

Déterminisme et hasards

par Hubert GIÉ (†) et Stéphane OLIVIER

RÉSUMÉ

Faut-il opposer déterminisme et hasard ? Nous nous proposons de dégager les traits communs à la mécanique classique, à la mécanique statistique et à la mécanique quantique, susceptibles de constituer une définition du déterminisme, compatible avec la part de hasard que comportent ces théories.

«Ce qui est hasard pour l'ignorant n'est pas nécessairement hasard pour le savant...» [1].

1. POSITION DU PROBLÈME

Le déterminisme est un moteur essentiel de la pensée scientifique : le physicien se penche sur le présent, à la recherche de lois qui gouvernent l'évolution, dans le but de prévoir l'avenir et éventuellement d'influer sur lui. Pendant plusieurs siècles, les grandes découvertes de la physique se sont inscrites dans le cadre d'un déterminisme «pur et dur» tel que Laplace le définit en quelques lignes [2] :

«Nous devons donc envisager l'état présent de l'Univers comme l'effet de son état antérieur et comme la cause de celui qui va suivre. Une intelligence qui, pour un instant donné, connaîtrait toutes les forces dont la nature est animée et la situation respective des êtres qui la composent, si d'ailleurs elle était assez vaste pour soumettre ces idées à l'analyse, embrasserait dans la même formule les mouvements des plus grands corps de l'Univers et ceux du plus léger atome : *rien ne serait incertain pour elle* et l'avenir comme le passé serait présent à ses yeux. L'esprit humain offre dans la perfection qu'il a su donner à l'astronomie une faible esquisse de cette intelligence».

La vision de Laplace ne laisse pas de place pour l'imprévu : le présent commande entièrement l'avenir. Le hasard à l'inverse, correspond à une impossibilité de prévoir une situation à venir avec certitude. On peut au mieux prévoir des possibilités d'occurrence, mais sans jamais être certain de ces occurrences : le hasard traduit une *incapacité* à mettre en œuvre la conception du déterminisme que nous propose Laplace ; il apparaît comme une manifestation de l'imprévu.

Depuis l'époque de Laplace, la physique s'est enrichie de la mécanique statistique, de la mécanique quantique et de la théorie du chaos en mécanique classique, théories qui ont redonné ses lettres de noblesse au hasard, au point parfois de donner l'impression que le déterminisme était battu en brèche. Le titre du dernier ouvrage de Prigogine, «La fin des certitudes» [3] est à cet égard éloquent. D'après des travaux récents [4], la dynamique du système solaire serait chaotique et donc imprévisible à long terme, ce qui contredit le bel enthousiasme de Laplace qui faisait de l'astronomie le laboratoire idéal du déterminisme !

Faut-il pour autant rejeter le déterminisme ? L'enjeu est important car ce rejet affaiblit la position des sciences et le chemin serait alors bien court pour rejoindre les philosophes relativistes qui ne veulent voir dans les théories scientifiques qu'*un discours parmi d'autres*.

Notre propos est au contraire de dégager des caractères communs de la mécanique classique, de la mécanique statistique et de la mécanique quantique, susceptibles de constituer une formulation unifiée du déterminisme, *non contradictoire avec la part de hasard* apparaissant dans ces trois théories :

- en mécanique classique, une perturbation infime des conditions initiales peut conduire à un changement considérable de l'évolution ultérieure, rendant toute prévision impossible. Si on traite l'incertitude sur la position comme un élément de hasard, l'évolution temporelle de ce hasard est de nature déterministe ; en particulier, *un peu de hasard initial peut parfois conduire à beaucoup de hasard final* ;
- en mécanique statistique, pour décrire de manière *macroscopique* un système à très grand nombre de degrés de liberté, on a recours à des probabilités, qui traduisent notre incapacité à décrire complètement le système au niveau microscopique. La mécanique statistique fournit toutefois les lois qui permettent de prévoir l'évolution des ces probabilités : à cet égard il s'agit bien d'une théorie déterministe ;
- en mécanique quantique, le hasard intervient de manière fondamentale dans la définition-même des états microscopiques ; le caractère probabiliste est dans la nature-même des choses : le monde est ainsi fait. Mais là encore, l'évolution temporelle de la fonction rendant compte du caractère probabiliste est régie par une loi d'évolution déterministe.

En résumé nous nous proposons de montrer que si le déterminisme n'exclut pas le hasard, le hasard n'exclut pas non plus le déterminisme, mais se soumet à ses règles : *ces deux concepts cheminent de pair*.

2. ÉQUATION D'ÉVOLUTION DÉTERMINISTE

2.1. Équation-pilote

Qu'il s'agisse de mécanique classique, de mécanique statistique ou de mécanique quantique, le système étudié est décrit par un ensemble de N fonctions du temps $X_i(t)$ qu'on peut regrouper en un vecteur $[X]$ de \mathbb{R}^N qui caractérise l'état du système. L'entier N appelé *ordre* du système est quelconque. Les fonctions $X_i(t)$ peuvent être des grandeurs physiques telles que des positions ou des quantités de mouvement en mécanique classique, des probabilités en mécanique statistique ou des fonctions permettant le calcul de probabilités en mécanique quantique.

L'évolution temporelle de l'état $[X]$ obéit à une équation différentielle *du premier ordre par rapport au temps* de la forme :

$$\frac{d}{dt} [X] = F([X], t) \quad (1)$$

où F est une fonction quelconque de $[X]$ pouvant éventuellement dépendre explicitement du temps. Lorsque F ne dépend pas explicitement du temps, on dit que le système est *autonome*. Lorsque F est un opérateur linéaire, représenté par une matrice $[A]$, on dit que le système est *linéaire*.

Ainsi, si on se donne l'état $[X_0]$ à l'instant initial $t=0$, l'équation-pilote de l'évolution permet de déterminer l'état $[X(t)]$ du système à l'instant t : nous adopterons l'existence et la forme d'une telle équation-pilote comme *définition* du déterminisme. Cette présentation unifiée du déterminisme laisse néanmoins toute leur place aux différences de fond entre ses différents domaines d'application, via la signification physique différente des fonctions $X_i(t)$ constituant l'état $[X]$ du système, selon qu'on se place en mécanique classique, en mécanique statistique ou en mécanique quantique : *le choix crucial de ces fonctions est propre à chaque théorie*.

Le caractère déterministe de l'équation-pilote est particulièrement frappant si on se préoccupe de sa résolution. Une résolution explicite est rarement possible en dehors du cas où le système est *autonome et linéaire*. Lorsqu'une résolution explicite n'est pas possible, on a recours à des méthodes numériques donnant accès aux valeurs $[X]_k$ de $[X]$ à des instants t_k successifs, choisis de telle sorte que le pas $t_{k+1} - t_k$ soit

très inférieur au temps caractéristique d'évolution de $[X]$. En assimilant la dérivée $d[X]/dt$ à un taux d'accroissement, on obtient un processus *d'itération* :

$$\frac{[X]_{k+1} - [X]_k}{t_{k+1} - t_k} = F([X]_k, t_k) \quad \text{puis} \quad [X]_{k+1} = [X]_k + F([X]_k, t_k) (t_{k+1} - t_k) \quad (2)$$

La possibilité d'utiliser un processus itératif, c'est-à-dire de calculer $[X]_{k+1}$ à partir de $[X]_k$, est ainsi la marque concrète du caractère déterministe de l'évolution, tel que nous l'avons défini.

2.2. Cas d'un système autonome et linéaire - Exposant de Lyapounov

Considérons un système *linéaire et autonome* et notons $[A]$ la matrice, indépendante du temps, associée à l'équation-pilote.

$$\frac{d[X]}{dt} = [A] [X] \quad (3)$$

Dans toute la suite, nous supposons pour simplifier que les N valeurs propres de $[A]$ sont distinctes. Soit $[C]_r$ un vecteur-propre de la matrice $[A]$ pour la valeur propre λ_r : $[C]_r$ et λ_r sont indépendants du temps car la matrice $[A]$ est indépendante du temps. Alors $[X]_r = \exp(\lambda_r t) [C]_r$ est solution de l'équation-pilote (3) :

$$[A] [X]_r = \lambda_r \exp(\lambda_r t) [C]_r = \lambda_r [X]_r$$

et

$$\frac{d[X]_r}{dt} = \frac{d(\exp(\lambda_r t))}{dt} [C]_r = \lambda_r \exp(\lambda_r t) [C]_r = \lambda_r [X]_r$$

de telle sorte que

$$\frac{d[X]_r}{dt} = [A] [X]_r$$

La linéarité du système permet ensuite de construire la solution générale de l'équation-pilote sous la forme d'une combinaison linéaire de ces N solutions particulières :

$$[X(t)] = \sum_r d_r \exp(\lambda_r t) [C]_r \quad (4)$$

où les d_r sont des coefficients constants réels ou complexes. A l'instant $t = 0$, cette relation se simplifie en :

$$[X_0] = \sum_r d_r [C]_r$$

et la décomposition unique de l'état $[X_0]$ sur la base des vecteurs propres $[C]_r$ détermine de manière unique les constantes d_r . La matrice $[L(t)] = [L_{ij}(t)]$ avec $L_{ij}(t) = \delta_{ij} \exp(\lambda_i t)$ permet alors de relier linéairement les états $[X_0]$ et $[X(t)]$:

$$[X(t)] = [L(t)] [X_0] \quad (5)$$

L'élément le plus important dans cette étude est le comportement asymptotique pour $t \rightarrow +\infty$: si $\lambda_m = \alpha_m + i\beta_m$ désigne la valeur propre dont la partie réelle α_m est la plus grande, on a alors :

$$[X(t)] \approx d_m \exp(\lambda_m t) [C]_m = d_m \exp(\alpha_m t) \exp(i\beta_m t) [C]_m \quad (6)$$

Pour $\alpha_m < 0$, $[X(t)]$ tend vers zéro lorsque t tend vers l'infini, alors que pour $\alpha_m > 0$, $[X(t)]$ diverge. Ainsi, le nombre α_m , appelé *exposant de Lyapounov*, régit le comportement asymptotique du système. Nous rencontrerons les différents cas $\alpha_m < 0$, $\alpha_m > 0$ et $\alpha_m = 0$ dans la suite.

3. DÉTERMINISME ET HASARD EN MÉCANIQUE CLASSIQUE

3.1. Équation-pilote

Envisageons tout d'abord le cas d'un point matériel se déplaçant dans un référentiel galiléen, le long de l'axe Ox. Ce point est repéré par sa position x et sa vitesse \dot{x} . Il est soumis à des forces qui peuvent être non dissipatives (indépendantes de \dot{x}) ou dissipatives. Si $\mathcal{F}(x, \dot{x}, t)$ désigne la résultante de ces forces, la loi fondamentale de la dynamique s'écrit :

$$m\ddot{x} = \mathcal{F}(x, \dot{x}, t)$$

Il s'agit d'une équation différentielle du deuxième ordre, n'entrant donc pas *a priori* dans le cadre de l'équation-pilote (1), mais on peut réécrire cette équation sous la forme d'un système différentiel du premier ordre :

$$\frac{dx}{dt} = \dot{x} ; \quad \frac{d(\dot{x})}{dt} = \frac{\mathcal{F}(x, \dot{x}, t)}{m}$$

Avec $[X] = \begin{pmatrix} X_1 = x \\ X_2 = \dot{x} \end{pmatrix}$ et $F([X], t) = \begin{pmatrix} F_1 = \dot{x} \\ F_2 = \frac{\mathcal{F}(x, \dot{x}, t)}{m} \end{pmatrix}$ on a alors $\frac{d[X]}{dt} = F([X], t)$ et

on obtient une structure déterministe de la forme (1). Partant des lois de la mécanique, une manipulation analogue permet plus généralement de se ramener à la structure déterministe (1) pour un ensemble de q points matériels (avec $N = 6q$ soit trois paramètres de position et leurs trois dérivées premières pour chaque point) ou pour un ensemble de q solides (avec $N = 12q$ soit six paramètres de position dont trois angles, et leurs six dérivées premières pour chaque solide).

Par exemple pour un oscillateur harmonique amorti à une dimension, on a $\mathcal{F}(x, \dot{x}, t) = -kx - f\dot{x} = -kX_1 - fX_2$ et l'équation-pilote s'écrit :

$$\frac{d[X]}{dt} = [A] [X] \quad \text{avec} \quad [A] = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{k}{m} & -\frac{f}{m} \end{pmatrix}$$

Pour ce système linéaire et autonome, le formalisme matriciel introduit au § 2.2. permet de retrouver rapidement les résultats classiques. Ainsi les valeurs propres sont solutions de l'équation caractéristique habituelle :

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ -\frac{k}{m} & -\frac{f}{m} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad \text{soit} \quad m\lambda^2 + f\lambda + k = 0 \quad \text{soit} \quad \lambda = -\frac{f}{2m} \pm \sqrt{\frac{f^2}{m^2} - \frac{4k}{m}}$$

et la solution générale est de la forme :

$$\begin{pmatrix} x \\ \dot{x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} \exp(\lambda_1 t) + \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} \exp(\lambda_2 t)$$

soit $x = a_1 \exp(\lambda_1 t) + a_2 \exp(\lambda_2 t) ; \quad \dot{x} = b_1 \exp(\lambda_1 t) + b_2 \exp(\lambda_2 t)$

où les constantes a_1, a_2, b_1, b_2 sont déterminées d'une part par les deux conditions initiales $x(t=0)$ et $\dot{x}(t=0)$ et d'autre part, par les contraintes $b_1 = \lambda_1 a_1$ et $b_2 = \lambda_2 a_2$ dues au fait que \dot{x} est la dérivée de x . Selon le signe du discriminant, ces racines sont réelles négatives, ou complexes conjuguées à parties réelles négatives, de telle sorte que les exponentielles tendent vers zéro lorsque t tend vers l'infini : le mouvement s'éteint. On peut représenter l'évolution de l'état du système dans l'espace des phases, en traçant le lieu des points successifs obtenus en portant à chaque instant la position x en abscisse et la vitesse \dot{x} en ordonnée ; pour des amortissements faibles, la trajectoire dans l'espace des phases est une spirale autour de l'origine O qui est un *point attracteur*.

Dans le cas particulier d'un système non amorti ($f=0$), les valeurs propres sont imaginaires pures, ce qui conduit à un régime sinusoïdal ; ce régime étant périodique, la trajectoire dans l'espace des phases est *fermée* : c'est une ellipse de centre O ⁽¹⁾.

3.2 La part du hasard : comportement vis-à-vis d'une perturbation des conditions initiales

Dans le cadre de la mécanique classique, l'état $[X]$ du système ne contient aucune part de hasard, et l'évolution déterministe du système ne peut pas non plus en introduire : en l'absence de hasard dans l'état initial $[X_0]$, il n'y a aucun hasard dans l'état $[X]$ à l'instant t . Mais en pratique, compte tenu de la précision limitée des mesures, il n'est pas possible de connaître parfaitement l'état initial. On peut décrire l'indétermination sur $[X_0]$ par une perturbation initiale $[\delta X_0]$ aléatoire. Une question essentielle est alors l'évolution $[\delta X(t)]$ de cette perturbation. Il s'agit notamment de savoir si le système évolue vers « plus de hasard » : si c'est le cas, on dira que le système est *sensible aux conditions initiales*.

Considérons donc une perturbation $[\delta X]$ d'une solution $[X]$. Un développement de Taylor d'ordre 1 de chacune des N équations scalaires contenues dans l'équation-pilote s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{d(X_i + \delta X_i)}{dt} &= \frac{dX_i}{dt} + \frac{d(\delta X_i)}{dt} = F_i(X_1 + \delta X_1, X_2 + \delta X_2, \dots, X_N + \delta X_N, t) \\ &= F_i(X_1, X_2, \dots, X_N, t) + \sum_j \frac{\partial F_i}{\partial X_j} \delta X_j \end{aligned}$$

En soustrayant les équations-pilotes non-perturbées :

$$\frac{dX_i}{dt} = F_i(X_1, X_2, \dots, X_N, t) \quad \text{on obtient} \quad \frac{d(\delta X_i)}{dt} = \sum_j \frac{\delta F_i}{\delta X_j} \delta X_j$$

Ce qui s'écrit en définissant la matrice jacobienne $[J] = [J_{ij}] = [\partial F_i / \partial X_j]$:

$$\frac{d}{dt} [\delta X] = [J] [\delta X] \quad (7)$$

Ainsi, la perturbation $[\delta X]$ est solution d'une équation-pilote *déterministe*. On peut dire de manière imagée que *la mécanique classique laisse une place au hasard, mais que ce hasard n'évolue pas au hasard*.

Dans le cas particulier où l'équation-pilote est linéaire et autonome, c'est-à-dire de la forme (3), la soustraction des équations perturbée et non-perturbée montre immédiatement que $[\delta X(t)]$ est solution de la même équation que $[X(t)]$ c'est-à-dire que la matrice jacobienne $[J]$ est confondue avec $[A]$. Les résultats (4), (5), (6) sont donc directement utilisables pour $[\delta X(t)]$. En particulier la relation (6) devient :

$$[\delta X(t)] \approx d_m \exp(\lambda_m t) [C]_m = d_m \exp(\alpha_m t) \exp(i\beta_m t) [C]_m \quad (8)$$

Ainsi, lorsque l'exposant de Lyapounov est positif, le hasard croît exponentiellement en régime asymptotique : le système possède une *sensibilité aux conditions initiales*.

Dans le cas d'un système non-linéaire, la matrice jacobienne $[J]$ dépend de la valeur de l'état de référence $[X(t)]$ au voisinage duquel on effectue la linéarisation et elle ne dépend du temps que par l'intermédiaire de $[X(t)]$.

Si l'état de référence est *stationnaire*, la matrice jacobienne ne dépend pas explicitement du temps et l'équation (7) est donc linéaire et autonome. D'après les résultats (4), (5), (6), le hasard croît lorsque l'exposant de Lyapounov est positif : le système possède une *sensibilité aux conditions initiales*.

Tel n'est pas le cas pour l'oscillateur harmonique amorti dont l'exposant de Lyapounov est strictement négatif : sur la figure 1, les deux trajectoires dans l'espace des phases issues des deux points voisins $E_1 (x_{01} = 1 ; \dot{x}_{01} = 0)$ et $E_2 (x_{02} = 1,1 ; \dot{x}_{02} = 0)$ correspondant à des conditions initiales voisines, se rapprochent indéfiniment au cours du temps, pour finalement se rejoindre asymptotiquement au point attracteur O.

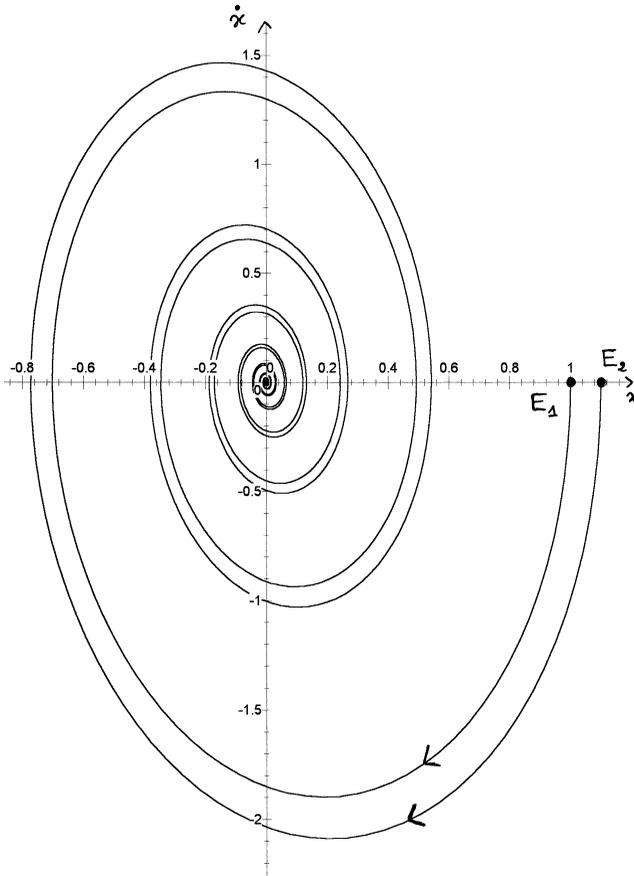


Figure 1 : Oscillateur harmonique amorti - S.C.I. Les trajectoires issues des points voisins E_1 et E_2 se rapprochent.

Inversement, un oscillateur harmonique amplifié ($f < 0$) est sensible aux conditions initiales : sur la figure 2, les deux trajectoires dans l'espace des phases issues des deux points voisins E_1 ($x_{01} = 1$; $\dot{x}_{01} = 0$) et E_2 ($x_{02} = 1.2$; $\dot{x}_{02} = 0$) s'éloignent indéfiniment au cours du temps.

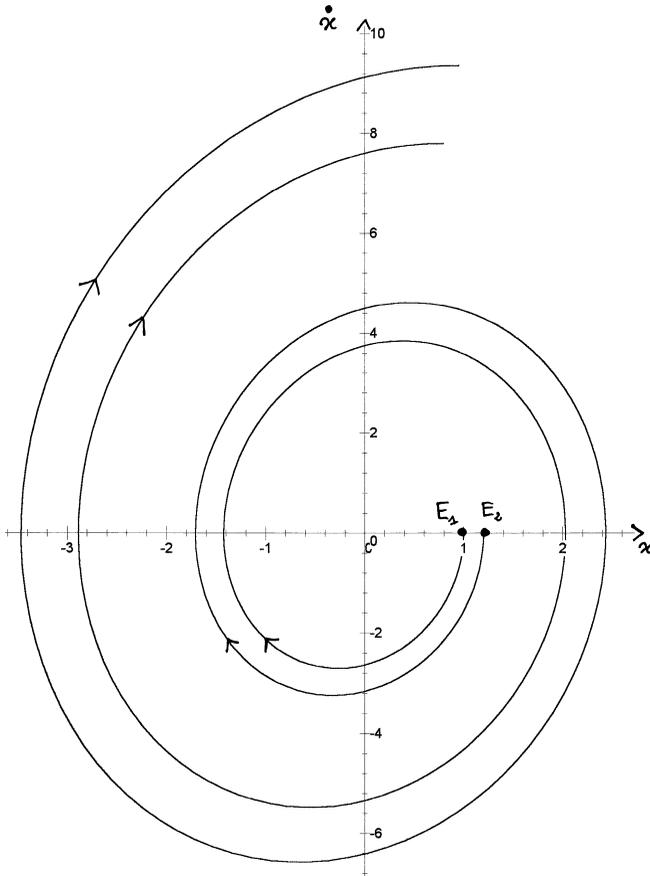


Figure 2 : Oscillateur harmonique amplifié - S.C.I. Les trajectoires issues des points voisins E_1 et E_2 s'éloignent.

Si l'état de référence n'est pas stationnaire, la matrice jacobienne dépend du temps via $[X(t)]$. De ce fait, seule une résolution numérique est possible ; elle fournit une relation linéaire de la forme (5) entre les fluctuations aux instants t et 0 :

$$[\delta X(t)] = [L(t)] [\delta X_0] \tag{9}$$

La matrice $[L(t)]$ permet de construire, pour chaque état de référence $[X(t)]$ un exposant de Lyapounov généralisé, imposant lorsqu'il est positif la propriété de sensibilité aux conditions initiales (cf. [6]).

3.3. Un exemple : l'oscillateur de Van der Pool

Considérons par exemple l'oscillateur de Van der Pool, oscillateur unidimensionnel non-linéaire pour lequel avec un temps adimensionné, l'équation du mouvement s'écrit :

$$\ddot{x} - (\varepsilon - x^2) \dot{x} + x = 0$$

De manière imagée, on peut dire que c'est un oscillateur harmonique soumis en plus de la force élastique, à une force $-f\dot{x}$ proportionnelle à la vitesse, mais dont le coefficient de proportionnalité $f = x^2 - \varepsilon$ dépend de x : pour $|x| > \varepsilon$ on a $f > 0$ et la force est la cause d'un amortissement ; pour $|x| < \varepsilon$, on a $f < 0$ et la force est déstabilisatrice.

Soit sous la forme d'une structure déterministe (1) avec $X_1 = x$ et $X_2 = \dot{x}$:

$$\frac{d[X]}{dt} = F([X], t) \quad \text{avec} \quad F([X], t) = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{x} \\ -x + (\varepsilon - x^2) \dot{x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_2 \\ -X_1 + (\varepsilon - X_1^2) X_2 \end{pmatrix}$$

La matrice jacobienne s'écrit immédiatement :

$$[J] = \begin{pmatrix} \partial F_1 / \partial X_1 & \partial F_1 / \partial X_2 \\ \partial F_2 / \partial X_1 & \partial F_2 / \partial X_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -(1 + 2X_1 X_2) & \varepsilon - X_1^2 \end{pmatrix}$$

Un état stationnaire du système correspond à X_1 et X_2 constants ; mais X_1 constant impose $\dot{X}_1 = X_2 = 0$ et $\ddot{X}_1 = \dot{X}_2 = 0$ soit :

$$X_2 = 0 \quad \text{et} \quad -X_1 + (\varepsilon - X_1^2) X_2 = 0 \quad \text{soit} \quad X_1(t) = 0 \quad \text{et} \quad X_2(t) = 0$$

L'évolution d'une petite perturbation δX_0 de cet état de référence stationnaire est guidée, tant qu'on reste très proche de cet état de référence, par la matrice jacobienne correspondante :

$$[J] = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & \varepsilon \end{pmatrix}$$

dont les valeurs propres λ sont solutions de :

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ -1 & \varepsilon - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad \text{soit} \quad \lambda^2 - \varepsilon \lambda + 1 = 0$$

Pour $0 < \varepsilon < 2$, le discriminant $\Delta = \varepsilon^2 - 4$ est négatif ; les racines sont complexes conjuguées et leur partie réelle commune $\alpha_m = \varepsilon/2 > 0$ est l'exposant de Lyapounov

cherché : une petite perturbation initiale de l'état stationnaire $[X] = [0]$ diverge en régime asymptotique et cet état de référence est sensible aux conditions initiales.

On constate expérimentalement que le régime tend asymptotiquement vers un régime périodique, caractérisé par un *cycle limite* dans le plan de phases où X_1 est l'abscisse et X_2 l'ordonnée : par exemple sur la figure 3, les deux trajectoires issues des points $E_1 (x_{01} = 0,5 ; \dot{x}_{01} = 0)$ et $E_2 (x_{02} = 5 ; \dot{x}_{02} = 0)$ tendent asymptotiquement vers le même cycle limite.

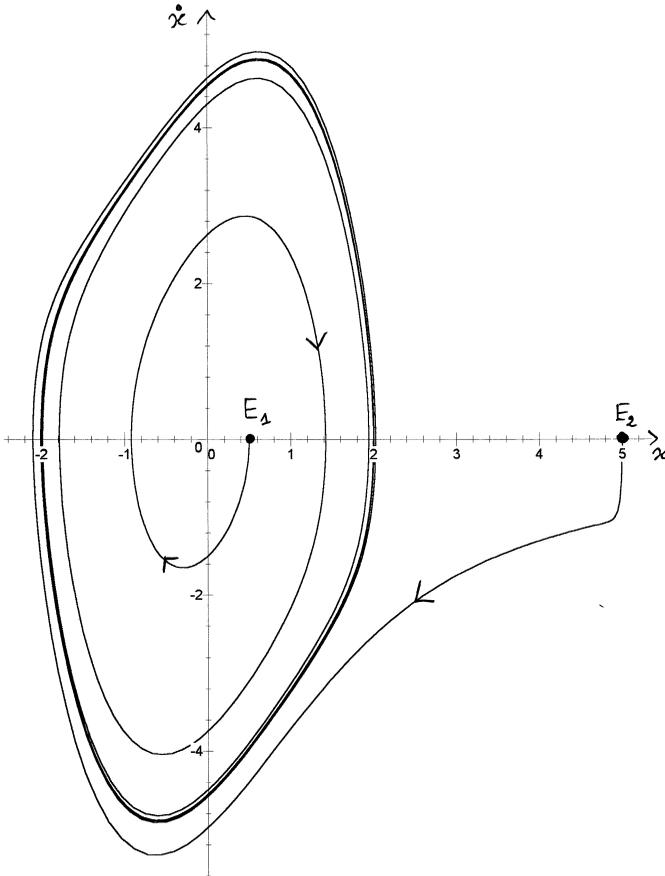


Figure 3 : Oscillateur de Van der Pool - Cycle Limite. *Les trajectoires issues des points E_1 et E_2 éloignés tendent asymptotiquement vers le même cycle limite.*

L'existence de ce cycle peut se comprendre intuitivement en remarquant qu'un comportement périodique impose au travail de la force proportionnelle à la vitesse d'être nul sur une période : le cycle est l'unique trajectoire de l'espace des phases assurant cette propriété ; cela est possible si la force est tantôt réceptrice ($|x| > \varepsilon$), tantôt motrice ($|x| < \varepsilon$), ce qui impose au cycle de couper les droites $x = \pm \varepsilon$. L'étude des perturbations de ce cycle limite relève de méthodes numériques, mais on peut prévoir que son exposant de Lyapounov doit être négatif ou nul puisque le cycle est *attracteur*.

Notons que l'existence de ce cycle limite montre que «globalement» l'oscillateur de Van der Pool fait disparaître toute trace de perturbation sur les conditions initiales :

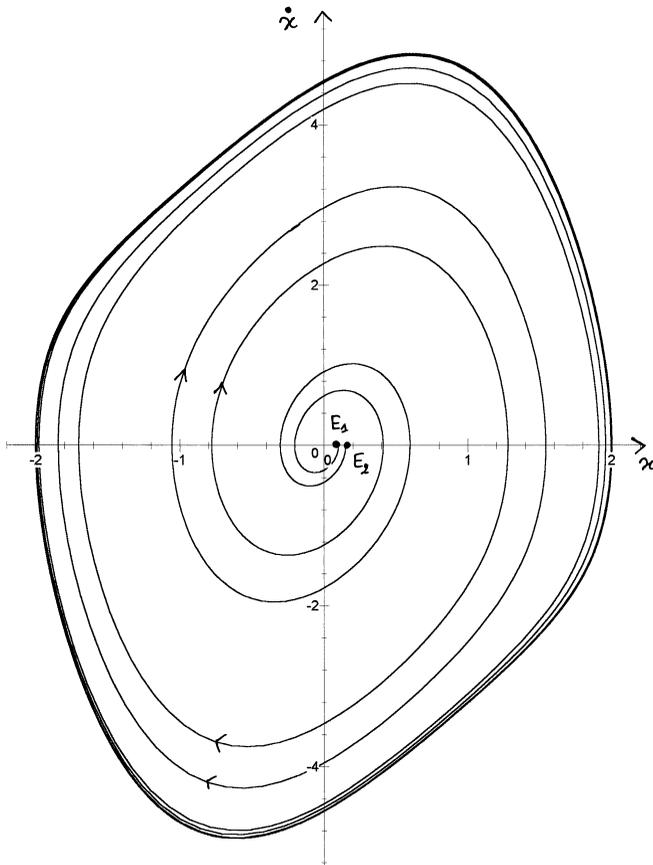


Figure 4 : Oscillateur de Van der Pool - S.C.I. Les trajectoires issues des points E_1 et E_2 s'éloignent d'abord, puis se rapprochent.

les deux trajectoires représentées sur la figure 3 issues de points E_1 et E_2 très éloignés, évoluent vers le cycle limite. On voit là les limites de l'analyse linéaire des perturbations : l'état stationnaire $[X] = [0]$ a un exposant de Lyapounov positif, mais le comportement explosif proportionnel à $\exp(\alpha_m t)$ ne décrit pas correctement la réalité car on s'éloigne trop de l'état de référence pour que la linéarisation reste valable ; par exemple sur la figure 4, les deux trajectoires issues des points voisins E_1 ($x_{01} = 0, 10$; $\dot{x}_{01} = 0$) et E_2 ($x_{02} = 0, 15$; $\dot{x}_{02} = 0$) s'éloignent ($\alpha_m > 0$) puis se rapprochent ($\alpha_m < 0$) avant de se rejoindre pour atteindre le cycle limite. Alors que pour un système linéaire autonome, l'exposant de Lyapounov est indépendant de l'état de référence, pour un système non-linéaire, il en dépend. En définitive, dans le cas général, il est indispensable d'avoir une vision *globale* de la sensibilité aux conditions initiales, c'est-à-dire de déterminer l'exposant de Lyapounov pour de nombreux états de référence.

3.4. Un autre aspect du hasard : le chaos

Pour un système sensible aux conditions initiales, on peut s'intéresser à la régularité temporelle des solutions $[X(t)]$. Lorsqu'aucune régularité n'existe, on dit qu'un système est *chaotique* ; il semble alors évoluer «au hasard» alors qu'il est régi par une équation déterministe : on parle de *chaos déterministe*. L'étude de cet aspect du hasard, qui s'intéresse aux *corrélations* entre les états *successifs* du système, ne rentre pas dans le cadre que nous nous sommes fixé : nous n'étudierons que l'évolution déterministe d'un hasard *initial* (cf. § 3.2).

Notons toutefois que, dans le cas d'un système linéaire et autonome, la solution $[X(t)]$ est donnée explicitement par la relation (4) et qu'en régime asymptotique, elle varie proportionnellement à $\exp(\alpha_m t)$ où α_m est l'exposant de Lyapounov. Lorsque α_m est positif, le système est sensible aux conditions initiales car $[\delta X(t)]$ diverge proportionnellement à $\exp(\alpha_m t)$, mais le système n'est pas chaotique pour autant car le comportement temporel de $[\delta X(t)]$ est «régulier» ; ainsi, *la sensibilité aux conditions initiales n'est pas une condition suffisante pour que le chaos apparaisse*. En réalité, le chaos n'est possible que s'il existe une trajectoire $[X(t)]$ dans l'espace des phases \mathbb{R}^N de type attracteur, mais dont les propriétés topologiques très différentes de celles d'un cycle limite (cf. § 3.3.) en font un *attracteur étrange*. Une telle situation n'est, en fait, possible que pour un système *non-linéaire* et d'ordre $N \geq 3$ (cf. [6], [7], [8], [9]).

4. DÉTERMINISME ET HASARD EN MÉCANIQUE STATISTIQUE [10]

4.1. Position du problème

La mécanique statistique a pour objet l'étude de systèmes dont un état macroscopique, seul accessible à l'expérimentateur⁽²⁾, est constitué d'un grand nombre d'états microscopiques non accessibles, dont la nature profonde est quantique⁽³⁾.

La mécanique statistique se donne pour but d'accéder au comportement macroscopique des systèmes à partir d'hypothèses très larges au niveau microscopique, *de nature probabiliste, sans chercher à utiliser de modèles microscopiques précis* : en cela, elle se distingue des *théories cinétiques* qui, telle la théorie cinétique des gaz, reposent sur des hypothèses simplificatrices concernant les molécules et leurs interactions ; la mécanique statistique compense l'ignorance que nous avons du comportement microscopique par des hypothèses *probabilistes* très générales.

Dans toute la suite, nous nous limiterons à l'étude d'un système macroscopique fermé et isolé : son énergie E est constante, à des fluctuations statistiques δE près, avec $|\delta E/E| \ll 1$ et nous admettrons la possibilité de passer de tout état microscopique (i) à tout autre état microscopique (j). Plus précisément, le système étant dans l'état (i) à l'instant t , la probabilité pour qu'il passe de l'état (i) à l'état (j) entre les instants t et $t + dt$ est supposée de la forme :

$$p[(i)_t \rightarrow (j)_{t+dt}] = a_{ji} dt \quad \text{avec } a_{ji} \text{ indépendant du temps et strictement positif} \quad (10)$$

Ce sont précisément les fluctuations d'énergie δE qui rendent possibles ces transitions.

Nous supposerons en outre la *réversibilité microscopique* du système, c'est-à-dire que le processus de transition $i \rightarrow j$ entre les instants t et $t + dt$ et le processus de transition $j \rightarrow i$ entre les instants $t - dt$ et t ont la même probabilité, soit :

$$a_{ji}(t + dt - t) = a_{ij}(-t - (-t - dt)) \quad \text{soit } a_{ji} dt = a_{ij} dt \quad \text{puis } \mathbf{a_{ji} = a_{ij}} \quad (11)$$

4.2. Mise en place de l'équation-pilote

Un état macroscopique est constitué à chaque instant t d'un mélange statistique des états microscopiques (i) avec des probabilités $\{p_i(t); 1 \leq i \leq N\}$. Pour être dans l'état (i) à l'instant $t + dt$:

– le système peut être dans l'état ($j \neq i$) à l'instant t avec une probabilité $p_j(t)$, puis transiter vers l'état (i) avec une probabilité conditionnelle $a_{ij} dt$; la probabilité du

processus complet vaut donc $p_j(t) a_{ij} dt$; pour deux valeurs différentes de j , les processus d'évolution vers l'état (i) sont incompatibles, de telle sorte que la probabilité d'être dans un état ($j \neq i$) à l'instant t et dans l'état (i) à l'instant $t + dt$ s'écrit $\sum_{j \neq i} p_j(t) a_{ij} dt$;

– le système peut aussi être dans l'état (i) à l'instant t avec une probabilité $p_i(t)$, puis ne transiter vers aucun des états (j), avec une probabilité conditionnelle $1 - \sum_j a_{ji} dt$; la probabilité d'être dans l'état (i) à l'instant t et d'y rester à l'instant $t + dt$ s'écrit alors $p_i(t) \left(1 - \sum_{j \neq i} a_{ji} dt \right)$.

En définitive, la probabilité d'être dans l'état (i) à l'instant t résulte de ces deux processus incompatibles et vaut :

$$p_i(t + dt) = \sum_{j \neq i} p_j(t) a_{ji} dt + p_i(t) \left(1 - \sum_{j \neq i} a_{ji} dt \right)$$

En posant $a_{ii} = - \sum_{j \neq i} a_{ji}$ (12)

l'équation d'évolution devient :

$$p_i(t + dt) - p_i(t) = dt \sum_{j=1}^N a_{ij} p_j(t)$$

avec par construction $\sum_{j=1}^N a_{ij} = 0$

En divisant par dt et en faisant tendre dt vers zéro, on obtient l'équation pilote guidant l'évolution des probabilités $p_i(t)$ qui décrivent l'état macroscopique $[P(t)] = [p_i(t)]$:

$$\frac{d[P]}{dt} = [A] [P] \quad \text{avec} \quad [A] = [a_{ij}] \quad (13)$$

Nous avons donc obtenu une équation d'évolution de l'état macroscopique [P] décrit par les probabilités $p_i(t)$ de la forme (1) c'est-à-dire *déterministe* : *le hasard initial commande les hasards futurs*.

4.3. Évolution du système

Plus précisément, l'équation-pilote est du type (3) c'est-à-dire *linéaire et autonome* : nous pouvons donc utiliser les résultats (4), (5) et (6) et pour cela il faut avant tout rechercher les valeurs propres de la matrice [A]. L'hypothèse de réversibilité microscopique nous a conduits à l'équation (11) qui permet d'affirmer que la matrice [A] est *symétrique*, de telle sorte que ses valeurs propres sont nécessairement réelles. En outre les règles générales du calcul des probabilités nous ont conduits à la relation (12) qui va jouer un rôle essentiel⁽⁴⁾.

Considérons la forme quadratique $Y = \sum_i \sum_j a_{ij} (p_i - p_j)^2$. Avec $p_i - p_i = 0$ et $a_{ij} > 0$ pour $i \neq j$, on a immédiatement $Y > 0$. Puis :

$$Y = \sum_i \sum_j a_{ij} (p_i^2 + p_j^2 - 2p_i p_j) = \sum_i p_i^2 \left(\sum_j a_{ij} \right) + \sum_j p_j^2 \left(\sum_i a_{ij} \right) - 2 \sum_i \sum_j a_{ij} p_i p_j$$

En utilisant les relations (11) et (12) on voit que les deux premiers termes sont nuls et il reste :

$$Y = -2 \sum_i \sum_j a_{ij} p_i p_j \quad (14)$$

Pour un vecteur propre [P] de valeur propre λ , donc tel que $\sum_j a_{ij} p_j = \lambda p_i$, la forme quadratique Y peut encore se transformer en :

$$Y = -2 \sum_i p_i \left(\sum_j a_{ij} p_j \right) = -2 \sum_i p_i (\lambda p_i) = -2 \lambda \sum_i p_i^2$$

Avec $\sum_i p_i^2 > 0$ et $Y \geq 0$ on a nécessairement $\lambda \leq 0$: les valeurs propres de [A] sont donc réelles, négatives ou nulles.

Examinons plus en détail le cas d'une valeur propre nulle. Avec $\lambda = 0$, on a $Y = 0$ et, en revenant à la définition de Y :

$$\sum_i \sum_j a_{ij} (p_i - p_j)^2 = 0$$

Avec $p_i = p_i$ et $a_{ij} > 0$ pour $i \neq j$, il vient :

$$a_{ij} (p_i - p_j)^2 = 0 \quad \forall j \quad \forall i \neq j \quad \text{puis} \quad \mathbf{p}_i = \mathbf{p}_j \quad (15)$$

Ainsi $\lambda = 0$ est bien valeur propre de $[A]$; le sous-espace propre correspondant est de dimension 1 et contient un seul vecteur-propre satisfaisant aux conditions $p_i \geq 0$ et $\sum_i p_i = 1$, le vecteur tel que $\mathbf{p}_i = \mathbf{1}/N \quad \forall i$.

En définitive, toutes les valeurs propres sont négatives sauf la valeur propre $\lambda = 0$: l'exposant de Lyapounov du problème est donc $\alpha_m = 0$ et la formule (4) montre que *l'état macroscopique d'un système fermé et isolé tend vers un état d'équilibre décrit par l'équiprobabilité des états microscopiques* ; nous retrouvons ici l'ensemble *microcanonique* tel qu'il est défini en mécanique statistique. Il est remarquable qu'on tende vers le même état d'équilibre quel que soit l'état initial : *le système est totalement insensible aux conditions initiales*.

Notons que ces résultats très puissants ont été obtenus comme conséquences d'hypothèses très générales contenues dans les propriétés de la matrice $[A]$; il ne sont pas soumis à la connaissance explicite des coefficients a_{ij} . En revanche la connaissance de ces coefficients permettrait de définir un temps de relaxation du système $\tau = 1/|\lambda_m|$ où λ_m est la plus grande valeur propre *non nulle*.

4.4. Théorème H de Boltzmann

$$\text{Soit} \quad H = - \sum_i p_i \ln p_i \quad \text{avec} \quad \sum_i p_i = 1$$

$$\text{Calculons} \quad \dot{H} = dH/dt = - \sum_i \dot{p}_i \ln p_i - \sum_i \dot{p}_i$$

En dérivant $\sum_i p_i = 1$, on obtient :

$$\sum_i \dot{p}_i = 0 \quad \text{puis} \quad \dot{H} = - \sum_i \dot{p}_i \ln p_i$$

En exprimant $\dot{p}_i = \sum_j a_{ij} p_j$ avec l'équation pilote de l'évolution, il vient :

$$\dot{H} = - \sum_i \ln p_i \left(\sum_j a_{ij} p_j \right) = - \sum_i \sum_j a_{ij} p_j \ln p_i \quad (16)$$

D'autre part, avec $\sum_i a_{ij} = 0$, on a :

$$\sum_i \sum_j a_{ij} p_i \ln p_i = \sum_i p_i \ln p_i \left(\sum_j a_{ij} \right) = 0$$

Soit en ajoutant membre à membre à la relation (16) :

$$\dot{H} = - \sum_i \sum_j a_{ij} (p_j - p_i) \ln p_i \quad (17)$$

En permutant les indices i et j et en exploitant la symétrie de la matrice $[A]$, on obtient :

$$\dot{H} = - \sum_i \sum_j a_{ji} (p_i - p_j) \ln p_j = - \sum_i \sum_j a_{ij} (p_i - p_j) \ln p_j \quad (18)$$

Ou encore en prenant la somme de (17) et (18) :

$$2 \dot{H} = \sum_i \sum_j a_{ij} (p_i - p_j) (\ln p_i - \ln p_j) \quad (19)$$

où avec $p_i - p_i = 0$, la somme peut se limiter aux termes $i \neq j$. Le logarithme étant une fonction croissante, $(p_i - p_j) (\ln p_i - \ln p_j)$ est positif. Avec en outre $a_{ij} > 0$ pour $i \neq j$, il vient finalement :

$$dH/dt \geq 0 \quad (20)$$

où l'inégalité est en réalité stricte, sauf si on a atteint l'état d'équilibre où toutes les probabilités sont alors égales. Ainsi, l'évolution du système s'accompagne d'une

croissance stricte de la fonction H . En introduisant la constante de Boltzmann k_B comme *étalon d'entropie*, on construit ainsi une fonction entropie S :

$$S = -k_B \sum_i p_i \ln p_i \quad (21)$$

qui vérifie $dS/dt \geq 0$ pour un système fermé et isolé. On établit ainsi le *deuxième principe de la thermodynamique*. A l'équilibre, on a $p_i = 1/N \quad \forall i$; l'entropie s'écrit alors :

$$S = -k_B \sum_i \frac{\ln(1/N)}{N} = k_B \frac{N \ln N}{N} \quad \text{soit} \quad S = k_B \ln N$$

et nous obtenons la formule de Boltzmann.

L'irréversibilité macroscopique du processus d'évolution est une manifestation forte du déterminisme associé à la structure de l'équation-pilote. En revanche, l'idée qui sous-tend l'hypothèse de réversibilité microscopique est plutôt celle d'un hasard suffisant pour que le comportement ne soit pas biaisé. Il serait donc assez naturel à première vue d'opposer l'irréversibilité macroscopique à la réversibilité microscopique ; bien au contraire nous avons montré qu'elle en est la conséquence directe : *le hasard et le déterminisme cheminent de pair*.

5. DÉTERMINISME ET HASARD EN MÉCANIQUE QUANTIQUE

5.1. Équation pilote de l'évolution

Un état quantique est décrit par une fonction d'onde ψ susceptible d'être décomposée sur une base ψ_j d'états de référence. Le choix de ces états de référence n'est pas unique et doit s'accorder à l'étude physique envisagée : il relève de «l'art du physicien»⁽⁵⁾.

Lorsque le système est décrit par la fonction ψ décrivant l'état ψ , il a une certaine probabilité d'«être» dans chacun des états ψ_j et la probabilité pour qu'il soit dans l'état ψ_j vaut⁽⁶⁾ :

$$p_j = |c_j|^2 = c_j c_j^* \quad (22)$$

L'état quantique ψ peut être défini par l'ensemble des c_j que nous noterons [C] : le hasard fait donc partie intégrante de l'état quantique ; il est intrinsèque à cet état et le définit via [C]. *Le hasard est ici incontournable ; il est présent au plus profond du système, un peu comme un virus en informatique...*

On postule ensuite l'équation d'évolution de [C] dite *équation de Schrödinger* :

$$\frac{d[C]}{dt} = [A] [C] \quad \text{soit} \quad \frac{dc_j}{dt} = \sum_k a_{jk} c_k \quad (23)$$

où la matrice [A] peut dépendre du temps. L'équation de Schrödinger est donc une structure déterministe linéaire. Dans la suite, nous supposons pour simplifier que [A] est indépendante du temps, de telle sorte que l'équation de Schrödinger soit autonome (cf. § 2.2.).

Il est important de noter que, si l'équation-pilote est bien de même nature que celle de la mécanique statistique, en revanche elle ne s'applique pas ici directement aux probabilités mais à la représentation [C] de l'état du système. Soulignons aussi que la détermination des coefficients a_{ij} de [A] relève bien entendu de l'analyse physique du système : on ne connaît pas de règle générale.

Examinons l'évolution temporelle des probabilités $p_j = c_j c_j^*$:

$$\frac{dp_j}{dt} = c_j \frac{dc_j^*}{dt} + c_j^* \frac{dc_j}{dt} = c_j \left(\sum_k a_{jk}^* c_k^* \right) + c_j^* \left(\sum_k a_{jk} c_k \right)$$

Soit finalement :

$$\frac{dp_j}{dt} = \sum_k a_{jk} c_k c_j^* + a_{jk}^* c_j c_k^* \quad (24)$$

Comme en mécanique statistique, les lois générales des probabilités imposent à la matrice [A] certaines propriétés. Le système devant nécessairement se trouver dans un des états ψ_j , on a :

$$\sum_j p_j = 1 \quad \text{et en dérivant} \quad \sum_j \frac{dp_j}{dt} = 0 \quad (25)$$

Soit d'après (24) :

$$\sum_j \sum_k a_{jk} c_k c_j^* + a_{jk}^* c_j c_k^* = 0 \quad \forall c_j \quad \forall c_k$$

En regroupant les termes identiques, il vient :

$$\sum_j \sum_k (a_{jk} + a_{kj}^*) c_k c_j^* = 0 \quad \forall c_j \quad \forall c_k \quad \text{soit} \quad a_{jk} + a_{kj}^* = 0 \quad \forall c_j \quad \forall c_k$$

Donc $[A]^* = -[A]^t$ c'est-à-dire que la matrice $[A]$ est *anti-hermitienne*. On préfère alors définir l'opérateur *hamiltonien* $[H] = i \hbar [A]$, où $\hbar = h/2\pi$ est la constante de Planck réduite et $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$ J.s la constante de Planck. Les coefficients du hamiltonien sont donc homogènes à une énergie et l'équation-pilote de l'évolution s'écrit :

$$\frac{d[C]}{dt} = \frac{1}{i \hbar} [H] [C] \quad (26)$$

Avec $H_{jk} = i \hbar a_{jk}$ on a :

$$H_{jk}^* = (-i) \hbar a_{jk}^* = (-i) \hbar (-a_{kj}) = i \hbar a_{kj} = H_{kj}$$

de telle sorte que le hamiltonien $[H]$ est *hermitien*. Ses valeurs propres E_r sont donc réelles, homogènes à des énergies, et nous noterons $[C]_r$ les vecteurs propres correspondants.

Pour cette structure déterministe, linéaire et autonome, nous pouvons utiliser directement le résultat (4) en remarquant que $[A]$ et $[H]$ ont les mêmes vecteurs-propres, et que les valeurs propres de $[A]$ sont égales à $\lambda_r = E_r/i \hbar = -i E_r/\hbar$:

$$[C(t)] = \sum_r d_r \exp(\lambda_r t) [C]_r = \sum_r d_r \exp(-i E_r t/\hbar) [C]_r \quad (27)$$

Soit une solution particulière $\exp(-i E_r t/\hbar) [C]_r$ associée à un vecteur propre du hamiltonien. Alors, toutes les composantes $c_j(t)$ de cet état sont proportionnelles à $\exp(-i E_r t/\hbar)$ de telle sorte que la probabilité $p_j = c_j c_j^*$ d'être dans l'état ψ_j est proportionnelle à $\exp(-i E_r t/\hbar) \exp(+i E_r t/\hbar)$ c'est-à-dire *indépendante du temps* : on dit que *les états propres du hamiltonien sont des états stationnaires*.

5.2. Cas d'un système à deux états

Considérons par exemple la molécule d'ammoniac NH_3 dont la structure est pyramidale. En se restreignant à considérer seulement la position du noyau d'azote par rapport au plan des trois noyaux d'hydrogène, il existe deux états possibles, qui se distinguent par l'orientation de leur moment dipolaire électrique $\vec{\mu}$ (cf. figure 5).

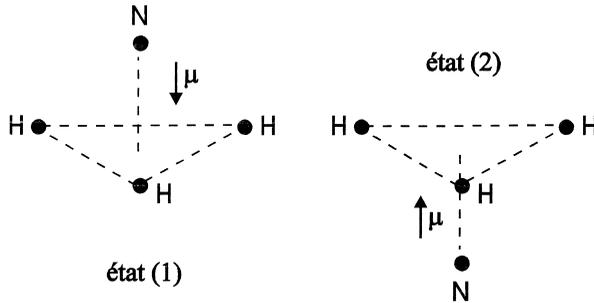


Figure 5

On adopte de façon naturelle ces états comme états de référence ψ_1 et ψ_2 . Il reste à construire la matrice $[H]$ en remarquant que :

- $[H]$ est hermitienne, donc H_{11} et H_{22} sont réels $H_{12}^* = H_{21}$;
- les deux états s'échangeant par une simple symétrie(7) par rapport au plan, la matrice $[H]$ doit être inchangée par la permutation des indices 1 et 2, de telle sorte qu'on doit avoir $H_{11} = H_{22}$ et $H_{12} = H_{21}$. Donc $H_{12}^* = H_{21}$ (matrice hermitienne) et $H_{21} = H_{12}$ (matrice symétrique), de telle sorte que finalement $H_{12}^* = H_{12}$: tous les coefficients de $[H]$ sont réels. En posant $H_{12} = H_{21} = -A$ et $H_{11} = H_{22} = E_0$, on obtient :

$$[H] = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix}$$

Les valeurs propres de $[H]$ sont solutions de :

$$\begin{vmatrix} E_0 - \lambda & -A \\ -A & E_0 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad \text{soit} \quad (E_0 - \lambda)^2 - A^2 = 0 \quad \text{puis} \quad \lambda = E_0 \pm A$$

En poursuivant la recherche des vecteurs propres et en s'appuyant sur la relation (27), on obtient (cf. [11]) l'expression des composantes de $[C(t)]$:

$$\begin{cases} c_1(t) = b \exp\left(-i(E_0 - A)t/\hbar\right) + a \exp\left(-i(E_0 + A)t/\hbar\right) \\ c_2(t) = -b \exp\left(-i(E_0 - A)t/\hbar\right) + a \exp\left(-i(E_0 + A)t/\hbar\right) \end{cases}$$

où a et b sont deux nombres complexes déterminés par les conditions initiales. Par exemple, si initialement le système est dans l'état ψ_1 , on a $c_1(0) = 1$ et $c_2(0) = 0$, ce qui conduit à $a = b = 1/2$. Dans ce cas les expressions se simplifient en :

$$\begin{cases} c_1(t) = \exp(-iE_0t/\hbar) \cos(At/\hbar) \\ c_2(t) = \exp(-iE_0t/\hbar) \sin(At/\hbar) \end{cases}$$

D'où les probabilités d'être dans l'état ψ_1 ou dans l'état ψ_2 :

$$p_1(t) = \cos^2(At/\hbar) \quad \text{et} \quad p_2(t) = \sin^2(At/\hbar)$$

et on vérifie que $p_1(t) + p_2(t) = 1$.

Lorsque $A = 0$, on a $p_1(t) = 1$ à tout instant : ceci se comprend bien car dans ce cas, l'état ψ_1 est un vecteur propre du hamiltonien, d'énergie E_0 , et donc un état *stationnaire*. Il en est de même pour l'état ψ_2 avec d'ailleurs la même énergie E_0 . Dans ce cas, quelles que soient les conditions initiales, les probabilités $p_1(t)$ et $p_2(t)$ sont indépendantes du temps.

Lorsque $A \neq 0$, les états propres correspondent à des énergies $E_0 \pm A$. Cette *levée de la dégénérescence* en énergie des états propres du hamiltonien est directement liée au terme de couplage A : *c'est un effet purement quantique, incompréhensible en mécanique classique*. En remarquant qu'une des énergies $E_0 \pm A$ est inférieure à E_0 , on voit que le couplage stabilise l'état fondamental du système. Cette propriété joue un rôle essentiel dans la compréhension de la liaison chimique entre deux atomes.

Il est remarquable en outre que les probabilités soient des fonctions oscillantes du temps : ce *hasard oscillant* est très différent du *hasard irréversible* obtenu en mécanique statistique : alors que dans un cas les probabilités tendent vers une valeur limite en respectant la monotonie de la fonction H de Boltzmann, dans l'autre cas les probabilités sont périodiques. Cette différence de comportement est liée à la signification de l'état $[C]$, différente dans les deux cas : les probabilités mesurant le

hasard sont directement les composantes de [C] en mécanique statistique, alors que ce sont des formes quadratiques des composantes de [C] en mécanique quantique.

On retrouve d'autre part la relation de Bohr entre la fréquence :

$$\nu = 2A/2\pi \hbar = 2A/h$$

des fonctions $p_j(t)$ et l'écart énergétique :

$$\Delta E = (E_0 + A) - (E_0 - A) = 2A$$

entre les deux états propres du hamiltonien :

$$\Delta E = h \nu$$

Expérimentalement, les vibrations de la molécule associées aux oscillations des probabilités $p_j(t)$ permettent l'absorption et l'émission d'un rayonnement électromagnétique de fréquence ν . Dans le cas de la molécule d'ammoniac, il s'agit d'un rayonnement de longueur d'onde $\lambda = 1,25$ cm (domaine des micro-ondes), de fréquence $\nu = c/\lambda = 24$ GHz, ce qui correspond à une différence d'énergie $2A \approx 10^{-4}$ eV.

Dans le cadre que nous nous sommes fixé, les probabilités $p_j(t)$ sont nécessairement oscillantes, car les valeurs propres du hamiltonien sont réelles, et donc les valeurs propres de [A] sont imaginaires pures⁽⁸⁾. Notons toutefois, que tout cela est dû à la contrainte (25) qui impose le caractère hermitien de [H]. Examinons le cas d'un hamiltonien a priori quelconque, dont les valeurs propres ne sont donc pas nécessairement réelles. Pour un système à deux états, on peut noter ces valeurs propres $\lambda' = \alpha' + i\beta'$ et $\lambda'' = \alpha'' + i\beta''$. En supposant pour simplifier que les vecteurs propres correspondants sont les vecteurs $\psi_1 \pm \psi_2$ et en suivant la même démarche que pour la molécule NH_3 avec la condition initiale $c_1(0) = 1$, on obtient aisément [C(t)] puis les probabilités $p_1(t) = c_1 c_1^*$ et $p_2(t) = c_2 c_2^*$ pour la condition initiale $c_1(0) = 1$:

$$\begin{cases} c_1(t) = \frac{1}{2} \exp(-i(\alpha' + i\beta')t/\hbar) + \frac{1}{2} \exp(-i(\alpha'' + i\beta'')t/\hbar) \\ c_2(t) = -\frac{1}{2} \exp(-i(\alpha' + i\beta')t/\hbar) + \frac{1}{2} \exp(-i(\alpha'' + i\beta'')t/\hbar) \end{cases}$$

$$\begin{cases} p_1(t) = \frac{1}{4} \left[\exp(-i(\alpha' + i\beta')t/\hbar) + \exp(-i(\alpha'' + i\beta'')t/\hbar) \right] \left[\exp(+i(\alpha' - i\beta')t/\hbar) + \exp(+i(\alpha'' - i\beta'')t/\hbar) \right] \\ p_2(t) = \frac{1}{4} \left[-\exp(-i(\alpha' + i\beta')t/\hbar) + \exp(-i(\alpha'' + i\beta'')t/\hbar) \right] \left[-\exp(+i(\alpha' - i\beta')t/\hbar) + \exp(+i(\alpha'' - i\beta'')t/\hbar) \right] \end{cases}$$

Puis :

$$\begin{cases} p_1(t) = \frac{1}{4} \left[\exp(2\beta' t/\hbar) + \exp(2\beta'' t/\hbar) + 2 \exp\left((\beta' + \beta'') t/\hbar\right) \cos\left((\alpha'' - \alpha') t/\hbar\right) \right] \\ p_2(t) = \frac{1}{4} \left[\exp(2\beta' t/\hbar) + \exp(2\beta'' t/\hbar) - 2 \exp\left((\beta' + \beta'') t/\hbar\right) \cos\left((\alpha'' - \alpha') t/\hbar\right) \right] \end{cases}$$

Les probabilités obtenues doivent rester bornées, ce qui impose $\beta' \leq 0$ et $\beta'' \leq 0$ ⁽⁹⁾. Les probabilités sont alors *pseudo-oscillantes*. L'élément le plus intéressant dans le cadre de notre exposé est la valeur de la somme des probabilités :

$$p_1(t) + p_2(t) = \frac{1}{2} \left[\exp(2\beta' t/\hbar) + \exp(2\beta'' t/\hbar) \right]$$

Ainsi, la somme des probabilités est inférieure à 1 ce qui signifie qu'une part de l'avenir du système n'est pas décrite par les deux états ψ_1 et ψ_2 : nous retrouvons ici le fait que le caractère non-hermitien est incompatible avec la conservation de la probabilité totale (25).

De plus, la probabilité $p_1(t) + p_2(t)$ d'être dans l'un des deux états ψ_1 ou ψ_2 diminue exponentiellement, sans osciller. On pense alors naturellement à la description d'une particule susceptible de se désintégrer.

Le cas particulier $\beta' = 0$, $\beta'' = -\hbar \Gamma/2$ avec $\Gamma > 0$, convient par exemple pour décrire le comportement du méson neutre K (cf. [12]). Les états $\psi_1(K)$ et $\psi_2(\bar{K})$ décrivent des antiparticules qui diffèrent par leur nombre quantique S (étrangeté) : $S = +1$ pour le K et $S = -1$ pour le \bar{K} . Une interaction faible, qui ne conserve pas l'étrangeté, permet à ces particules de se transformer l'une en l'autre. Le modèle ci-dessus fournit alors, pour un état initial K, les probabilités $p_1(t)$ (respectivement $p_2(t)$) d'observer un K (respectivement un \bar{K}) à l'instant t :

$$\begin{cases} p_1(t) = \frac{1}{4} \left[1 + \exp(-\Gamma t) + 2 \exp(-\Gamma t/2) \cos\left((\alpha'' - \alpha') t/\hbar\right) \right] \\ p_2(t) = \frac{1}{4} \left[1 + \exp(-\Gamma t) - 2 \exp(-\Gamma t/2) \cos\left((\alpha'' - \alpha') t/\hbar\right) \right] \end{cases}$$

Les termes exponentiels traduisent une désintégration de constante de temps $\tau \approx 1/\Gamma \approx 10^{-10}$ s. Ainsi, le kaon évolue à la fois en changeant d'identité ($K \leftrightarrow \bar{K}$) et en se désintégrant ($p_1 + p_2 < 1$) : la physique rejoint ici la fiction et prévoit l'espérance de vie d'une sorte de «Doctor Jekyll» et «Mister Hyde».

BIBLIOGRAPHIE

- [1] L. BACHELIER : «*Le jeu, la chance et le hasard*», (1914), Éditions J. Gabay.
- [2] LAPLACE : «*Essai philosophique sur les probabilités*», (1814).
- [3] I. PRIGOGINE : «*La fin des certitudes*», Odile Jacob (1996).
- [4] LASKAR : «*Le chaos dans le système solaire*», La Recherche n° 232 et Pour La Science, hors-série (dossier sur le chaos, janvier 1995).
- [5] H. GIÉ et J.-P. SARMANT : «*Le portrait de phase des oscillateurs*», BUP n° 744.
- [6] P. BERGÉ, Y. POMEAU et CH. VIDAL : «*L'ordre dans le chaos*», Éditions Hermann.
- [7] D. RUELLE : «*Hasard et chaos*», Odile Jacob.
- [8] P. BERGÉ, Y. POMEAU et M. DUBOIS-GANCE : «*Des rythmes au chaos*», Odile Jacob (1994).
- [9] J.-M. VIGOUREUX : «*Introduction à l'étude des systèmes non linéaires*», BUP n° 722.
- [10] B. DIU, C. GUTHMANN, D. LEDERER et B. ROULET : «*Physique statistique*», Éditions Hermann.
- [11] R. FEYNMANN : «*Lectures on Physics*», tome III, Addison-Wesley ou «*Mécanique Quantique*», InterÉditions.
- [12] CHENG et O'NEIL : «*Elementary Particles*», p. 188, Addison-Wesley (1979).

NOTES

- (1) Pour plus de détails sur le comportement des oscillateurs dans l'espace des phases, voir [5].
- (2) L'état macroscopique d'un gaz est par exemple décrit par la température et la pression.
- (3) Ici, ce sont en fait les états propres de l'opérateur hamiltonien [H] (cf. § 5.1.).
- (4) On peut vérifier aisément (cf. [10]) que, compte tenu de la relation (12), l'équation pilote impose la propriété $\sum_i dp_i/dt = 0$; cette propriété est indispensable car on l'obtient en dérivant la condition de normalisation $\sum_i p_i(t) = 1$ qui doit être valable à tout instant.
- (5) La physique «préquantique» peut s'avérer utile : par exemple dans l'étude de la molécule de benzène, il convient d'identifier les deux états de référence ψ_1 et ψ_2 aux deux «formules» de Kékulé.

- (6) Le postulat concernant la mesure en mécanique quantique impose plus précisément le choix des états de référence ψ_j comme états propres de l'opérateur $[M]$ associé à la grandeur mesurée. Il faudrait dire, de manière plus précise ici, que la probabilité p_j est la probabilité que la mesure donne la valeur propre λ_j de $[M]$; c'est en ce sens qu'il faut comprendre que p_j est la probabilité d'«être» dans l'état ψ_j .
- (7) Cette symétrie serait brisée en présence d'un champ électrique extérieur, du fait que les moments dipolaires électriques $\vec{\mu}_1$ et $\vec{\mu}_2$ sont opposés.
- (8) Une situation analogue en mécanique classique serait celle d'un oscillateur harmonique spatial non amorti *non isotrope* : l'état du système serait alors la superposition de trois oscillations de fréquences différentes. En mécanique quantique, un nouvel effet s'ajoute car les probabilités sont des fonctions quadratiques de la fonction d'état : il y a alors un effet de mélange des fréquences décrit par la formule de Bohr $h\nu = E'' - E'$ soit $\nu = \nu'' - \nu'$. Cet effet est familier en électronique des circuits non linéaires et utilisé par exemple pour la mesure d'un faible écart de fréquences dû à l'effet Doppler.
- (9) On retrouve bien sûr le cas de la molécule NH_3 en prenant $\beta' = \beta'' = 0$, $\alpha' = E_0 - A$ et $\alpha'' = E_0 + A$.