LES CONDITIONS DE BOHR-SOMMERFELD SINGULIÈRES

d'après Yves Colin de Verdière[*, **] et Bernard Parisse[**]

May 4, 1998

[*] Institut Universitaire de France
[**] Institut Fourier, Unité mixte de recherche CNRS-UJF 5582
BP 74, 38402-Saint Martin d'Hères Cedex (France)
yves.colin-de-verdiere@ujf-grenoble.fr
bernard.parisse@ujf-grenoble.fr

1 Théorie

1.1 Présentation du problème

Soit (X, ω) une variété symplectique de dimension 2 et $H_0 : X \to \mathbb{R}$ un hamiltonien C^∞. Supposons que 0 est valeur critique de H_0 et soit Z une composante connexe de $H_0^{-1}(0)$. On suppose que Z est compacte et ne contient que des points critiques non dégénérés de type col. On note Z_0 l'ensemble de ces points critiques et $n = \#Z_0$. Z est donc un graphe tétravalent plongé dans X (en particulier le nombre d'arêtes du graphe est $2n$). On notera $s_j, \ j = 1, \cdots, n$ les points de Z_0 (sommets de Z), $e_l, \ l = 1, \cdots, 2n$ les arcs joignant des points singuliers (arêtes de Z) et $\gamma_j, \ j = 1, \cdots, N$ une base de cycles de Z, c'est à dire une base de $\mathbf{H}_1(Z, \mathbb{Z})$ ($\mathbb{Z}-$module libre de rang N) formée de cycles géométriques (orientés). On a, d'après la formule d'Euler-Poincaré :

$$N = b_1(Z) = 1 + n \ . \tag{1}$$

Soit $\hat{H}$ un hamiltonien quantique sur X de symbole principal H_0. On ne demande pas à $\hat{H}$ d'être autoadjoint. On note $H_1 \ : \ X \to \mathbb{C}$ son symbole sous-principal. On a donc :

$$\hat{H} = \mathrm{Op_W}(H_0 + hH_1) + O(h^2) \ , \tag{2}$$

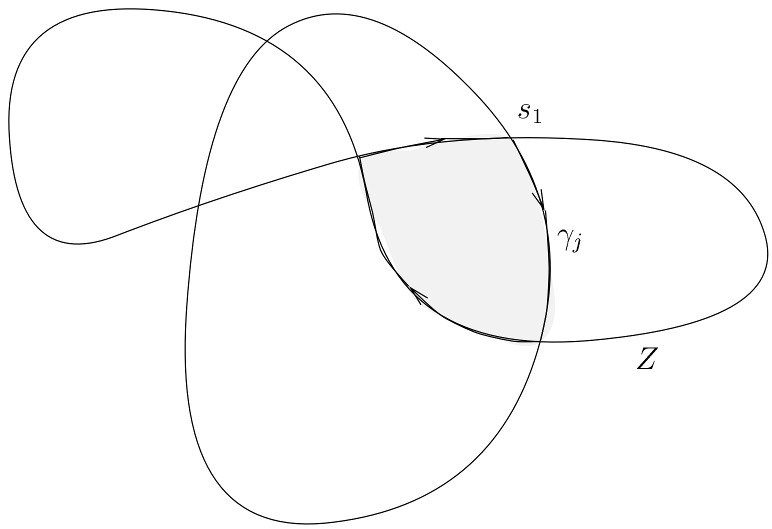

Figure 1: Z

où Op_W est la *quantification de Weyl.*

Les *conditions de Bohr-Sommerfeld singulières* sont les conditions sous lesquelles l'équation

$$\hat{H}u = O(h^\infty) \tag{3}$$

admet des solutions microlocalisées sur Z de norme $\int |u(x)|^2 dx \sim 1$.

Le cas étudié dans [4] est celui où $\hat{H} = \hat{K} - \alpha h$ avec $K_1 = 0$ et donc $H_1 = -\alpha$. Les valeurs de α pour lesquelles les conditions de Bohr-Sommerfeld sont satisfaites correspondent alors aux valeurs propres $h\alpha$ de $\hat{K}$ située dans un intervalle $(-ch, ch)$.

1.2 Calcul des conditions de Bohr-Sommerfeld

Pour écrire les conditions de Bohr-Sommerfeld, il faut couper chaque cycle en deux morceaux afin de transformer le graphe en un arbre maximal. On suppose que le graphe a une position générique, c'est-à-dire qu'en un point critique aucune arête n'est verticale. Les invariants semi-classiques du problème sont alors:

- ceux associés aux cycles: les actions principales:

  $$A_\gamma = \int_\gamma \xi \; dx$$

  (en fait $\exp(\frac{i}{h}A_\gamma)$), les actions sous-principales, ce sont des régularisations de:

  $$\int_\gamma H_1 \; dt$$

et les indices de Maslov m_γ (qui se calculent comme d'habitude). L'holonomie du cycle est alors défini par:

$$h_\gamma^{-1} = e^{\frac{i}{h}A_\gamma - iI_\gamma + i\frac{\pi}{2}m_\gamma}$$

- ceux associés aux points critiques s_j. Par translation, on peut se ramener à $s_j = 0$. On choisit une transformation canonique χ telle que:

  $$H_0 \circ \chi(y, \eta) = W(y\eta)y\eta,$$

  où W est une fonction telle que:

  $$|W(0)| = \sqrt{|\det W''(0)|}$$

  Le signe de $W(0)$ est déterminé par la convention suivante: la linéarisation en s_j de χ est une rotation d'angle $\theta \in [0, \pi/2[$. Il existe alors un opérateur intégral de Fourier unitaire U tel que:

  $$\hat{H}U = U\hat{W}Op_W(y\eta - h\varepsilon(h))$$

  La série $\varepsilon(h)$ est l'invariant semi-classique du point s_j et on a:

  $$\varepsilon_0 = \pm\frac{H_1(s_j)}{\sqrt{|\det W''(0)|}}$$

  le signe $\pm$ est déterminé par la convention sur χ ci-dessus, en pratique c'est le signe de H_0 dans le quadrant contenant l'axe des x.

En un point critique, on numérote les 4 arêtes avec la convention de la figure 2. On peut alors choisir des solutions microlocales sur chaque arete de l'arbre telles qu'au voisinage de chaque point critique s_j, une solution de (3) qui s'exprime dans cette base avec 4 coordonnées x_1, x_2, x_3, x_4 doit vérifier:

$$\begin{pmatrix} x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = T(\varepsilon)\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

où:

$$T(\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\Gamma(\frac{1}{2} + i\varepsilon)e^{\varepsilon(\frac{\pi}{2} + i\ln h)}\begin{pmatrix} 1 & ie^{-\varepsilon\pi} \\ ie^{-\varepsilon\pi} & 1 \end{pmatrix} \tag{4}$$

Avec ces conventions, si on note x_- et x_+ les coordonnées sur les arêtes du même cycle, on doit avoir:

$$x_+ = h_\gamma^{-1}x_-$$

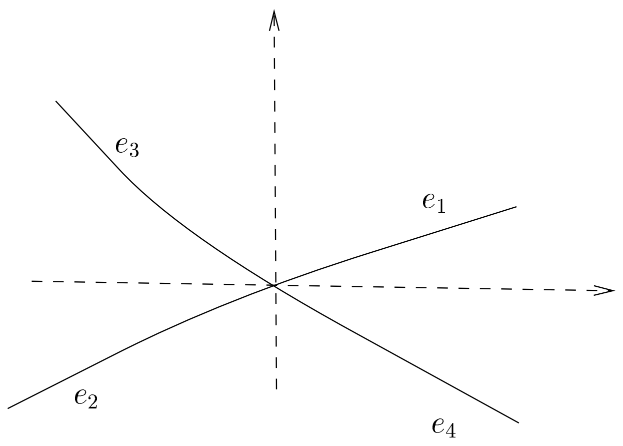

Figure 2: choix des e_i

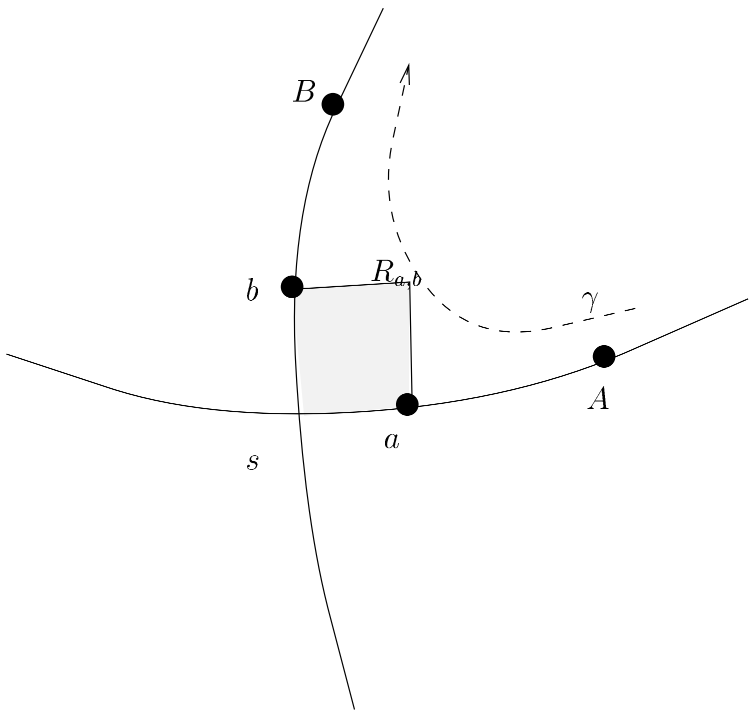

Figure 3: calcul de la partie principale de $\int_\gamma H_1 dt$

On se ramène ainsi à un système de $2 \times n$ équations, avec $2n$ inconnues, ce système est homogène en x donc a des solutions si et seulement si son déterminant est nul.

Pour finir cette section, voici comment on calcule les actions sous-principales: on décompose en morceaux ne contenant qu'un point critique. Soit AB un arc de γ contenant la seule singularité s_j. On définit

$$\mathrm{vp}\int_A^B H_1 dt = \lim_{a,b\to 0}\left(\int_A^a H_1 dt + \int_b^B H_1 dt + a(s_j)\ln\int_{R_{a,b}}\omega\right) , \tag{5}$$

où

$$a(s_j) = \frac{\pm H_1(s_j)}{|\det H_0"(s_j)|^{1/2}} , \tag{6}$$

et $R_{a,b}$ est le parallélogramme construit sur les vecteurs $\vec{s_j a}$ et $\vec{s_j b}$, indiqué sur la figure. Si l'arc AB est orienté dans le sens trigonométrique, alors le signe $\pm$ est $+$ si $H_0 > 0$ dans le quadrant bordé par le cycle et $-$ sinon. En effet, pour fixer les idées, plaçons-nous dans le premier cas et supposons que $H_1(0) > 0$. On voit alors que $t(B) - t(A) = +\infty$ alors que $a(s_j)\ln\omega$ tend vers $-\infty$, ils peuvent donc se compenser.

Si le cycle γ est lisse en s_j, on définit

$$\tilde{\int}_B^A H_1 dt = \lim_{\varepsilon\to 0^+}\left(\int_B^{\gamma(-\varepsilon)} + \int_{\gamma(\varepsilon)}^A\right) H_1 dt , \tag{7}$$

où $u \to \gamma(u)$ paramètre γ de façon C^1 et avec $\gamma(0) = s_j$. Ce choix est compatible avec les précédents : $\gamma \to I_\gamma$ est $\mathbb{Z}-$linéaire.

2 Exemple et vérification numérique

On prend l'exemple du double puits pour le potentiel:

$$V(x) = x^2((x-b)^2 - a^2)$$

Ce potentiel admet un seul point critique 0. et on peut calculer explicitement les holonomies h_γ et la valeur de ε_0.

On obtient alors les conditions de Bohr-Sommerfeld semi-classiques:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{1+e^{2\pi\varepsilon}}}\cos\left(\frac{a^2 b\pi}{2h} + O(h)\right) &= \cos\Bigg(\pi - 2\varepsilon_0\left(\frac{7}{2}\ln(2(a^2-b^2)) - 2\ln a\right) + \\ &+ \frac{\sqrt{2}}{h}\left[-\frac{2\sqrt{a^2-b^2}^3}{3} - \sqrt{a^2-b^2}b^2 - ba^2\arcsin\left(\frac{b}{a}\right)\right] + \\ &+ \varepsilon\ln h + \arg\Gamma\left(\frac{1}{2}+i\varepsilon\right) + O(h)\Bigg)\end{aligned} \tag{8}$$

où $\varepsilon = \varepsilon_0 + O(h)$ et $\frac{E}{h} = \alpha = \sqrt{2(a^2 - b^2)}\varepsilon_0$.

On prend maintenant le potentiel $V(x) = x^4 - x^2$, il s'agit de vérifier la pertinence de l'équation (8) pour différentes valeurs de h. Pour cela, on compare avec le calcul des valeurs propres de l'opérateur de Schrödinger obtenues en appliquant la méthode de Runge-Kutta au système différentiel:

$$\frac{d}{dx} \begin{pmatrix} \varphi \\ \varphi' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{2(V(x)-E)}{h^2} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \varphi \\ \varphi' \end{pmatrix} \tag{9}$$

Plus précisément, on considère 2 solutions de (9), définies en partant de points situés dans la zone classiquement interdite, l'un dans la composante connexe contenant $-\infty$, l'autre dans la composante connexe contenant $+\infty$. On prend $\varphi = 1$ et $\varphi' = 0$ comme conditions initiales. Puis on calcule le wronskien $W(E)$ de ces 2 solutions au point $x = 0$. Numériquement, quelles que soient les conditions initiales choisies, le fait de partir de la zone classiquement interdite va donner dans la zone classiquement permise une solution qui décroit exponentiellement en $\mp\infty$. Donc, le wronskien $W(E)$ s'annule si et seulement si E est valeur propre. Pour trouver les valeurs de E, on détecte les changements de signes du wronskien, on se rapproche de E par dichotomie puis on interpole la courbe $E \to W(E)$ par un segment jusqu'à déterminer E avec la précision voulue (méthode de la corde, la convergence est à peine moins bonne que la méthode de Newton: $|E_n - E| \leq |E_0 - E|^{F_n}$ où F_n est la suite de Fibonacci)

D'autre part, l'équation (8) pour le potentiel $V(x) = x^4 - x^2$ s'écrit puisque $a = 1$ et $b = 0$ sous la forme:

$$\frac{1}{\sqrt{1 + e^{2\pi\varepsilon}}} + \cos\left(\varepsilon \ln(h) + \arg\Gamma(\frac{1}{2} + i\varepsilon) - \frac{7}{2}\varepsilon \ln(2) - \frac{2\sqrt{2}}{3h}\right)$$

avec $\varepsilon = \frac{E}{\sqrt{2}}$.

L'implémentation a été faite en `C/C++`, les programmes sont disponibles à l'URL suivante:
`http://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~parisse/bs.tgz`
En particulier, signalons que le calcul de l'argument de la fonction Γ a été fait en utilisant la bibliothèque `PARI` développée par l'équipe de théorie des nombres de Bordeaux.

On obtient par exemple pour $h = 10^{-6}$ dans l'intervalle $[-2.10^{-6}, 3.10^{-6}]$ les valeurs propres suivantes:

Numéro	Runge-Kutta	Bohr-Sommerfeld
1	-1.68092e-06	-1.68100e-06
2	-1.67670e-06	-1.67678e-06
3	-1.14072e-06	-1.14080e-06
4	-1.12697e-06	-1.12706e-06
5	-0.62743e-06	-0.62751e-06
6	-0.58579e-06	-0.58587e-06
7	-0.15515e-06	-0.15522e-06
8	-0.05032e-06	-0.05041e-06
9	0.29793e-06	0.29786e-06
10	0.48460e-06	0.48451e-06
11	0.78346e-06	0.78339e-06
12	1.02441e-06	1.02432e-06
13	1.30685e-06	1.30677e-06
14	1.57243e-06	1.57234e-06
15	1.85275e-06	1.85266e-06
16	2.12953e-06	2.12944e-06
17	2.41218e-06	2.41208e-06
18	2.69515e-06	2.69506e-06
19	2.98110e-06	2.98101e-06
20	3.26833e-06	3.26824e-06

Les conditions de Bohr-Sommerfeld modifiées au point critique donnent donc de très bons résultats pour le calcul du spectre. Le calcul est bien plus rapide que par la methode purement numérique de Runge-Kutta (ici d'un facteur 100 environ).

References

[1] P. Bleher, Semiclassical quantization rules near separatrices, *Commun. Math. Phys.*, 165:621-640, 1994.

[2] Y. Colin de Verdière, Formes normales de Birkhoff classiques et quantiques, *Exposé au séminaire de physique-mathématique de l'Institut Fourier*, 1997.

[3] Y. Colin de Verdière et B. Parisse, Equilibre instable en régime semi-classique : I–Concentration microlocale. *Commun. PDE*, 19:1535-1563, 1994.

[4] Y. Colin de Verdière et B. Parisse, Equilibre instable en régime semi-classique : II–Conditions de Bohr-Sommerfeld. *Ann. Inst. Henri Poincaré (Physique théorique)*, 61:347-367, 1994.

[5] Joyeux M., *Classical dynamics of the* $1:1$, $1:2$ *and* $1:3$ *resonance Hamiltonians*, J. Chem. Phys. 203 (1996), 281-307.

[6] J. Pollet, Analyse semi-classique d'un système d'équations de Schrödinger couplées : formule de Landau-Zener. *Thèse de l'université de Grenoble*, 1997.

[7] M. Rouleux, Feshbach resonances in the semi-classical limit, *Preprint CPT*, 1997.

[8] S. Vu Ngoc, Bohr-Sommerfeld conditions for Integrable Systems with critical manifold of focus-focus type. *Preprint en préparation*, 1997.