Graphes quantiques et combinatoire

Marie-Line Chabanol (d'après Schanz et Smilansky)

20 janvier 2009

Un graphe avec une métrique...

Définition

Un graphe quantique est un graphe non orienté tel que à chaque arête a est associée une longueur l_a .

On supposera que les longueurs sont incommensurables.

Notations

- A : le nombre d'arêtes du graphe.
- v_i : le degré du sommet i.
- (i,j) l'arête orientée de i à j ; $\overline{(i,j)} = (j,i)$.
- $x_{(i,j)}$ la coordonnée naturellement associée à (i,j) : $x_{(i,j)}(0) = i$, $x_{(i,j)}(l_{(i,j)}) = j$. $x_{\bar{a}} = l_a - x_a$.

et le laplacien Δ...

On cherche les valeurs propres (niveaux d'énergie) du laplacien sur le graphe.

On cherche à caractériser les réels k tels qu'il existe des fonctions Φ définies sur toutes les arêtes (donc A fonctions Φ_a) et vérifiant sur chaque arête

$$-\Delta\Phi_a(x_a) = -\Phi_a''(x_a) = k\Phi_a(x_a)$$

On doit imposer des “conditions aux bords”. Par exemple, les conditions de Neumann :

- Φ_a est bien définie en chaque sommet : $\Phi_{(i,j)}(0) = \Phi_{(i,j')}(0)$.
- Pour tout sommet i, $\sum_{j \text{ voisin } i} \Phi'_{(i,j)}(0) = 0$.

Remarque : $k = 0$ est alors toujours valeur propre.

Généralisations possibles : on peut prendre un opérateur de Schrödinger plus général que le laplacien, avec champ magnétique : cela reviendra à avoir $l_a \neq l_{\bar{a}}$.

On peut aussi prendre d'autres conditions que les conditions de Neumann.

L'équation séculaire

Sur chaque arête, on a donc $\Phi_a(x) = c_a e^{ikx} + d_a e^{-ikx}$ (une onde dans chaque sens). On a donc $2A$ inconnues. On a aussi, grâce aux conditions aux bords, $2A$ équations linéaires sur ces inconnues.

Théorème

k est valeur propre du laplacien avec conditions de Neumann si et seulement si k est solution de $\det(I - S(k)) = 0$, où $S(k)$ est la matrice $2A \times 2A$ définie par $S_{(i,j),(l,m)} = \delta_{jl} e^{ikl_{ij}} (\frac{2}{v_j} - \delta_{im})$.

Généralisation

On considèrera plus généralement des matrices S telles que $S_{(i,j),(l,m)} = \delta_{jl} e^{ikl_{(i,j)}} \sigma_{(i,j),(l,m)}$ où les longueurs peuvent dépendre du sens de l'arête, et où σ est une matrice unitaire, indépendante des longueurs.

Dans tous les cas, S est une matrice unitaire : ses valeurs propres sont de la forme $e^{i\theta_l}$.

Exemple : graphe étoile à 3 arêtes

$$S_{(i,j),(l,m)} = \delta_{jl} e^{ikl_{ij}} \left(\frac{2}{v_j} - \delta_{im}\right)$$

$$S = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & e^{ikl_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{ikl_2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{ikl_3} \\ \frac{-1}{3} e^{ikl_1} & \frac{2}{3} e^{ikl_1} & \frac{2}{3} e^{ikl_1} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3} e^{ikl_2} & \frac{-1}{3} e^{ikl_2} & \frac{2}{3} e^{ikl_2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3} e^{ikl_3} & \frac{2}{3} e^{ikl_3} & \frac{-1}{3} e^{ikl_3} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

La formule de trace

On va s'intéresser à la répartition des valeurs propres de S : on considère dans un premier temps

$$d(\theta) = \sum_{l=1}^{2A} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(\theta - \theta_l + 2\pi n)$$

$\int_I d(\theta)$ compte donc le nombre de valeurs propres $e^{i\theta_l}$ dont l'argument θ_l (ou l'un de ses translatés modulo 2π) est dans I. En particulier $\int_{[0,2\pi]} d(\theta) = 2A$.

Théorème (Formule de trace)

$$\begin{aligned} d(\theta) &= \frac{2A}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} Tr(S^n) e^{-in\theta} + c.c. \\ &= \frac{2A}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-in\theta} \sum_{p \text{ orb. pér. } n} e^{ikl_p} \prod_{i=1}^{n} \sigma_{p_i, p_{i+1}} + c.c. \end{aligned}$$

Interlude : qu'est-ce qu'une formule de trace ?

Exemples de formules de trace bien connues

- $\sum_{i=1}^{n} \lambda_i = \sum_{i=1}^{n} A_{ii}$.
- $\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^k = \sum_{p \text{ per. k}} \prod_{i=1}^{k} A_{p_i, p_{i+1}}$

Une formule de trace relie des objets qui peuvent paraître appartenir à des mondes assez différents :

- en géométrie, des valeurs propres d'opérateurs (comme le laplacien sur une surface), et des sommes sur des géodésiques périodiques ;
- en mécanique semi-classique, des statistiques sur les niveaux d'énergie, et des sommes sur les trajectoires périodiques du système classique correspondant
- en théorie des nombres, les zéros de ζ, et les nombres premiers.

Bien souvent la série dans le terme de droite ne converge pas. Ici, il y a convergence, et on peut espérer expliquer des phénomènes comme l'universalité de la statistique “valeur propre de matrice

Le facteur de forme

On va considérer que les longueurs sont aléatoires, indépendantes, et faire des moyennes dessus (notées $\langle\rangle$). Plus précisément, les l_a seront uniformes sur $[0, \frac{2\pi}{k}]$. Cela revient en fait au même que de faire des moyennes sur k...

Définition (Fonction de corrélation à deux points)

$$R_2(r) = \langle \frac{\pi}{2A} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta d(\theta) d(\theta - r\frac{\pi}{A}) \rangle - A$$

R_2 est (presque) la densité de probabilité des écarts des valeurs propres.
On a donc une somme sur des couples d'orbites périodiques. La moyennisation sur les longueurs des arêtes va avoir pour effet dans les termes $e^{ikl_p} e^{-ikl_{p'}}$ d'imposer $l_p = l_{p'}$, c'est-à-dire de sélectionner les paires d'orbites périodiques de même longueur, donc parcourant les mêmes arêtes.

Définition (Facteur de forme)

C'est la transformée de Fourier de la fonction de corrélation à deux points.

$$K(\tau) = \int R_2(r) \exp(2i\pi r\tau) dr$$

La formule importante

Après utilisation de la formule de trace et moyennisation sur les longueurs, on trouve finalement

$$K(\frac{n}{2A}) \quad = \quad \frac{1}{2A} \sum_{\text{cl. d'isométrie}} |\sum_{p \in \text{ cl}} \prod_{i=1}^{n} \sigma_{p_i, p_{i+1}}|^2$$

Utilisation de la formule : de la droite vers la gauche

$$K(\frac{n}{2A}) = \frac{1}{2A} \sum_{p,p' \text{ isométriques per. } n} \prod_{i=1}^{n} \sigma_{p_i,p_{i+1}} \overline{\sigma_{p'_i,p'_{i+1}}}$$

Ce que je sais raisonnablement calculer

Le cas du graphe étoile : si on se donne n_1, n_2, $\ldots n_A$, on peut énumérer les orbites périodiques passant n_i fois par l'arête i suivant leur nombre de retours en arrière.

On peut ainsi obtenir les fonctions de corrélations à deux et même à trois points, notamment dans la limite d'un grand graphe... et vérifier que ces graphes ne suivent pas la statistique "Matrice aléatoire".

Les calculs font intervenir le nombre de manières de placer des objets de différentes couleurs, avec un nombre prescrit de paquets.

Ce qu'on ne sait pas calculer et qui serait bien...

- Graphe complet, conditions Neumann :

$$K = \frac{1}{2A} \sum_{C \text{ cl isométrie } n} \left| \sum_{\nu} N_{\nu,C} \left(-1 + \frac{2}{v}\right)^{\nu} \left(\frac{2}{v}\right)^{n-\nu} \right|^2$$

  ν : nombre de retours en arrière ; $N_{\nu,C}$: nombre d'orbites de la classe C avec ν retours en arrière.
  Même pour K_3 ou K_4, on ne sait pas calculer $N_{\nu,C}$, ni même caractériser les classes non vides.

Mais encore...

On peut aussi profiter de la simplicité de ces modèles pour tester l'ergodicité quantique (c'est-à-dire la manière dont les fonctions propres deviennent -ou non- équidistribuées). Ainsi on arrive à prouver l'ergodicité quantique pour certaines familles de graphe (provenant d'applications ergodiques de l'intervalle sur lui-même), et à infirmer l'ergodicité quantique pour le graphe étoile.

De la gauche vers la droite : l'anneau

On considère un graphe formé d'un sommet et d'une boucle, dont la longueur est différente dans un sens et dans l'autre. On prend comme matrice $\sigma = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & i\frac{\sqrt{2}}{2} \\ i\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}$.

Les valeurs propres de S sont alors $\exp(i(k(\frac{l_1+l_2}{2})) \pm \lambda)$ où $\lambda = \arccos(\frac{\sqrt{2}}{2}\cos(\frac{k(l_1-l_2)}{2}))$.

On peut donc trouver comment sont répartis les écarts, et on obtient pour $n \neq 0$, si $m = E(n/2)$:

$$K(\frac{n}{2}) = 1 + \frac{(-1)^{m+n}}{2^{2m+1}}\binom{2m}{m}$$

Mais on peut aussi énumérer les orbites périodiques... En effet

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\text{cl. d'orb. per. n}} \left| \sum_{p \in cl} \frac{(-1)^s}{2^{n/2}} \right|^2$$

(s : le nombre de fois que l'orbite change de sens). Or une classe d'orbites périodiques isométriques est caractérisée par le nombre de fois qu'elle utilise un sens donné :

Question

Combien peut-on former de mots de n lettres avec n_1 1 et n_2 2, commençant par 1, et comportant s paquets de 2 ?

Mais on peut aussi énumérer les orbites périodiques... En effet

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\text{cl. d'orb. per. n}} \left| \sum_{p \in cl} \frac{(-1)^s}{2^{n/2}} \right|^2$$

(s : le nombre de fois que l'orbite change de sens). Or une classe d'orbites périodiques isométriques est caractérisée par le nombre de fois qu'elle utilise un sens donné :

Question

Combien peut-on former de mots de n lettres avec n_1 1 et n_2 2, commençant par 1, et comportant s paquets de 2 ?
Réponse : $\binom{n_1}{s}\binom{n_2-1}{s-1}$.

Mais on peut aussi énumérer les orbites périodiques... En effet

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\text{cl. d'orb. per. n}} \left| \sum_{p \in cl} \frac{(-1)^s}{2^{n/2}} \right|^2$$

(s : le nombre de fois que l'orbite change de sens). Or une classe d'orbites périodiques isométriques est caractérisée par le nombre de fois qu'elle utilise un sens donné :

Question

Combien peut-on former de mots de n lettres avec n_1 1 et n_2 2, commençant par 1, et comportant s paquets de 2 ?

Réponse : $\binom{n_1}{s}\binom{n_2-1}{s-1}$.

Finalement,

$$\begin{aligned} K\left(\frac{n}{2}\right) &= \frac{1}{2^n} + \frac{n^2}{2^{n+1}} \sum_{n_1=1}^{n} \left(\sum_{s \geq 1} \frac{(-1)^s}{s} \binom{n_1 - 1}{s-1} \binom{n - n_1 - 1}{s-1} \right)^2 \\ &= 1 + \frac{(-1)^{m+n}}{2^{2m+1}} \binom{2m}{m} \end{aligned}$$

Identités combinatoires

Donc

$$\frac{1}{2^n}+\frac{n^2}{2^{n+1}}\sum_{n_1=1}^{n}\left[\sum_{s\geq 1}\frac{(-1)^s}{s}\binom{n_1-1}{s-1}\binom{n-n_1-1}{s-1}\right]^2 = 1+\frac{(-1)^{m+n}}{2^{2m+1}}\binom{2m}{m}$$

En séparant les cas n pair ou impair, et en faisant intervenir les polynômes de Krawtchouk, on peut aussi écrire

$$2+\sum_{q=1}^{2m-1}\binom{2m-1}{2m-q}\left(\frac{2m}{q}P_{2m-1,2m-q}(q)\right)^2 = 2^{2m+1}+(-1)^m\binom{2m}{m}$$

$$2+\sum_{q=1}^{2m}\binom{2m}{2m+1-q}\left(\frac{2m+1}{q}P_{2m,2m+1-q}(q)\right)^2 = 2^{2m+2}-2(-1)^m\binom{2m}{m}$$

Conclusion

- Formule de trace exacte, comportement générique “Matrices aléatoires”.
- Expressions combinatoires : sommes sur des couples (ou des triplets, des quadruplets...) d'orbites parcourant le même ensemble d'arêtes.