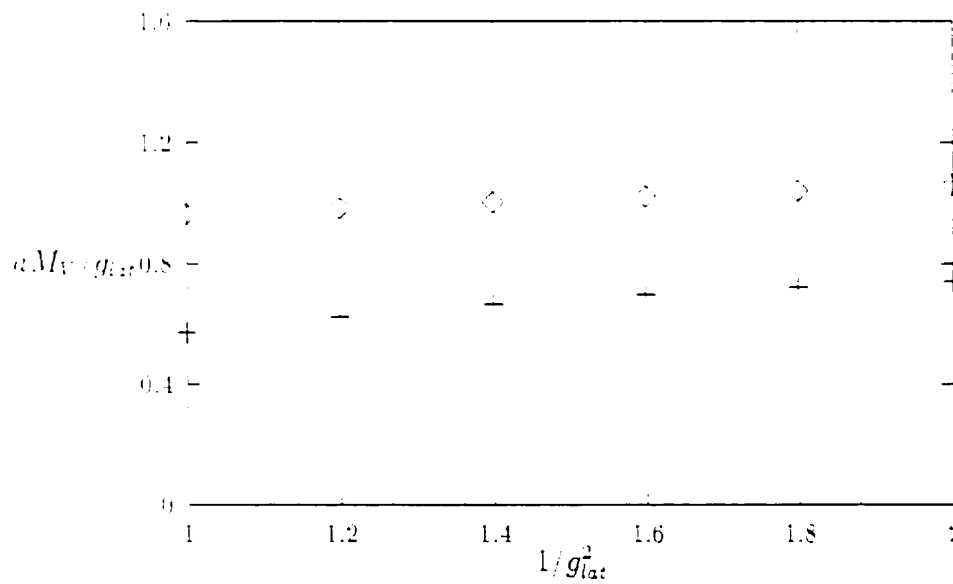


Figure 4.6: La masse du boson vectoriel avec avec des fermions de Wilson et groupe de jauge $SU(3)$. aM_V/g_{lat} en fonction de $1/g_{lat}^2$ dans le cas $N_c = 3$. Croix: $r = 0.1$. losanges: $r = 1$.

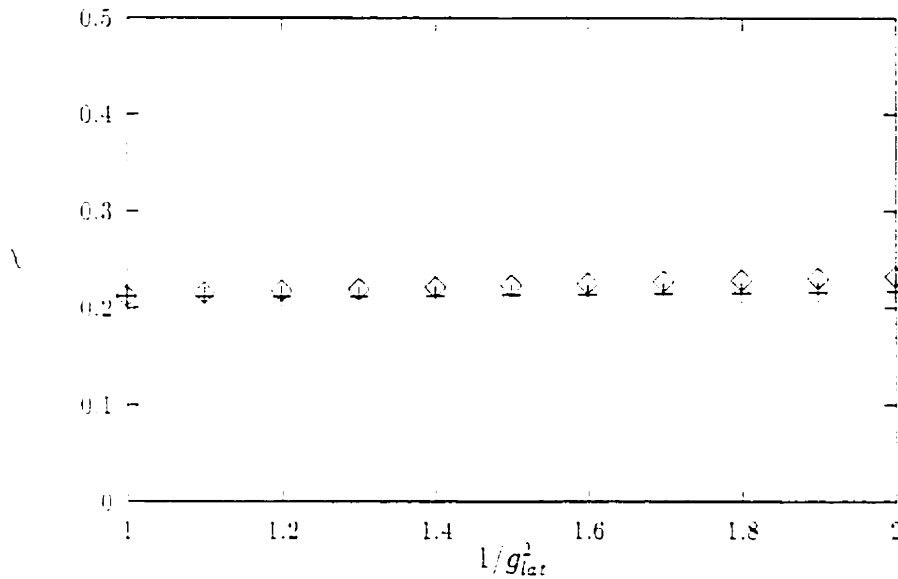


Figure 4.7: **Le condensat chiral avec des fermions de Wilson améliorés et groupe de jauge SU(2).** $\chi = -(\bar{\psi}\psi)_{sub}/(g_{latt}\Lambda_c)$ en fonction de $1/g_{latt}^2$ dans le cas $\Lambda_c = 2$. Croix: $r = 0.1$, losanges: $r = 1$.

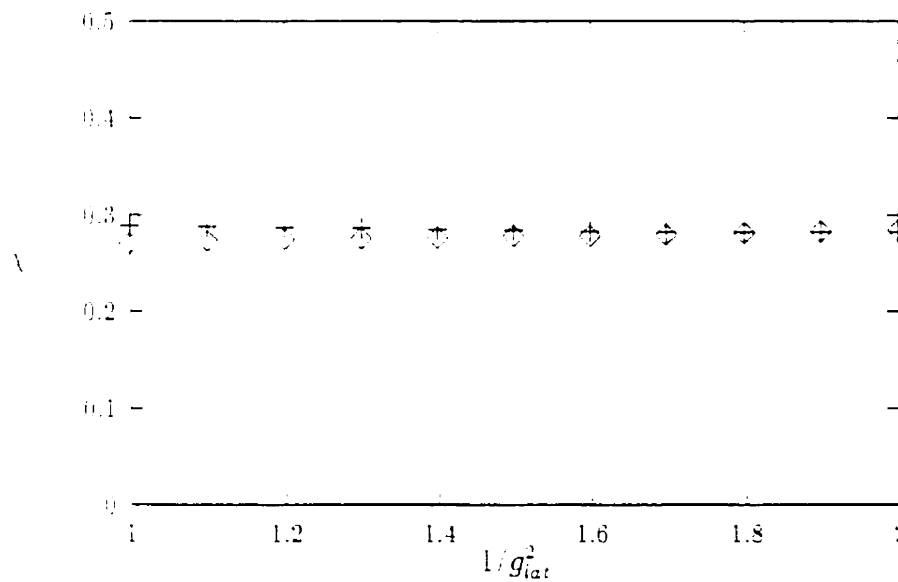


Figure 4.8: **Le condensat chiral avec des fermions de Wilson améliorés et groupe de jauge SU(3).** $\chi = -(\bar{\psi}\psi)_{sub}/(g_{latt}\Lambda_c)$ en fonction de $1/g_{latt}^2$ dans le cas $\Lambda_c = 3$. Croix: $r = 0.1$, losanges: $r = 1$.

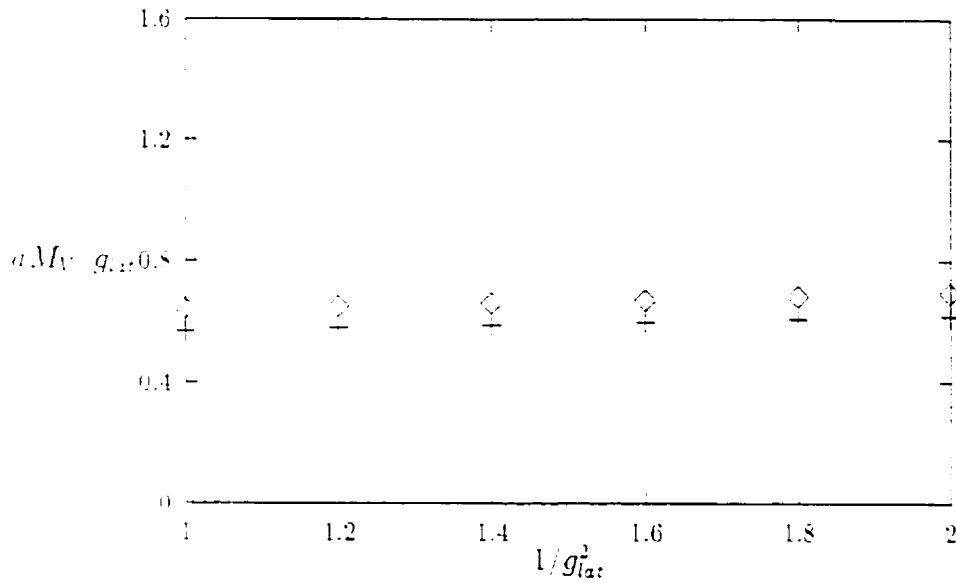


Figure 4.9: La masse du boson vectoriel avec avec des fermions de Wilson améliorés et groupe de jauge $SU(2)$. aM_V/g_{lat} en fonction de $1/g_{lat}^2$, dans le cas $N_c = 2$. Croix: $r = 0.1$, losanges: $r = 1$.

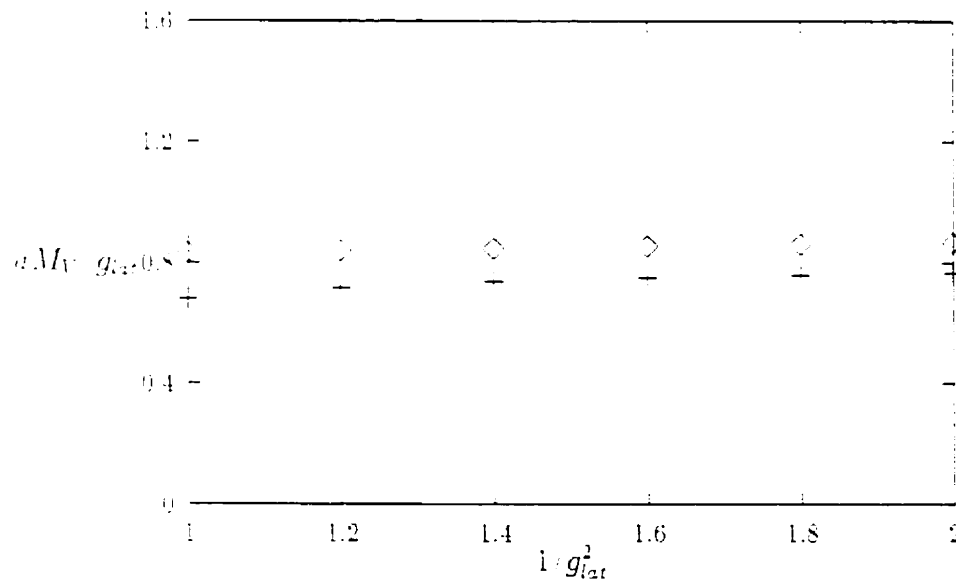


Figure 4.10: La masse du boson vectoriel avec avec des fermions de Wilson améliorés et groupe de jauge $SU(3)$. aM_V/g_{lat} en fonction de $1/g_{lat}^2$, dans le cas $N_c = 3$. Croix: $r = 0.1$, losanges: $r = 1$.

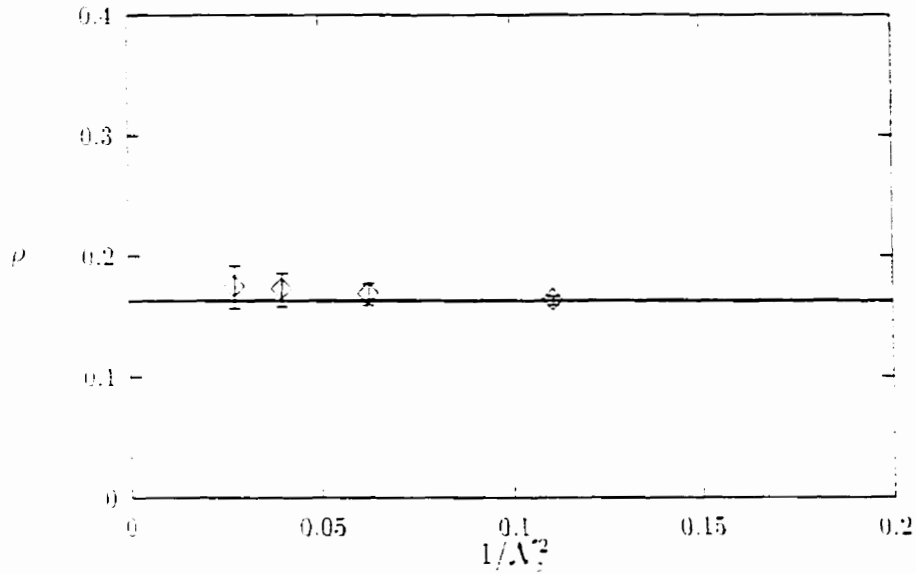


Figure 4.11: **Le condensat chiral en fonction du nombre de couleurs.** $\rho = -\langle \bar{\psi}\psi \rangle_{cont} / (g\Lambda_c^{3/2})$ en fonction de $1/\Lambda_c^2$. Les barres d'erreur sont estimées à partir des résultats correspondant à différentes valeurs de r . La ligne pleine est le résultat analytique de la référence [115].

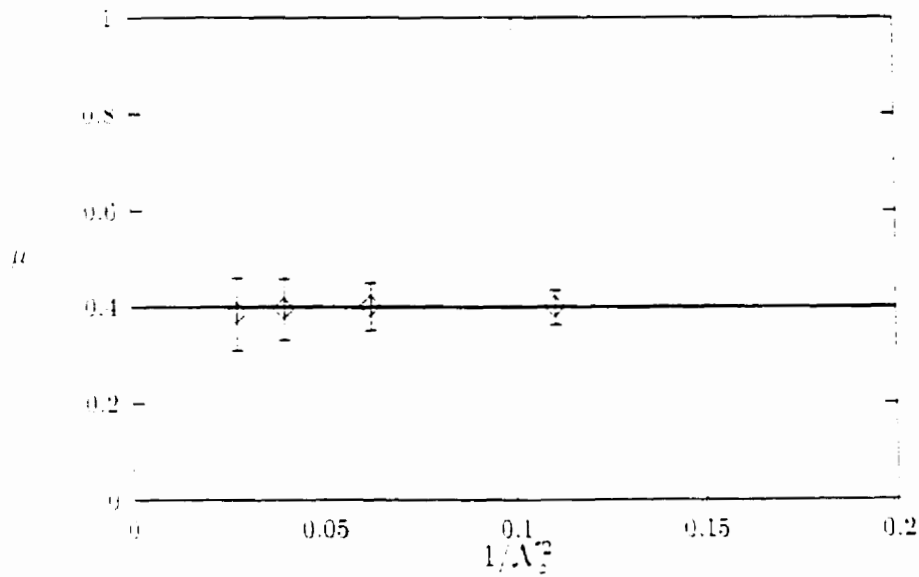


Figure 4.12: **La masse du boson vectoriel en fonction du nombre de couleurs.** $\mu = M_V / (g\sqrt{N_c + 1})$ en fonction de $1/\Lambda_c^2$. Légende identique à la **Figure 4.11**.

Conclusion générale

Dans cette thèse, nous avons étudié les aspects physiques non-perturbatifs en élaborant une approche numérique. Nous avons ainsi développé une méthode consistant à construire un hamiltonien effectif décrivant la physique de basse énergie, à partir d'une action donnée via la méthode Monte-Carlo. Le parcours habituel dans l'élaboration d'une nouvelle approche consiste dans un premier temps à l'appliquer à un modèle simple. Le but est d'acquérir un savoir-faire applicable à des modèles plus complexes. Nous avons alors choisi la mécanique quantique comme un premier modèle d'application de la nouvelle méthode Monte-Carlo hamiltonienne. Les résultats que nous avons obtenus sont très encourageants. Toutes les raisons physiques de la construction de l'hamiltonien effectif que nous avons avancées concernaient le domaine de la théorie des champs et de la mécanique statistique. Un hamiltonien effectif permettrait d'aborder numériquement des problèmes physiques liés à ces deux domaines. En effet, en théorie des champs quantiques, le nombre de particules n'est pas conservé: un champ quantique est une superposition d'une infinité de modes de vibration harmonique et en mécanique statistique les phénomènes critiques, par exemple, mettent aussi en jeu le couplage d'un nombre de degrés de liberté infini. L'application de la méthode Monte-Carlo hamiltonienne à ces modèles est présentement sous investigation.

Quelle est l'interprétation physique de l'action quantique que nous avons introduite au chapitre 2? Premièrement l'intégrale de chemin implique l'action classique et sa description de l'évolution quantique est contenue dans la somme des contributions de plusieurs chemins incluant des trajectoires classiques. La plupart des chemins intervenant sont

différents des trajectoires classiques. Dans notre action quantique, un seul chemin intervient par construction. Il s'agit d'un chemin classique, solution de l'action quantique. Les effets quantiques sont maintenant contenus dans les coefficients de la nouvelle action. Quelle est l'interprétation de la trajectoire correspondant à l'action quantique? Décrit-elle le mouvement d'une particule? En fait, nous avons introduit une particule effective (quasi-particule). Son comportement est différent de celui de la particule quantique: nous avons vu que sa masse change. Néanmoins, cette particule effective se déplace d'une position initiale à une position finale durant un certain temps avec la même probabilité de transition que la particule quantique! Par ailleurs, le concept de particule effective ou quasi-particule est souvent introduit. Le polaron ou la paire de Cooper dans la théorie BCS de la supraconductivité en sont des exemples. Les résultats que nous avons obtenus dans le cas des systèmes à un degré de liberté sont les suivants:

- la valeur des paramètres de l'action quantique proche de celle des paramètres de l'action classique quand le temps de l'amplitude de transition est court.
- la convergence des paramètres de l'action quantique avec le temps de l'amplitude de transition.
- des paramètres d'action quantique indépendants des conditions aux limites conformément à ce qui été postulé par la conjecture.

Grâce à ces résultats, nous pouvons alors envisager d'étendre cette méthode à des systèmes ayant plus d'un degré de liberté. Nos futurs projets porteront sur le chaos quantique.

Nous avons étudié la chromodynamique quantique (QCD) sur un réseau bidimensionnel en utilisant une formulation hamiltonienne. Pour minimiser les erreurs dues à la régularisation du modèle sur le réseau, nous avons employé un hamiltonien amélioré. Étant donné que dans le secteur de jauge l'erreur due à la discrétisation est de l'ordre a^2 et qu'en $1 + 1$ dimensions les contributions des tadpoles sont absentes, nous avons considéré uniquement l'amélioration du secteur fermionique pour minimiser l'erreur d'ordre

a. De plus, la QCD en deux dimensions est une théorie de jauge super-renormalisable. Grâce à cette propriété, nous avons montré comment les résultats numériques du condensat chiral et du spectre de masse s'améliorent en fixant les coefficients de l'hamiltonien amélioré uniquement à l'ordre zéro en \hbar (à l'approximation des diagrammes en arbre). La prochaine étape intéressante sera de généraliser cette méthode à la QCD en $3 + 1$ dimensions. Certes, cette généralisation sera laborieuse: en plus du nombre extrêmement élevé de degrés de liberté, il faudra également tenir compte de l'amélioration du secteur de jauge et du secteur fermionique. Nous pensons néanmoins que cette opération sera réalisable et pourra apporter des contributions dans la compréhension de la QCD à basse énergie.

Pour terminer, ajoutons que la méthode numérique que nous avons adaptée pour calculer l'action renormalisée en mécanique quantique pourrait s'appliquer à la détermination des actions améliorées utilisées dans les simulations des théories des champs quantiques sur réseau. Ces actions améliorées, tout comme l'action renormalisée que nous avons introduite en mécanique quantique, contiennent des corrections quantiques et permettent de balayer l'espace de configuration physique dans les simulations Monte-Carlo d'une manière plus efficace que l'action classique et permettent d'accélérer la convergence vers la limite du continu. L'exemple des théories de champs quantiques sur réseau montre que le rôle joué par les actions améliorées ou quantiques est d'une extrême importance. Après tout, la quantification d'une théorie des champs classiques définis dans le continu ou sur un réseau revient à déterminer l'action quantique. Nous pouvons appliquer la même chose à la mécanique quantique grâce à notre définition de l'action renormalisée. Nos futures perspectives de recherches portent sur l'approfondissement de ce lien et la sophistication de notre algorithme de détermination de l'action renormalisée afin de pouvoir élargir la dimension de l'espace des paramètres.

Annexe A

Processus stochastiques

Un processus stochastique $x(\tau)$ est défini par la donnée de la famille de probabilités

$$W(x_0\tau_0, x_1\tau_1, \dots, x_N\tau_N)dx_0\dots dx_N, \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{A.1})$$

de trouver $x(\tau)$ entre x_0 et $x_0 + dx_0$, x_1 et $x_1 + dx_1$, ..., x_N et $x_N + dx_N$ aux temps τ_0 , τ_1 , τ_2 , ..., τ_N . Ces densités de probabilité satisfont aux relations de compatibilité.

(i) $W(x_0\tau_0, x_1\tau_1, \dots, x_N\tau_N) \geq 0$

(ii) $\int dx_0 dx_1 \dots dx_N W(x_0\tau_0, x_1\tau_1, \dots, x_N\tau_N) = 1$

(iii) $W(x_0\tau_0, x_1\tau_1, \dots, x_N\tau_N)$ est une fonction symétrique de ses arguments

$$x_j\tau_j, \quad j = 0, 1, \dots, N$$

(iv) $\int dx_N W(x_0\tau_0, x_1\tau_1, \dots, x_N\tau_N) = W(x_0\tau_0, x_1\tau_1, \dots, x_{N-1}\tau_{N-1})$

On considère la probabilité conditionnelle de trouver $x(\tau)$ entre x_N et $x_N + dx_N$ au temps τ_N sachant que $x(\tau)$ se trouvait entre x_0 et $x_0 + dx_0$, x_1 et $x_1 + dx_1$, ..., x_{N-1} et $x_{N-1} + dx_{N-1}$ aux temps $\tau_0 \leq \tau_1 \leq \dots \leq \tau_{N-1}$ ($\tau_{N-1} \leq \tau_N$)

$$p(x_N\tau_N | x_{N-1}\tau_{N-1}, \dots, x_0\tau_0) = \frac{W(x_0\tau_0, x_1\tau_1, \dots, x_N\tau_N)}{W(x_0\tau_0, x_1\tau_1, \dots, x_{N-1}\tau_{N-1})} dx_N \quad (\text{A.2})$$

Le processus a la propriété de Markov si

$$p(x_N \tau_N | x_{N-1} \tau_{N-1}, \dots, x_0 \tau_0) \equiv p(x_N \tau_N | x_{N-1} \tau_{N-1}) \quad (\text{A.3})$$

est indépendant des temps $\tau_0, \dots, \tau_{N-2}$ antérieurs à τ_{N-1} et $p(x_2 \tau_2 | x_1 \tau_1)$ est la probabilité de transition du processus. Pour un processus de Markov, on conclut de (A.2) que ce processus est entièrement déterminé par la probabilité de transition et la donnée de la distribution initiale $W(x_0 \tau_0)$. On déduit en effet de (A.2) et (A.3) que $(\tau_0 \leq \tau_1 \leq \dots \leq \tau_{N-1} \leq \tau_N)$

$$\begin{aligned} W(x_0 \tau_0, x_1 \tau_1, \dots, x_N \tau_N) dx_0 \dots dx_N &= \\ &= p(x_N, \tau_N | x_{N-1}, \tau_{N-1}), \dots, p(x_1, \tau_1 | x_0, \tau_0) W(x_0 \tau_0) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

En exprimant la relation de compatibilité (iv)

$$\int dx_1 W(x_0 \tau_0, x_1 \tau_1, x_2 \tau_2) = W(x_0 \tau_0, x_2 \tau_2) \quad (\text{A.5})$$

à l'aide de (A.4), on obtient les équations de Chapman-Kolmogorov

$$\int dx_1 p(x_2, \tau_2 | x_1, \tau_1) p(x_1, \tau_1 | x_0, \tau_0) = p(x_2, \tau_2 | x_0, \tau_0) \quad (\text{A.6})$$

Finalement, le processus est (faiblement) stationnaire si

$$p(x_2, \tau_2 | x_1, \tau_1) = p(x_2, (\tau_2 - \tau_1) | x_1, 0) \quad (\text{A.7})$$

Dans ce cas, on peut associer un générateur G au processus, de telle sorte que

$$P(x_2, \tau | x_1, 0) = (x_2 | \exp(-\tau G) | x_1), \quad \tau \geq 0 \quad (\text{A.8})$$

soit le noyau intégral du semi-groupe $\exp(-\tau G)$. Le mouvement brownien correspond aux choix particuliers (1.6).

À tout processus de Markov faiblement stationnaire (avec espace des états continu ou discret) on peut en principe associer une intégrale de chemin à l'aide des formules (A.4) et (A.5), comme nous l'avons fait dans la section 1.1.3 pour le mouvement brownien.

Annexe B

Formule de Trotter

Nous démontrons la formule de Trotter dans le cas d'opérateurs bornés¹

$$\|A\| = \sup_{\|\varphi\|=1} \|A\varphi\| < \infty \quad (\text{B.1})$$

Il faut montrer que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|C^n - D^n\| = 0 \quad (\text{B.2})$$

où on a posé $C = \exp((A+B)/n)$, $D = \exp(A/n)\exp(B/n)$, les exponentielles étant définies par leurs séries convergentes en norme. Ainsi

$$\|C\| \leq \exp\left(\frac{1}{n}\|A+B\|\right) \leq \exp\left(\frac{1}{n}(\|A\| + \|B\|)\right) \quad (\text{B.3})$$

$$\|D\| \leq \|\exp\left(\frac{A}{n}\right)\| \|\exp\left(\frac{B}{n}\right)\| \leq \exp\left(\frac{1}{n}(\|A\| + \|B\|)\right) \quad (\text{B.4})$$

De plus le développement des exponentielles au premier ordre en $1/n$ conduit à

$$C = I + \frac{1}{n}(A+B) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right) \quad (\text{B.5})$$

et

$$D = \left(I + \frac{1}{n}A + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right)\right) \left(I + \frac{1}{n}B + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right)\right) \quad (\text{B.6})$$

¹La démonstration s'étend à une classe d'opérateurs non bornés comprenant ceux qui nous intéressent dans les applications au mouvement brownien et à la mécanique quantique [26].

ce qui entraîne

$$\|C - D\| = \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right) \quad (\text{B.7})$$

En estimant l'identité

$$C^n - D^n = \sum_{k=1}^n C^{k-1} (C - D) D^{n-k} \quad (\text{B.8})$$

terme à terme à l'aide de (B.3), (B.4) et (B.7) on obtient

$$\begin{aligned} \|C^n - D^n\| &\leq \|C - D\| \sum_{k=1}^n \|C\|^{k-1} \|D\|^{n-k} \\ &\leq n \|C - D\| \exp\left(\frac{n-1}{n} (\|A + B\|_1)\right) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{n}\right) \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

ce qui démontre (B.2).

Annexe C

Intégrale gaussienne

On effectue sur (1.41) le changement de variables (A^{-1} existe à cause de (1.42))

$$x = A^{-1}a + y \quad (\text{C.1})$$

Utilisant la symétrie de A et A^{-1} , (1.41) s'écrit

$$I(A, a) = \exp\left(\frac{1}{2}(a, A^{-1}a)\right) \int dy \exp\left(\frac{1}{2}(y, Ay)\right) \quad (\text{C.2})$$

En vertu de l'hypothèse (1.41), A est de la forme

$$A = A_1 + iA_2, \quad A_1 = \Re A, \quad A_2 = \Im A. \quad (\text{C.3})$$

où A_1 et A_2 sont des matrices réelles symétriques simultanément diagonalisables. Il existe donc une transformation orthogonale $\bar{y} = \mathcal{O}y$, de jacobien égal à 1, qui diagonalise A .

Ainsi

$$\int dy \exp\left(\frac{1}{2}(y, Ay)\right) = \prod_{j=1}^n \int d\bar{y}_j \exp\left(-\frac{1}{2}\lambda_j \bar{y}_j^2\right) \quad (\text{C.4})$$

$$= \prod_{j=1}^n \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_j}} = \sqrt{2\pi}^n (\det A)^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{C.5})$$

d'où le résultat (1.44).

Annexe D

Calcul des déterminants des fluctuations et formule de Van Vleck

D.1 Calcul des déterminants par la méthode de Gelfand-Yaglom

La première étape consiste à montrer que l'intégrale des fluctuations (1.100) est donnée par

$$\int_{0,t_0}^{0,} d[\xi(\cdot)] \exp\left(\frac{i}{2\hbar} (\xi, D\xi)\right) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar g(t,t_0)}} \quad (\text{D.1})$$

où $g(t, t_0)$ est la solution de l'équation différentielle

$$\left\{ m \frac{d^2}{dt^2} + V''(x_2(t)) \right\} g(t, t_0) = 0 \quad (\text{D.2})$$

avec conditions initiales

$$g(t_0, t_0) = 0, \quad \frac{d}{dt} g(t, t_0) \Big|_{t=t_0} = 1 \quad (\text{D.3})$$

La version discrétisée de (1.100) est

$$\left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \right)^{N-1} \int d\xi_1 \dots d\xi_N \exp \left[\frac{i}{2\hbar} \sum_{k=0}^N \left(\frac{m}{\varepsilon} (\xi_{k+1} - \xi_k)^2 - \varepsilon \mu_k \xi_k^2 \right) \right] \quad (\text{D.4})$$

On a posé $\xi_k = \xi(\tau_k)$, ($\xi_0 = \xi_{N+1} = 0$), $\mu_k = V''(x_z(\tau_k))$, $k = 0, \dots, N$, $t_k = t_0 + k\varepsilon$, $\varepsilon = (t - t_0)/(N + 1)$. D_N est la matrice $N \times N$

$$D_N = \frac{m}{\varepsilon} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & & \vdots \\ 0 & -1 & 2 & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & -1 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} - \varepsilon \begin{pmatrix} \mu_1 & 0 & \dots & & 0 \\ 0 & \mu_2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots & \\ & & & & 0 \\ 0 & \dots & & 0 & \mu_N \end{pmatrix} \quad (\text{D.5})$$

On peut écrire la formule (1.100) sous la forme

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\varepsilon \det(\frac{\varepsilon}{m} D_N))^{-\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar g(t, t_0)}} \quad (\text{D.6})$$

avec les définitions

$$g(t, t_0) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} g_N, \quad g_N = \varepsilon \Delta_N, \quad \Delta_N = \det(\frac{\varepsilon}{m} D_N) \quad (\text{D.7})$$

Pour calculer Δ_N , on applique la formule du développement du déterminant selon les éléments de la dernière ligne de la matrice $(\varepsilon/m)D_N$. Cela conduit à la formule de récurrence¹

$$\Delta_{N+1} = \left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} \mu_{N+1}\right) \Delta_N - \Delta_{N-1} \quad (\text{D.8})$$

En examinant les matrices D_1 et D_2 , on voit que les conditions initiales pour cette équation récurssive sont

$$\Delta_1 = 2 - \frac{\varepsilon^2}{m} \mu_1, \quad \Delta_0 = 1, \quad \Delta_{-1} = 0 \quad (\text{D.9})$$

compte tenu des définitions (D.7), la relation (D.8) peut se récrire comme

$$m \frac{\Delta_{N+1} - 2\Delta_N + \Delta_{N-1}}{\varepsilon^2} + \mu_{N+1} \Delta_N = 0 \quad (\text{D.10})$$

$$g_1 = \varepsilon \left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} \mu_1\right), \quad g_0 = \varepsilon, \quad g_{-1} = 0 \quad (\text{D.11})$$

¹ Pour une matrice $n \times n$ $A = (a_{ij})$, $\det A = \sum_{j=1}^n (-1)^{1+j} a_{1j} \det(\text{mineur de } a_{1j})$.

On se souvient que dans la discrétisation (D.4), on doit considérer que g_k et μ_k sont évalués au temps t_k , c'est-à-dire $g_k = g(t_k)$ et $\mu_k = V''(x_c(t_k))$. Par conséquent, (D.10) devient

$$m \left(\frac{g(t, t_0) - 2g(t - \varepsilon, t_0) + g(t - 2\varepsilon, t_0)}{\varepsilon^2} \right) + V''(x_c(t_k)) g(t - \varepsilon, t_0) = 0 \quad (D.12)$$

d'où l'on conclut que la fonction $g(t, t_0)$ définie dans (D.8) satisfait à l'équation différentielle (D.2). Il reste à déterminer les conditions initiales en $t = t_0$. Il suit de (D.11) que

$$\begin{aligned} g_1 &= g(t_0 + \varepsilon, t_0) \rightarrow 0, \quad \varepsilon \rightarrow 0 \\ \frac{g_1 - g_0}{\varepsilon} &= \frac{g(t_0 + \varepsilon, t_0) - g(t_0, t_0)}{\varepsilon} \rightarrow 1, \quad \varepsilon \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (D.13)$$

ce qui implique (D.3).

D.2 La formule de Van Vleck

On peut exhiber une solution de (D.2) de la façon suivante. La trajectoire classique est déterminée par son point de départ $x_0 = x(t_0)$ et son point d'aboutissement $x = x(t)^1$. Considérons-la pour un moment comme fonction de t_0 , x_0 et de la vitesse initiale $v_0 = dx(s)/ds|_{s=t_0}$, et introduisons

$$J(s, t_0, x_0, v_0) = \frac{\partial}{\partial v_0} x(s, t_0, x_0, v_0) \quad (D.14)$$

Puisque d'une part

$$x(s, t_0, x_0, v_0)|_{s=t_0} = x_0 \quad (D.15)$$

est indépendant de v_0 et que d'autre part

$$\partial x(s, t_0, x_0, v_0) / \partial s|_{s=t_0} = v_0 \quad (D.16)$$

¹Par souci de brièveté, nous omettons l'indice "c". Dans tout ce qui suit $x(t)$ est la solution de (1.93) soumise aux conditions aux limites (1.92).

la quantité (D.14) satisfait à

$$J(s, t_0, x_0, v_0)|_{s=t_0} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial s} J(s, t_0, x_0, v_0)|_{s=t_0} = 1 \quad (\text{D.17})$$

En différentiant l'équation du mouvement (1.93) par rapport à v_0 , on obtient

$$0 = m \frac{\partial^2}{\partial s^2} \left(\frac{\partial x}{\partial v_0} \right) + V''(x) \frac{\partial x}{\partial v_0} = m \frac{\partial^2}{\partial s^2} J + V''(x) J \quad (\text{D.18})$$

ce qui montre avec (D.17) que J est une solution de (D.2) avec conditions initiales (D.3).

L'unicité de la solution implique

$$g(t, t_0) = J(t, t_0, x_0, v_0) = \frac{\partial}{\partial v_0} x(t, t_0, x_0, v_0) \quad (\text{D.19})$$

On sait de plus en mécanique classique que la dérivée partielle de l'action $S(x, x_0, t, t_0)$ par rapport au point de départ donne

$$\frac{\partial S}{\partial x_0} = -m v_0 \quad (\text{D.20})$$

Cette dernière relation combinée à (D.19), conduit à

$$\frac{1}{g(t, t_0)} = -\frac{1}{m} \frac{\partial^2 S}{\partial x \partial x_0} \quad (\text{D.21})$$

Finalement, l'introduction de (D.21) dans (D.1) démontre la formule de Van Vleck (1.104).

Il est facile de se convaincre par inspection que la dérivation qui conduit à (D.1), (D.2) ainsi que celle présentée ici se généralisent sans changement si le potentiel dépend explicitement du temps: la formule de Van Vleck reste donc valable pour un système non conservatif.

D.2.1 Relation avec la trajectoire classique

Si le potentiel est indépendant du temps, on remarque que $g_1(t) = \partial x(t)/\partial t$ est aussi solution de (D.2). En effet par différentiation de l'équation du mouvement, on a

$$0 = \frac{d}{dt} \left(m \frac{d}{dt} v(t) - V'(x(t)) \right) = m \frac{d^2}{dt^2} v(t) - V''(x(t)) v(t) \quad (\text{D.22})$$

Une seconde solution indépendante $g_2(t)$ est construite par le théorème du Wronskien qui affirme que

$$g_1 \frac{d}{dt} g_2 - g_2 \frac{d}{dt} g_1 = 1 \quad (\text{D.23})$$

ou de façon équivalente

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{g_1}{g_2} \right) = \frac{1}{g_1^2} \quad (\text{D.24})$$

Par intégration de (D.24) on trouve³

$$g_2(t) = g_1(t) \int_{t_0}^t ds \frac{1}{g_1^2} \quad (\text{D.25})$$

La solution générale de (D.2) est donc de la forme

$$g(t, t_0) = c_1 g_1(t) + c_2 g_2(t) = g_1(t) \left(c_1 + c_2 \int_{t_0}^t ds \frac{1}{g_1^2(s)} \right) \quad (\text{D.26})$$

On déduit facilement que les conditions initiales (D.3) imposent $c_1 = 0$ et $c_2 = g_1(t_0)$, d'où le résultat

$$g(t, t_0) = v(t)v(t_0) \int_{t_0}^t ds \frac{1}{v^2(s)} \quad (\text{D.27})$$

cette expression peut être établie directement à partir de (D.21) [27].

³Les choix de la constante dans le wronskien (D.23) et de la constante d'intégration dans (D.25) sont arbitraires.

Bibliographie

- [1] E. Nelson. Dynamical Theories of Brownian Motion. Princeton University Press (1967).
- [2] A. Einstein. Annalen der Physik 17 (1905); voir aussi Collected papers, vol. 2. Ed. J. Stachel (1989).
- [3] F. W. Wiegell. Introduction to Path-Integral Methods in Physics and Polymers Science. World Scientific (1986).
- [4] J. Glimm and A. Jaffe. Quantum Physics. Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1981).
- [5] L. S. Schulman. Techniques and Applications of Path Integration. John Wiley (1981).
- [6] P. A. M Dirac. Physikalische Zeitschrift der Soviet Union, vol. 3. (1993).
- [7] P. A. M Dirac. The Principles of Quantum Mechanics. Clarendon Press, 4th Ed. (1958).
- [8] R. P. Feynman. Rev. Mod. Phys. vol. 20 (1948).
- [9] R. P. Feynman et A. R. Hibbs. Quantum Mechanics and Path Integral. McGraw Hill (1965).
- [10] J. Dieudonné. Calcul infinitésimal. Hermann (1968).

-
- [11] H. Jirari, H. Kröger, X.Q. Luo and K.J.M. Moriarty, *Phys. Lett. A*258(1999)6.
- [12] H. Jirari, H. Kröger, C. Q. Huang, Jun-qin Jiang, X.Q. Luo and K.J.M. Moriarty, *Nucl. Phys. B(Proc. Suppl.)*83, 953 (2000).
- [13] X.Q. Luo, C. Q. Huang, Jun-qin Jiang, H. Jirari, H. Kröger and K.J.M. Moriarty, *Physica A*281(2000)200-205.
- [14] H. Jirari, H. Kröger, C. Q. Huang, Jun-qin Jiang, X.Q. Luo and K.J.M. Moriarty, *Nucl. Phys. B(Proc. Suppl.)*83, 810 (2000).
- [15] C. Q. Huang, J. Q. Jiang, X. Q. Luo, H. Jirari, H. Kröger, and K.J.M. Moriarty: [quant-ph/9912051](https://arxiv.org/abs/quant-ph/9912051).
- [16] H. Jirari, H. Kröger, X.Q. Luo, K.J.M. Moriarty and S.G. Rubin, *Phys. Rev. Lett.* 86(2001)187.
- [17] H. Jirari, H. Kröger, X.Q. Luo, K.J.M. Moriarty and S. G. Rubin: *Phys. Lett. A*, in press.
- [18] H. Jirari, H. Kröger, X.Q. Luo and K.J.M. Moriarty: WCNA (World Congress of Nonlinear Analysis); Catania, Italy (19-26 July 2000); To be published in *Journal of Nonlinear Analysis*.
- [19] J-Q. Jiang, X-Q. Luo, Z-H. Mei, H. Jirari, H. Kröger and C-M. Wu, *Phys. Rev. D*60, 014501 (1999).
- [20] J-Q. Jiang, X-Q. Luo, Z-H. Mei, H. Jirari, H. Kröger and C-M. Wu, *Nucl. Phys. B(Proc. Suppl.)*73, 942 (1999).
- [21] S. Emery, H. Jirari, O. Piguet, *Helv.Phys.Acta.* 68(1995)297.
- [22] S. E. Koonin, *Computational Physics*, Addison-Wesley (1986).
- [23] P. A. Whitlock M. H. Kalos, *Monte Carlo Methods*, John Wiley (1986).

-
- [24] J. Zinn-Justin. *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*. Oxford University Press (1989). deuxième édition (1993).
- [25] L.P. Kadanoff. *Physics* 2(1966)263; L.P. Kadanoff, W. Götze, D. Hamblen, R. Hecht, E.A.S. Lewis, V.V. Palciauskas, M. Rayl, J. Swift, D. Aspnes and J. Kane. *Rev. Mod. Phys.* 39(1967)395; L.P. Kadanoff. *Ann. Phys. (N.Y.)* 100(1976)359; K.G. Wilson and J. Kogut. *Phys. Rep.* C12(1974)75; K.G. Wilson. *Rev. Mod. Phys.* 47(1975)773; K.G. Wilson. *Rev. Mod. Phys.* 55(1983)563.
- [26] B. Simon. *Functional Integration and Quantum Physics*. Academic Press (1968).
- [27] H. Kleinert. *Path Integral in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer physics*. World Scientific (1990).
- [28] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller and E. Teller. *J. Chem. Phys.* 21(1953)1087.
- [29] P.M. Morse and H. Feshbach. *Methods of Theoretical Physics*. McGraw-Hill, New York (1953).
- [30] Y. Aharonov and D. Bohm. *Phys. Rev.* 115(1959)485.
- [31] F. W. Wiegell. *Models of Conformal Phase Transitions*, dans *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Ed. C. Domb and J. Lebowitz, vol. 7, Academic Press (1983).
- [32] C. Morette. *Phys. Rev.* 81(1951)848-52.
- [33] P. Choquard. *Helv. Phys. Acta.* 28(1955)89.
- [34] H. J. Groenewold. *Math. Fys. Medd* 30(1956)1-36.
- [35] J. H. Van Vleck *Proc. Natn. Acad. Sci.* 14(1928)178-88.
- [36] M. Clutton-Bock. *Proc. Camb. Phil. Soc.* 61(1965)201-5.

-
- [37] H. Davies. Proc. Camb. Phil. Soc. 59(1963)147-55.
- [38] M. V. Berry and K. E. Mount. Rep. Prog. Phys. 35(1972)315.
- [39] L.S. Schulman. Phys. Rev. 176(1968)1558.
- [40] L.S. Schulman. Phys. Rev. A35(1987)4956.
- [41] Private communication by E. Nelson. See [5].
- [42] M.C. Gutzwiller J. Math. Phys 8(1967)1979-2000; J. Math. Phys 10(1969)1004-20;
J. Math. Phys 11(1970)1791-806; J. Math. Phys 12(1971)343-58.
- [43] M.C. Gutzwiller. *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*. Springer. Berlin (1990), and references therein.
- [44] S. Coleman. E. Weinberg. Phys. Rev. D7(1973)1888.
- [45] H. D. Dahmen, G. Jona-Lasinio. Nuovo Cimento 52 A(1967)807.
- [46] R. Jackiw. Phys. Rev. D9(1974)1686.
- [47] D. Amit D. Field Theory. Renormalization Group and Critical Phenomena. (World Scientific, Singapore) 1984.
- [48] L. H. Ryder. Quantum Field Theory (Cambridge University Press) 1985.
- [49] J. Iliopoulos, C. Itzykson, A. Martin. Rev. Mod. Phys.47(1975)165.
- [50] A. V. Miransky. Dynamical Symmetry Breaking in Quantum Field Theories (World Scientific, Singapore) 1993.
- [51] M. E. Peskin, D. V. Schroeder. An Introduction to Quantum Field Theory (Addison-Wesley, Reading) 1995.
- [52] G. C. Rossi and M. Testa. Nucl. Phys. B163(1980)109.

-
- [53] M. Lüscher, R. Narayanan, P. Wiesz and U. Wolff. Nucl. Phys. B384(1992)168.
- [54] R. Fukuda. R Prog. Theor. Phys. 56(1983)258.
- [55] Y. Fujimoto, L. O’Raifeartaigh, G. Parravicini Nucl. Phys. B212(1983)268.
- [56] P. M. Stevenson. Phy. Rev. D30(1984)1712.
- [57] R. Rajaraman. Solitons and Instantons. Elsevier, Amsterdam (1982).
- [58] R. Jackiw and C. Rebbi. Phys. Rev. Lett. 37(1976)172; C.G. Callan, R.F. Dashen and D.J. Gross. Phys. Lett. B63(1976)334.
- [59] G. ’tHooft. Phys. Rev. Lett 37(1976)8; Phys. Rev. D14(1976)3432.
- [60] R. A. Pullen, R. A. Edmonds. J. Phys. A14(1981)L477.
- [61] H.W. Press, S. A. Teutolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery. Numerical Recipes (Cambridge University Press, Cambridge) 1992.
- [62] M. Henon. Physica. 5D(1982)412.
- [63] K.G. Wilson. Phys.Rev. D10(1974)2445.
- [64] N.H. Christ, R. Friedberg, and T.D. Lee. Nucl. Phys. B202(1982)89; Nucl. Phys. B210(1982)310, 337.
- [65] G. S. Bali *et al.*(UKQCD). Phys.Lett. 309B(1993)378.
- [66] G.P. Lepage and P.B. Mackenzie. Phy. Rev. D48(1993)2250.
- [67] H. B. Nielsen and M. Ninomiya. Nucl. Phys. B185(1981)20; B193(1981)173; Phys.Lett. B105(1981)219; B130(1983)389.
- [68] L. H. Karsten and J. Smit. Nucl. Phys. B183(1981)103.
- [69] L. Susskind. Phys. Rev. D16(1977)3031.

-
- [70] B. Alles *et al.* "Continuum Limit of Field Theories Regularized on a Random Lattice". hep-lat/9411014.
- [71] K. Jansen. "Domain Wall Fermions and Chiral Gauge Theories". hep-lat/9410018.
- [72] K. G. Wilson. in *New Phenomena in Subnuclear Physics*, ed. A. Zichichi (Plenum Press, 1977).
- [73] M. Bochicchio, L. Maiani, G. Martinelli, G.C. Rossi and M. Testa. *Nucl. Phys.* B262(1985)331; *Phys.Lett.* 176B(1986)445; *Phys.Lett.* 178B(1986)265; *Phys.Lett.* 181B(1986)344; *Nucl. Phys.* B289(1987)505; and *Nucl. Phys.* B293(1987)420.
- [74] G. 't Hooft. *Comptes rendus de la conférence internationale EPS High Energy Physics*, Palerme, éditeur A. Zichichi (1975).
- [75] S. Mandelstam. *Phys. Rep.* C23(1976)245.
- [76] J. B. Kogut, L. Susskind. *Phys. Rev.* D11(1975)395.
- [77] J. B. Kogut. *Rev. Mod. Phys.* 55(1983)775.
- [78] K. Symanzik. in "Recent Developments in Gauge Theories." eds. G. 't Hooft, et al. (Plenum, New York, 1980) 313; in "Mathematical Problems in Theoretical Physics." eds. R. Schrader et al. (Springer, New York, 1982); *Nucl. Phys.* B226 (1983) 187, 205.
- [79] P. Weisz. *Nucl. Phys.* B212 (1983) 1. M. Lüscher and P. Weisz. *Comm. Math. Phys.* 97, 59 (1985).
- [80] M. Lüscher and P. Weisz. *Phys. Lett.* B158, 250 (1985).
- [81] C. Morningstar. "Lattice Perturbation Theory". hep-lat/9509073.
- [82] S. Brodsky, G. P. Lepage and P. Mackenzie. *Phys. Rev.* D28, 228 (1983).

-
- [83] G. Parisi, in High Energy Physics-1980, XX Int. Conf., Madison (1980), ed. L. Durand and L. G. Pondrom (AIP, New York, 1981).
- [84] G. P. Lepage and P. Mackenzie, Phys. Rev. D48, 2250 (1993).
- [85] X. Q. Luo, S. H. Guo, H. Kröger and D. Schutte, Phys. Rev. D59(1999)034503.
- [86] H.W. Hamber and C.M. Wu, Phys. Lett. B133, 251 (1983).
- [87] S. Sheikholeslami and R. Wohlert, Nucl. Phys. B259, 572 (1985).
- [88] R. Wohlert, DESY S7/069; M. Lüscher and P. Weisz, Nucl. Phys. B479, 429 (1996).
- [89] M. Lüscher, ALPHA Collaboration, Nucl. Phys. B478, 365 (1996).
- [90] R. Edwards, U. Heller, and T. Klassen, Phys. Rev. Lett.80:3448-3451,(1998).
- [91] G. Martinelli, C.T. Sachrajda and A. Vladikas, Nucl. Phys. B358, 212 (1996).
- [92] S. L. Adler and W. A. Bardeen, Phys. Rev.182, 1517 (1969); J. S. Bell and R. Jackiw, Nuovo Cimento A60, 47 (1969).
- [93] E. Abdalla, M. C. B. Abdalla and K. D. Rothe, Non-Perturbative Methods in 2 Dimensional Quantum Field Theory.
- [94] S. Coleman, Commun. Math. Phys. 31, 259 (1973); N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett.22, 1133 (1966).
- [95] A. R. Zhitnitsky, Phys. Lett. B165, 405 (1985).
- [96] G. 't Hooft, Nucl Phys. B75, 461 (1974).
- [97] G. 't Hooft, Nucl Phys. B72, 461 (1974).
- [98] E. Witten, Nucl. Phys. B160, 57 (1979).
- [99] G. Ferretti, S. G. Rajeev and Z. Yang, Int. J. Mod. Phys. A7, 8001 (1992).

-
- [100] P. F. Bedaque, I. Horvath and S. G. Rajeev. *Mod. Phys. Lett.* A7, 3347 (1992).
- [101] V. Baluni. *Phys. Lett.* B90, 407 (1990).
- [102] G. Bhattacharya. *Nucl. Phys.* B205 [FS5], 461 (1982).
- [103] P.J. Steinhardt. *Nucl. Phys.* B176, 100 (1980).
- [104] T. Grandou, H.T.Cho and H.M. Fried. *Phys. Rev.* D37, 946 (1988).
- [105] C.J. Hamer. *Nucl. Phys.* B195, 503 (1980).
- [106] X.Q. Luo, B.P. He, Q.Z. Chen, and S.H. Guo. *Z. Phys.* C51, 423 (1991).
- [107] X.Q. Luo, Q.Z. Chen, G.C. Xu and J.Q. Jiang. *Phys. Rev.* D50, 501 (1994).
- [108] X.Q. Luo, Q.Z. Chen. *Phys. Rev.* D46, 814 (1992); *Phys. Rev.* D42, 1293 (1990).
- [109] C. Itzykson, J.-B. Zuber. *Quantum Field Theory*. McGraw-Hill Book Company; J. Bjorken and S. Drell. *Quantum Mechanics*. McGraw-Hill Book Company; P. Roman. *Advanced Quantum Theory*. Addison-Wesley Publishing Company.
- [110] X.Y. Fang, X.Q. Luo, G.C. Xu, and Q.Z. Chen. *Z. Phys.* C54, 587 (1992).
- [111] M. Fukugita, T. Kaneko and A. Ukawa. *Phys. Lett.* B130, 199 (1983).
- [112] M. Fukugita, T. Kaneko and A. Ukawa. *Nucl. Phys.* B230, 62 (1984).
- [113] V. Azcoiti, G. DiCarlo, A. Galante, A. Grillo, V. Laliena. *Phys. Rev.* D53, 5069 (1996).
- [114] A. Borici and P. de Forcrand. *Nucl. Phys. B(Proc. Suppl.)*53, 873 (1997).
- [115] A.R. Zhitnitsky. *Phys. Lett.* B165, 405 (1985).