Séminaire Équations aux dérivées partielles – École Polytechnique

A. Voros

Oscillateur quartique et méthodes semi-classiques

Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique) (1979-1980), exp. nº 6, p. 1-6
<http://www.numdam.org/item?id=SEDP_1979-1980____A6_0>

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

CENTRE DE MATHÉMATIQUES

PLATEAU DE PALAISEAU - 91128 PALAISEAU CEDEX

Téléphone : 941.82.00 - Poste N°

Télex : ECOLEX 691 596 F

S E M I N A I R E   G O U L A O U I C - S C H W A R T Z   1 9 7 9 - 1 9 8 0

OSCILLATEUR QUARTIQUE ET METHODES SEMI-CLASSIQUES

par A. VOROS

Exposé n° VI

13 Novembre 1979

Nous décrivons ici quelques résultats exacts concernant le spectre de l'oscillateur quartique (l'opérateur différentiel $\hat{H} = C^{4/3}(-\frac{d^2}{dq^2} + q^4)$ sur $L^2(\mathbb{R})$; $C = \frac{\Gamma(1/4)^2}{3} (\frac{2}{\pi})^{1/2}$ est un facteur de normalisation commode pour nous). Ces résultats concernent principalement la fonction zeta de l'opérateur : $\zeta(s) = \sum_0^\infty \lambda_n^{-s}$ (les λ_n sont les valeurs propres par ordre croissant) ; cette fonction est méromorphe dans $\mathbb{C}$, et nous pouvons calculer :

1) ses pôles et leurs résidus
2) ses valeurs aux points $s = -n$ $(n \in \mathbb{N})$.
3) sa dérivée à l'origine $\zeta'(0)$
4) ses valeurs aux points entiers positifs
5) son développement asymptotique pour $s \to -\infty$

Ces calculs sont également possibles pour la "fonction zeta modifiée" $\zeta^P(s) = \sum_0^\infty (-1)^n \lambda_n^{-s}$, ainsi que pour <u>tous les opérateurs</u> $(-\frac{d^2}{dq^2} + q^{2M})$ (M entier non nul). Seul le calcul 5) n'est pour le moment faisable que pour $M \leq 2$.

L'étude de cette fonction $\zeta(s)$ présente un double intérêt :

- Pour $M = 1$ nous avons un oscillateur harmonique, dont la fonction zeta est reliée à celle de Riemann, $\zeta_R(s)$:

$$\zeta(s) = (1 - 2^{-s}) \quad \zeta_R(s) \tag{1}$$

Les résultats 1) 5) sont alors classiques et importants en analyse et en arithmétique : il est tentant de chercher à les généraliser.

- Les démonstrations (sauf pour 4) font appel à une variété de méthodes <u>semi-classiques</u> que l'on peut exploiter à fond grâce à la simplicité du potentiel q^{2M} ; de ce fait nous accroissons notre compréhension de ces méthodes.

Nous ne donnons ici que les grandes lignes des calculs (pour $M = 2$) les détails ayant déjà été publiés par ailleurs [1 - 3]

I. <u>POLES ET RESIDUS</u>

Soit $\eta(s)$ la transformée de Mellin de la fonction de partition $\theta(t) = \mathrm{Tr}\exp - t\hat{H}$, holomorphe pour Re $t > 0$: $\eta(s) = \int_0^\infty \theta(t) t^{s-1} dt$. On a la relation classique : $\zeta(s) = \eta(s)/\Gamma(s)$.

Par des méthodes asymptotiques apparentées à celles de [4] , on peut déterminer ordre par ordre le développement de $\theta(t)$ pour $t \to 0^+$:

$$\theta(t) \sim \sum_{n=0}^{\infty} c_n t^{i_n} \quad , \; i_n = \frac{3}{4}(2n-1)$$

(2)

$$\text{(par ex. : } c_0 = \frac{3}{8\pi} \Gamma(\tfrac{3}{4}), \; c_1 = -\frac{1}{6} \Gamma(\tfrac{1}{4}) \ldots)$$

et en déduire que $\zeta(s)$ est méromorphe dans $\mathbb{C}$ avec des pôles simples aux points $s = -i_n$, de résidus $c_n / \Gamma(-i_n)$. La suite des pôles et des résidus est aussi en correspondance biunivoque avec les termes du développement asymptotique implicite de λ_k pour $k \to \infty$: il existe en effet un tel développement (ce genre de propriété semble réservé aux problèmes à 1 dimension), qui est donné par une formule de quantification de Bohr-Sommerfeld-Maslov :

$$\sum_{n=0}^{\infty} b_n \lambda_k^{-i_n} - 2\pi (k + \tfrac{1}{2}) \sim 0 \qquad (k \to +\infty), \tag{3}$$

et on a la relation : $b_n = 2\pi \; c_n / \Gamma(1 - i_n)$.

II. IDENTITES DE TRACE

Les pôles $(-i_n)$ de $\eta(s)$ étant disjoints de ceux de $\Gamma(s)$, la formule $\zeta(s) = \eta(s)/\Gamma(s)$ implique $\zeta(-n) = 0$ $(n \in \mathbb{N})$. Ces relations découvertes pour ce problème par Parisi [2] sont comparables à celles étudiées par exemple dans [5]. Exemple d'application au calcul numérique des valeurs propres : en combinant la formule (3), numériquement assez précise dès que n n'est pas trop petit, avec un certain nombre d'identités de trace, on peut obtenir une estimation précise des basses valeurs propres $\lambda_0, \lambda_1, \ldots$ Il serait intéressant de savoir si ce processus converge numériquement quand $n \to \infty$.

III. CALCUL DE $\zeta'(0)$

Le déterminant de Fredholm de $\hat{H}$: $\Delta(\lambda) = \prod_{0}^{\infty} (1 - \lambda/\lambda_n)$ est une fonction entière de λ . La formule (2) équivaut au développement :

$$\frac{d}{d\lambda} \log \Delta(\lambda) \sim - \sum_{0}^{\infty} c_n \Gamma(1+i_n)(-\lambda)^{-1-i_n} \qquad (\lambda \to -\infty).$$

En intégrant soigneusement, il vient [3] :

$$(4) \qquad \log \Delta(\lambda) \sim - \sum_{0}^{\infty} c_n \Gamma(i_n)(-\lambda)^{-i_n} + \zeta'(0)$$

En fait on montre l'identité :

$$(5) \qquad \log \Delta(\lambda) - \zeta'(0) + c_o \Gamma(i_o)(-\lambda)^{-i_o} = \log a(\lambda)$$

où $a(\lambda)$ est le coefficient de transmission à énergie λ, à savoir :

$$(6) \qquad a(\lambda) = \lim_{q \to -\infty} \psi_+(\lambda,q) / [\pi(\lambda,q)^{-1/2} \exp - \int_o^q \pi(\lambda,q')dq']$$

où $\psi_+(\lambda,q)$ est la solution de l'équation différentielle $\hat{H}\psi = \lambda\psi$ telle que

$$\psi_+(\lambda,q) \sim \pi(\lambda,q)^{-1/2} \exp - \int_o^q \pi(\lambda,q')dq' \quad \text{pour } q \to +\infty$$

$\pi(\lambda,q)$ étant la solution positive de l'équation caractéristique associée $c^{4/3}(-\pi^2 + q^4) = \lambda$.

Pour $\lambda = 0$, on connaît explicitement

$$(7) \qquad \psi_+(q) = \left(\frac{2q}{3\pi}\right)^{1/2} K_{1/6}(q^3/3)$$

d'où l'on tire par consultation des tables de fonctions de Bessel : $a(0) = +2$, et par substitution dans (5) : $\zeta'(0) = -\log 2$.

Nous mentionnons le résultat général pour le potentiel q^{2M} [3] :

$$(8) \qquad \zeta'(0) = \log \sin \frac{\pi}{2(M+1)} \left(= -\log a(0)\right)$$

d'ailleurs indépendant de l'éventuel facteur multiplicatif inclus dans $\hat{H}$ (ceci parce que $\zeta(0) = 0 \quad \forall M$) .

IV. VALEURS $\zeta(n)$ POUR n ENTIER POSITIF

Nous prenons ici M quelconque et $\hat{H} = -\frac{d^2}{dq^2} + q^{2M}$. La généralisation de (7) est :

$$(9) \qquad \psi_+(\lambda = 0,q) = \left(\frac{4\mu q}{\pi}\right)^{1/2} K_\mu(2\mu \; q^{M+1}) \quad \left(\mu = \frac{1}{2(M+1)}\right)$$

$\psi_+(0,q)$ et $\psi_-(0,q) = \psi_+(0,-q)$ sont deux solutions indépendantes de $\hat{H}\psi = 0$, de Wronskien $2a(0) = 2(\sin \pi\mu)^{-1}$ (cf. eq. (8)). On en déduit l'expression du noyau intégral de $\hat{H}^{-1}$:

$$(10) \qquad \hat{H}^{-1}(q,q') = \frac{1}{2a(0)} \psi_+(0, q_+) \, \psi_-(0,q_-),$$

où $q_\pm = \begin{matrix}\max\\ \min\end{matrix}(q,q')$.

En convoluant (10) avec lui-même n fois, on fabrique une formule intégrale explicite pour $\zeta(n) = \mathrm{Tr}\, \hat{H}^{-n}$. Il est plus difficile de mettre le résultat sous forme arithmétique fermée. Les formules intégrales de Weber- Schafheitlin en théorie des fonctions de Bessel impliquent [3] :

$$(11) \qquad \zeta(1) = \sum_0^\infty \frac{1}{\lambda_n} = (1 + (\cos 2\mu\pi)^{-1}) \, \zeta^P(1)$$

et

$$(12) \qquad \zeta^P(1) = \sum_0^\infty \frac{(-1)^n}{\lambda_n} = \frac{\sin \mu\pi}{2\sqrt{\pi}} (2\mu)^{4\mu M} \frac{\Gamma(\mu)\,\Gamma(2\mu)\,\Gamma(3\mu)}{\Gamma(\frac{1}{2} + 2\mu)}$$

En collaboration avec D. et G. Chudnovsky nous avons également obtenu [6] :

$$\zeta(2) = \zeta^P(1)^2 + (2\mu)^{8\mu M} \frac{\sin \mu\pi}{4\mu^2\sqrt{\mu}} \frac{\Gamma(3\mu)\,\Gamma(4\mu)\,\Gamma(5\mu)}{\Gamma(\frac{1}{2} + 4\mu)} \; {}_5F_4\left[\begin{matrix} 4\mu & 2\mu & 3\mu & 5\mu & \frac{1}{2} \\ 1+2\mu & 1+\mu & 1-\mu & \frac{1}{2}+4\mu & \end{matrix} ; 1\right]$$

(13)

$$\zeta^P(2) = \zeta(2) + (2\mu)^{8\mu M} \frac{\sin \mu\pi}{2^{2\mu} 6\mu\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(-\mu)\,\Gamma(4\mu)\Gamma(5\mu)\,\Gamma(6\mu)}{\Gamma(1+\mu)\,\Gamma(\frac{1}{2} + 5\mu)} \; {}_5F_4\left[\begin{matrix} 6\mu & 3\mu & 4\mu & 5\mu & \frac{1}{2}+\mu \\ 1+3\mu & 1+2\mu & 1+\mu & \frac{1}{2}+5\mu & \end{matrix} ; 1\right]$$

où

$${}_5F_4\left(\begin{matrix} a & b & c & d & e \\ & b' & c' & d' & e' \end{matrix} ; z\right) = \sum_{n=0}^\infty \frac{a(a+1)\ldots(a+n-1)b(b+1)\ldots(e+n-1)z^n}{n!b'(b'+1)\ldots(b'+n-1)c'(c'+1)\ldots(e'+n-1)}$$

(série hypergéométrique généralisée [7]).

V. DEVELOPPEMENT DE $\zeta(s)$ POUR $s \to -\infty$

Dans le cas de l'oscillateur harmonique $(-\frac{d^2}{dq^2} + q^2)$, le comportement de $\zeta(s)$ pour $s \to -\infty$ est dicté par l'équation fonctionnelle de Riemann; celle-ci peut se montrer à partir de la représentation de Mellin :

$$\zeta_R(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty \frac{t^{s-1}}{e^t-1}\, dt$$

par la méthode des résidus [8] . Le résultat pour $\zeta(s)$, $s \to -\infty$ est :

$$\zeta(s) = (1-2^{-s})\, \zeta_R(s) = -\,\Gamma(1-s)\, \pi^{s-1} \sin \frac{\pi s}{2}(1 + \mathcal{O}(2^s))$$

Pour l'oscillateur quartique, on commence par se rapprocher du cas harmonique en considérant l'opérateur $\hat{H}^{3/4}$ dont les valeurs propres $\lambda_n^{3/4}$ sont asymptotiques à $2\pi(n + \frac{1}{2})$ pour $n \to \infty$, d'après (3). On écrit alors la représentation de Mellin :

$$\zeta(\tfrac{3s}{4}) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty \Theta_{3/4}(t)\, t^{s-1} dt \ , \quad \Theta_{3/4}(t) = \mathrm{Tr}\, \exp(-t\hat{H}^{3/4}) \tag{14}$$

Nous conjecturons, arguments semi-classiques à l'appui [1] , que $\Theta_{3/4}(t)$ est une fonction analytique à ramifications sur $\mathbb{C}$, dont les points de branchement sont les périodes complexes des orbites du hamiltonien classique $C(p^2+q^4)^{3/4}$; ces périodes forment un réseau de $\mathbb{C}$ engendré par les vecteurs $(\frac{1 \pm i}{2})$. En transformant (14) en intégrale de contour, on voit que pour $s \to -\infty$ la contribution dominante à $\zeta(s)$ provient des quatre points de branchement les plus proches de $t = 0$ (ce point exclu). Au prix d'une hypothèse qui reste à prouver concernant la disposition <u>globale</u> de ces points sur la surface de Riemann de $\Theta_{3/4}(t)$, leurs contributions asymptotiques à $\zeta(s)$ sont calculables (l'effet de ces contributions sur les valeurs propres se traduit par un décalage d'ordre $e^{-\pi n}$ entre la vraie valeur λ_n et la meilleure estimation numérique fournie par (3)). On trouve finalement [3] :

$$\zeta(s) \sim -\,\Gamma(1 - \tfrac{4s}{3})\, \frac{2^{-2s/3}}{\pi} \frac{\sin \pi s}{\cos(2\pi s/3)} \left[1 - \frac{\alpha_1}{\frac{4s}{3}+1} + \frac{\alpha_2}{(\frac{4s}{3}+1)(\frac{4s}{3}+2)} - \ldots \right] \quad (s \to -\infty) \tag{15}$$

avec la propriété curieuse que les coefficients α_j de (15) sont <u>engendrés</u> par les nombres $b_n = \dfrac{2\pi\, c_n}{\Gamma(1-i_n)}$ apparaissent dans (3) suivant la formule :

$$(16)\qquad \sum_{o}^{\infty} \alpha_j t^j \equiv \exp\{(\frac{b_1 t}{2} + \frac{b_2 t^3}{4}) - (\frac{b_3 t^5}{8} + \frac{b_4 t^7}{16}) + (\frac{b_5 t^9}{32} + \frac{b_6 t^{11}}{64}) - \ldots\}$$

En dernier ressort, le comportement de $\zeta(s)$ pour $s \to -\infty$ est gouverné par la suite des résidus de $\zeta(s)$ à distance finie !

Il découle aussi de ces considérations que la série (3) est divergente ($|b_n| \sim (2n-2)!\, 2^{n+1}/\pi$) et non resommable par la méthode de Borel [1].

Nous soulignons en guise de conclusion que notre dérivation des formules (15-16) est en partie heuristique et fait appel à des manipulations mal contrôlées de développements asymptotiques sous-dominants (séries doubles en $\frac{1}{n}$ et $e^{-\pi n}$ pour $n \to +\infty$) en relation avec le "phénomène de Stokes" [9] . Il manque un traitement mathématique rigoureux qui rendre cette démarche systématique et qui permette surtout de la généraliser à d'autres potentiels que le cas quartique.

---

[1] R. Balian, G. Parisi, A. Voros : Phys. Rev. Lett. 41, 1141 (1978), et dans : "Mathematical Problems in Feynman Path Integrals", Springer Lecture Notes in Mathematics (1979).

[2] G. Parisi : "Trace Identities for the Schrödinger Operator and the WKB Method" Prétirage Ecole Normale Supérieure LPT ENS 78/9 , soumis à Nucl. Phys. B.

[3] A. Voros : The Zeta Function of the Quartic Oscillator", Prétirage Saclay D. Ph.-T 79/88 , soumis à Nucl. Phys. B.

[4] S. Minakshisunsaram, A. Pleijel : Canad. J. Math. 4, 26 (1952)
L. Hörmander : Acta Math. 121, 93 (1968).
I. C. Percival : Proc. Phys. Soc. 80, 1290 (1962).

[5] L. A. Dikii, Usp. Mat. Nauk. SSSR 13, 111 (1958) (en anglais : Translations AMS (2) vol. 18, 81 (1961)); R. T. Seeley, AMS Proc. Symp. Pure Math. 10, 288 (1967);
D. Robert : Comm. Part. Diff. Eq. 3,755 (1978).

[6] D. Chudnovsky, G. Chudnovsky, A. Voros, en préparation.

[7] L. J. Slater : Generalized hypergeometric functions, Cambridge Univ. Press (1966).

[8] E. C. Titchmarsh : The Riemann Zeta Function, Clarendon Press (Oxford 1951).

[9] R. B. Dingle : Asymptotic Expansions : their derivation and interpretation (Acad. Press, 1973).

***