FLOT HAMILTONIEN

Saïd KOUTANI

« *À toute transformation infinitésimale qui laisse invariante l'intégrale d'action correspond une grandeur qui se conserve* » **Théorème de Noether**

L'espace des phases : première approche

L'espace des phases est l'espace à 6N dimensions dans lequel évoluent les variables indépendantes q_i et p_i, avec $i = 1,...3N$ d'un système de N particules ayant donc 3N degrés de liberté.

THEOREME DE LIOUVILLE (Système non dissipatif)

C'est un théorème important de la mécanique analytique qui se trouve aussi à la base de la thermodynamique statistique, surtout pour ce qui est des ensembles microcanoniques et de l'hypothèse de la quasi-ergodicité. Ce théorème concerne l'évolution dans le temps des volumes dans l'espace des phases, sans considérer pour autant l'espace des états.

Soit à l'instant t_0 l'élément de volume $d\Omega_0$ entourant le point M_0 où la densité de phase est $D(M_0)$. A l'instant $t = t_0 + dt$, le point M_0 se trouve en M_t entouré de points dans un élément de volume $d\Omega_t$, avec une densité $D(M_t)$. Il évident que les points voisins de M_0, dont le nombre est dN, ont accompagné M_0 vers $d\Omega_t$. Car aucune trajectoire ne peut traverser la surface-enveloppe de l'élément de volume. Sinon deux conditions initiales, correspondant à deux points de l'espace des phases, conduiraient à la même solution située sur la surface. On peut donc écrire :

$$dN = D(M_0)\, d\Omega_0 = D(M_0) \prod_i dq_i dp_i$$

$$dN = D(M_t)\, d\Omega_t = D(M_t) \prod_i dq_i^T dp_i^T$$

Nous allons montrer que $d\Omega_t = d\Omega_0$, ce qui constitue une formulation du théorème de Liouville. Pour ce faire, considérons la transformation infinitésimale suivante, qui, de t_0 à $t = t_0 + dt$, fait passer le point M_0 en M_t :

$$q_i \xrightarrow{T} q_i^T = q_i + \frac{dq_i}{dt} dt$$

$$p_i \xrightarrow{T} p_i^T = p_i + \frac{dp_i}{dt} dt$$

avec $\prod_i dq_i^T dp_i^T = J \prod_i dq_i dp_i$, il suffit de montrer que le **jacobien** J de cette transformation est égale à 1. Sa matrice T se présentant sous la forme $(I + Mdt)$, où l'identité I et M sont des matrices d'ordre $6N$, son déterminant peut s'écrire :

$$J = 1 + J_1 dt + J_2 dt^2 + ... + J_{6N} dt^{6N}$$

où l'on reconnaît $J_1 = \mathrm{tr}M$ et $J_{6N} = \det M$. Au premier ordre en dt on a donc :

$$J = 1 + \mathrm{tr}M\, dt = 1 + \sum_i \left(\frac{\partial}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial}{\partial p_i} \frac{dp_i}{dt} \right) dt$$

Or les équations de Hamilton $\dot{q}_i = \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}$ et $\dot{p}_i = \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$ permettent de réécrire J sous la forme

$$J = 1 + \sum_i \left(\frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) dt.$$

Ce qui montre que $J = 1$.
On peut donc énoncer le théorème de Liouville :

Dans la mécanique hamiltonienne, le volume d'une région de l'espace des phases se conserve lors de l'évolution du système.

Notons au passage que ce théorème est en rapport étroit avec ***les invariants intégraux de Poincaré***

$$I_k = \int ... \int dq_1 dp_1 ... dq_k dp_k$$

Il résulte de l'équation $d\Omega_t = d\Omega_0$ que la densité de l'espace des phases ne dépend pas du temps :

$$D(M_t) = D(M_0) \text{ ou } D(q_i, p_i, t_0) = D(q_i^T, p_i^T, t_0 + dt)$$

Prenant maintenant une simple dérivée totale de D et écrivons qu'elle est nulle, tout en tenant compte des équations de Hamilton :

$$\frac{dD}{dt} = 0 = \frac{\partial D}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial D}{\partial p_i} \dot{p}_i = \frac{\partial D}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial D}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i}.$$

D'où l'équation de Liouville :

$$\frac{\partial D}{\partial t}+\left[D,H\right]=0,$$

où $\left[D,H\right]=\frac{\partial D}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial D}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}$ constitue le **crochet de Poisson**.

Remarques

1- L'équation de Liouville est basée sur l'idée des trajectoires voisines dans l'espace des phases, qui laissent les dN identiques entre deux instants voisins.
2- Ces dN représentent des probabilités de trouver le système avec des configurations en positions et en impulsions. A partir des dN on peut exprimer les probabilités de trouver le système, à t_0 et à t_0+dt, avec les configurations données par les volumes finis et les densités correspondantes :

$$P_{\Omega_0}=\int_{\Omega_0} Dd\Omega_0 \text{ à } t_0$$

$$P_{\Omega_t}=\int_{\Omega_t} Dd\Omega_t \text{ à } t_0+dt.$$

Le théorème de Liouville repose sur cette conservation de probabilité.

3- L'équilibre statistique correspond à $\frac{\partial D}{\partial t}=0$, c'est-à-dire $\left[D,H\right]=0$.

THEOREME DE LIOUVILLE-VON NEWMANN

La mécanique classique apparaît comme une limite de la mécanique quantique, lorsqu'on fait tendre la constante de Planck $\hbar$ vers 0. L'équation de Liouville devrait se présenter comme une limite de l'équation dite de Liouville-Von Newmann que nous allons établir.

Considérons l'équation de Schrödinger de seconde espèce :

$$i\hbar\frac{d}{dt}\left|\psi\right\rangle=\hat{H}\left|\psi\right\rangle \quad \text{ou} \quad -i\hbar\frac{d}{dt}\left\langle\psi\right|=\left\langle\psi\right|\hat{H}$$

L'opérateur densité est $\hat{D}=\left|\psi\right\rangle\left\langle\psi\right|$. Ce qui nous intéresse, comme dans le cas classique, c'est l'évolution dans le temps de cet opérateur. C'est-à-dire :

$$\frac{d\hat{D}}{dt}=\frac{d\left|\psi\right\rangle}{dt}\left\langle\psi\right|+\left|\psi\right\rangle\frac{d\left\langle\psi\right|}{dt}$$

Avec l'équation de Schrödinger cette dérivée s'écrit sous la forme

$$\frac{d\hat{D}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}|\psi\rangle\langle\psi| - \frac{1}{i\hbar}|\psi\rangle\langle\psi|\hat{H}$$

L'évolution dans le temps de l'opérateur densité est donc régie par l'équation, dite de Liouville-Von Newmann :

$$i\hbar\frac{d\hat{D}}{dt} = \hat{H}\hat{D} - \hat{D}\hat{H} = \left[\hat{H}, \hat{D}\right]$$

$\left[\hat{H}, \hat{D}\right]$ est **le *crochet de Lie***, dit commutateur des deux opérateurs $\hat{H}$ et $\hat{D}$.

Notons que d'une manière générale, une fonction F de la mécanique classique des variables q_i, p_i et t a une dérivée totale qui s'écrit :

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + [F, H],$$

équation qu'il faut comparer à l'équation générale d'un opérateur $\hat{F}$, dite équation de Heisenberg :

$$i\hbar\frac{d\hat{F}}{dt} = \left[\hat{F}, \hat{H}\right] + i\hbar\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}$$

On peut montrer que le commutateur $\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{F}, \hat{H}\right]$ tend vers le crochet de Poison $[F, H]$ dans la limite $\hbar \to 0$.

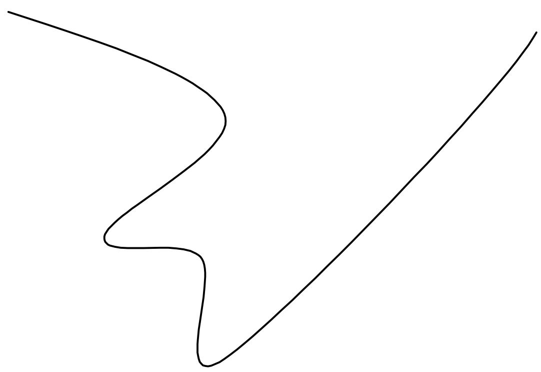
Espace des phases : seconde approche

VARIETES

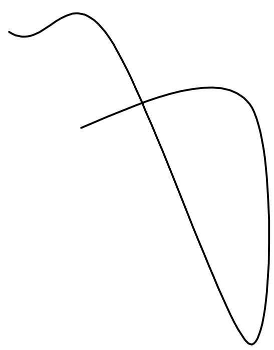
La géométrie différentielle étudie des espaces qu'on appelle des *variétés*. On peut introduire la géométrie différentielle d'une façon pas très rigoureuse dans le cadre de la géométrie affine. On peut considérer une variété de dimension *n* comme un espace qui, au voisinage immédiat de chaque point *x*, est un espace affine de dimension *n*. En fait, il faut oublier que la variété est plongée dans un espace affine, pour la cartographier localement et partout. Ce jeu de cartes définit un *atlas de la variété*.

Définition

Une variété différentielle V de dimension *n* et de classe C^2 est un espace topologique[1] muni d'une famille de cartes (U_i, x_i), appelée atlas. Les U_i sont des ouverts qui réalisent un recouvrement de la variété et les x_i sont des application homéomorphes de ces ouverts vers l'espace $\mathbb{R}^n$.



Cette courbe est une variété



Cette courbe n'est pas une variété

ESPACE TANGENT

Définition

Dans le cas général, l'espace tangent au point *x* de coordonnées locales $(x_1, x_2, ..., x_n)$, noté T_xW, est l'ensemble des applications φ en *x*, à valeurs dans $\mathbb{R}$, ayant des dérivées continues et qui vérifient les règles de linéarité et de Leibnitz.

[1] Cette définition peut être généralisée à des variétés de classe C^p avec $p > 2$

Un cas des applications qui nous intéresse est celui où φ est simplement la dérivée, en particulier par rapport au temps ; là un champ de vecteur V de T_xW est $V = \sum_i \dot{x}_i \frac{\partial}{\partial x_i}$.

On montre que T_xW est un espace vectoriel de dimension *n* et que pour tous les points *x* de la variété W, c'est-à-dire pour tous ouverts définissant les cartes de l'atlas, $TW = U_x \times T_xW$ est un espace vectoriel de dimension *2n*.

La famille $\left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, ..., \frac{\partial}{\partial x_n}\right)$ constitue une base de l'espace tangent pour la carte *x*. Tout vecteur *V* de cet espace s'écrit :

$$V = \sum_n v_i \frac{\partial}{\partial x_i}.$$

et agit comme un opérateur sur une fonction définie sur la variété, par exemple l'hamiltonien, en la dérivant. On a donc :

$$Vf = \sum_i v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} \equiv \frac{df}{dt}.$$

ESPACE COTANGENT

Définition

L'espace dual $T_x{*}W$ de T_xW s'appelle l'espace cotangent, c'est-à-dire l'espace des formes linéaires sur T_xW.

La famille $(dx_1, dx_2, ..., dx_n)$ constitue une base duale de la famille $\left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, ..., \frac{\partial}{\partial x_n}\right)$ qui est une base de T_xW. $T_x{*}W$ est en fait l'espace des différentielles des fonctions continûment dérivables en *x* :

$$d_x f = \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i$$

Comme pour l'espace tangent, on montre que $T_x{*}W$ est un espace vectoriel ayant la même dimension *n* que la variété *W*. De même, pour l'ensemble des cartes, $T{*}W = U_x \times T_x{*}W$ est un espace vectoriel de dimension *2n*.

Un champ de l'espace cotangent est une forme différentielle (1-forme) qui s'écrit :

$$\alpha = \alpha_1 dx_1 + \alpha_2 dx_2 + ... + \alpha_n dx_n$$

DUALITE

La dualité entre TW et T^*W permet d'établir des correspondances entre les applications de TW vers R et les champ 1-formes de T^*W, et entre les application de T^*W vers R et les champs de vecteurs de TW.

Mais, il n'existe pas, pour une variété, d'isomorphisme canonique entre l'espace tangent et l'espace cotangent. Toutefois, si on introduit une forme bilinéaire non dégénérée, l'isomorphisme entre ces deux espaces est assuré :

- pour les ***variétés riemanniennes***, cette forme bilinéaire est symétrique,
- pour les ***variétés symplectiques***, la forme bilinéaire est antisymétrique.

FORME DIFFERENTIELLE ANTISYMETRIQUE

Soit la forme différentielle $\alpha = \alpha_1 dx_1 + \alpha_2 dx_2 + \ldots + \alpha_n dx_n$. On introduit la différentielle extérieure de cette forme par

$$d\alpha = d\alpha_1 \wedge dx_1 + d\alpha_2 \wedge dx_2 + \ldots + d\alpha_n \wedge dx_n = \sum_i d\alpha_i \wedge dx_i$$
$$= \sum_j \left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x_j} \right) dx_j \wedge dx_1 + \ldots + \sum_j \left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x_j} \right) dx_j \wedge dx_n$$

Le produit extérieur étant antisymétrique, avec $dx_i \wedge dx_j = -dx_j \wedge dx_i$ pour $i \neq j$ et $dx_i \wedge dx_i = 0$, on a

$$d\alpha = \sum_{1 \le i \le j \le n} \left(\frac{\partial \alpha_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \alpha_j}{\partial x_i} \right) dx_i \wedge dx_j \,.$$

VARIETE SIMPLECTIQUE

Définition

Un espace vectoriel est dit symplectique s'il est muni d'une forme différentielle symplectique ω, fermée et non dégénérée. (2-Forme de Liouville)

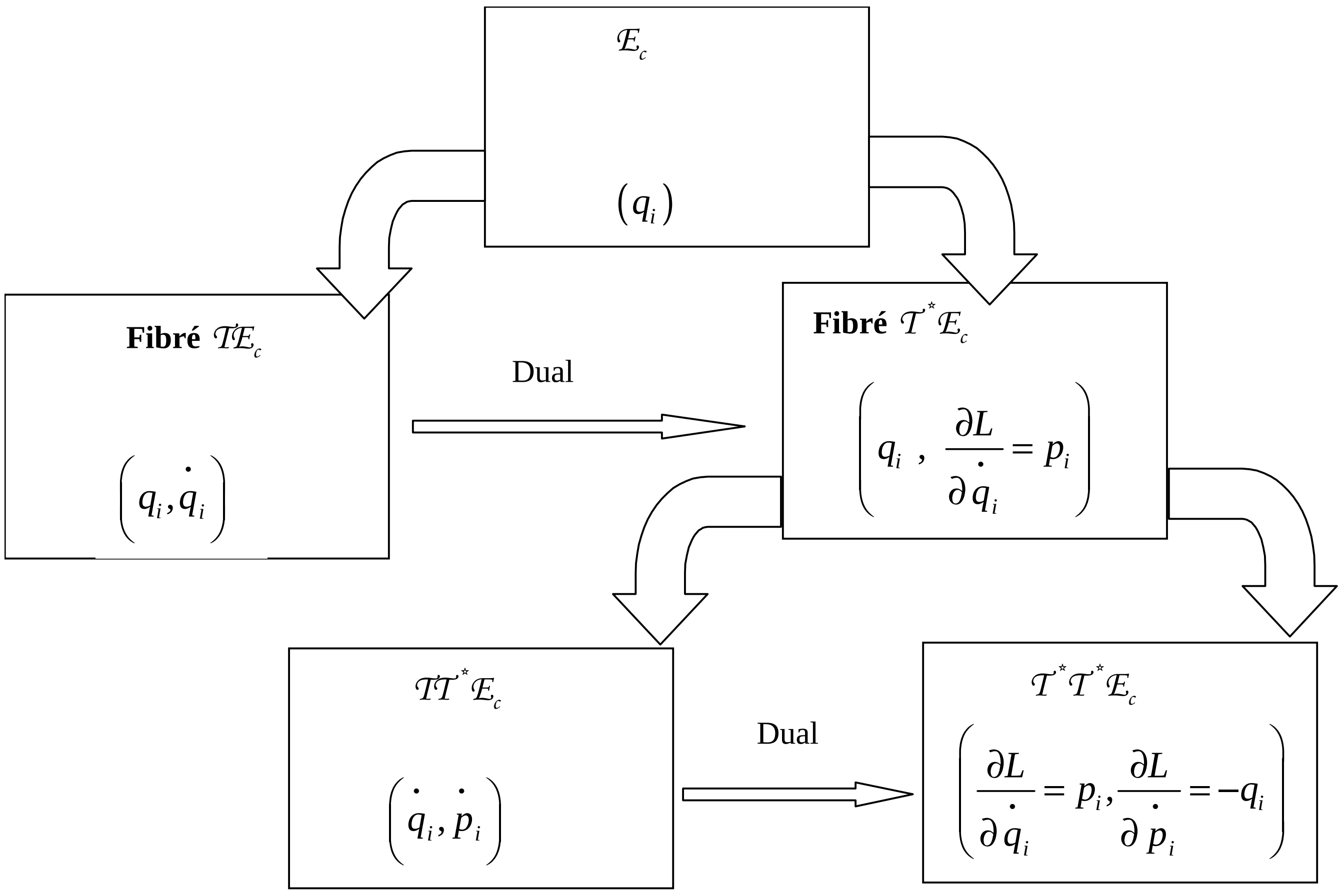
- la forme antisymétrique ω est fermée : $d\omega = d(d\alpha) = 0$.
- ω est non dégénérée :

DERIVEE DE LIE

Nécessite le choix d'un vecteur par rapport auquel on effectue la dérivation, contrairement à l'opérateur *d* de la définition précédente.

$$L_X f(x) = df_x\left(X(x)\right) = \sum_i X^i(x)\frac{\partial f}{\partial x^i}(x)$$

Formalisme symplectique



$$X_H = \sum_{k=1}^{2n}\left(a_k\frac{\partial}{\partial p_k} + b_k\frac{\partial}{\partial q_k}\right)$$

$$\omega = \sum_{i=1}^{n} dp_i \wedge dq_i$$

$$v = \sum_{k=1}^{2n}\left(\dot{p}\frac{\partial}{\partial p_k} + \dot{q}_k\frac{\partial}{\partial q_k}\right)$$

Les champs de vecteurs v et X_H sont des éléments de l'espace tangent $\mathcal{T}\mathcal{T}^*\mathcal{E}_c$. La 2-forme de Liouville ω, forme bilinéaire antisymétrique non dégénérée, agit sur ces éléments v et X_H et ses valeurs ? sont dans l'espace cotangent $\mathcal{T}^*\mathcal{T}^*\mathcal{E}_c$. Ce qui relie la différentielle de l'hamiltonien au *gradient symplectique* X_H. En Fait, avec la donnée de H et de la 2-forme de Liouville on construit une 1-forme de Liouville. Nous allons montrer que $\omega(X_H,v)=-dH(v)$:

$$\omega(X_H,v)=\sum_{i=1}^{n}\left\{dp_i(X_H)dq_i(v)-dp_i(v)dq_i(X_H)\right\}$$

$$dp_i(X_H)dq_i(v)=\sum_{k=1}^{n}\left(a_k dp_i\left(\frac{\partial}{\partial p_k}\right)+b_k dp_i\left(\frac{\partial}{\partial q_k}\right)\right)\left(\dot{p}_k\, dq_i\left(\frac{\partial}{\partial p_k}\right)+\dot{q}_k\, dq_i\left(\frac{\partial}{\partial q_k}\right)\right)$$
$$=a_k\,\dot{q}_k$$

$$dp_i(v)dq_i(X_H)=\sum_{k=1}^{n}\left(\dot{q}_k\, dp_i\left(\frac{\partial}{\partial q_k}\right)+\dot{p}_k\, dp_i\left(\frac{\partial}{\partial p_k}\right)\right)\left(a_k dq_i\left(\frac{\partial}{\partial p_k}\right)+b_k dq_i\left(\frac{\partial}{\partial q_k}\right)\right)$$
$$=b_k\,\dot{p}_k$$

Car les seuls termes non nuls sont les suivants, pour lesquels $i=k$:

$$dp_i\left(\frac{\partial}{\partial p_k}\right)=\frac{\partial p_k}{\partial p_k}=1$$

et

$$dq_i\left(\frac{\partial}{\partial q_k}\right)=\frac{\partial q_k}{\partial q_k}=1.$$

On a donc

$$\omega(X_H,v)=\sum_{k=1}^{n}\left(a_k\,\dot{q}_k-b_k\,\dot{p}_k\right),$$

expression qu'il faut identifier à

$$-dH(v)=-\left(\dot{p}_k\frac{\partial H}{\partial p_k}+\dot{q}_k\frac{\partial H}{\partial q_k}\right),$$

pour obtenir les composantes du ***champ hamiltonien*** ou ***gradient symplectique*** X_H :

$$a_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}$$
$$b_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}$$

On peut alors écrire :

$$X_H = \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial}{\partial q_k} - \frac{\partial H}{\partial q_k} \frac{\partial}{\partial p_k} \right)$$

Le gradient symplectique décrit en tant que champ de vecteurs des trajectoires dans l'espace des phases. C'est-à-dire qu'il engendre un flot, à l'image du vecteur vitesse de la mécanique des fluides dans le formalisme d'Euler. Ce flot, noté ξ_t^H , est représenté par :

$$\xi_t^H = \begin{pmatrix} \dot{q}_k \\ \dot{p}_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial p_k} \\ -\frac{\partial H}{\partial q_k} \end{pmatrix}$$

Ce qui correspond aux équations de Hamilton.

Notons que ce flot consiste en une transformation localement canonique, c'est-à-dire qu'il conserve la 2-forme de Liouville : $d\omega = 0$. Il conserve aussi la 2n-forme de Liouville :

$$\Omega = dq_1 \wedge dq_2 ... \wedge dq_n \wedge dp_1 \wedge dp_2 ... \wedge dp_n$$

Cette forme définit une orientation et une mesure dans l'espace des phases à *2n* dimensions. C'est l'élément de volume pour lequel nous allons montrer que

$$\frac{d\Omega}{dt} = 0 .$$

Incompressibilité du flot

On considère les trajectoires dans l'espace des phases comme un fluide en écoulement incompressible. On reprend donc le résultat de la mécanique des fluides :

$$\frac{d\Omega}{dt} = div\begin{pmatrix} \dot{q}_k \\ \dot{p}_k \end{pmatrix} = 0$$

C'est-à-dire :

$$\nabla . X_H = \frac{\partial}{\partial q_k}\frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial}{\partial p_k}\frac{\partial H}{\partial q_k},$$

Cette divergence du gradient symplectique, évidemment nulle, correspondant à l'incompressibilité du flot hamiltonien, montre aussi l'invariance de la 2n-forme de Liouville.

L'invariance $\frac{dD}{dt}$ de la densité D de l'espace des phase peut être considérée à partir de l'équation de continuité de la mécanique eulérienne :

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \begin{pmatrix} \dot{q}_k \\ \dot{p}_k \end{pmatrix} . \nabla D = 0 = \frac{\partial D}{\partial t} + X_H . \nabla D \quad \text{c'est-à-dire que} \quad \frac{dD}{dt} = 0$$

Ce qui correspond au résultat obtenu précédemment :

$$\frac{\partial D}{\partial t} + X_H . \nabla D = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial D}{\partial q_k} - \frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial D}{\partial p_k} = \frac{\partial D}{\partial t} + [H, D] = \frac{\partial D}{\partial t} + \sum_k \begin{vmatrix} \frac{\partial H}{\partial p_k} & \frac{\partial H}{\partial q_k} \\ \frac{\partial D}{\partial p_k} & \frac{\partial D}{\partial q_k} \end{vmatrix} = 0$$