

Chapitre 2 : Mécanique hamiltonienne

2.0 Transformée de Legendre : notions

2.1 Equations d'Hamilton et systèmes canoniques

2.2 Exemples de systèmes canoniques

2.3 Le principe variationnel d'Hamilton modifié

2.4 Transformations canoniques

2.5 Exemples de transformations canoniques

2.6 L'approche symplectique des transformations canoniques

2.7 Les crochets de Poisson

2.8. Formulation de la mécanique hamiltonienne dans le langage
des crochets de Poisson

2.9 Transformations canoniques infinitésimales et intégrales
premières

2.10 Le théorème de Liouville

2.11 La méthode d'Hamilton-Jacobi

2.12 Méthode de séparation des variables et exemples

Chapitre 2 : Mécanique hamiltonienne

2.0 Transformée de Legendre : notions

Considérons une fonction $L(v)$ de \mathcal{R} dans \mathcal{R} et notons $p = p(v) = dL/dv$ la pente de la tangente au graphique de L (Figure 2.1).

Si dp/dv ne s'annule pas dans le domaine d'intérêt, c'est-à-dire si la fonction L ne possède pas de point d'inflexion, la relation de définition de p peut être résolue par rapport à v et la fonction inverse de $p(v)$ existe, vu le théorème de la fonction inverse¹. On peut donc exprimer v en fonction de p : $v = v(p)$.

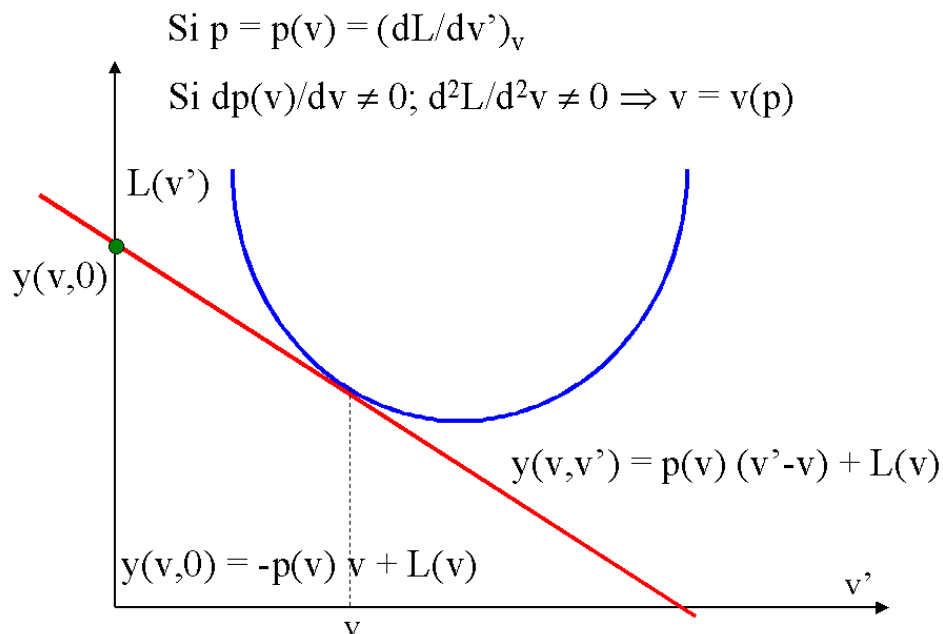


FIGURE 2.1 –

L'équation de la droite tangente au point $v' = v$ de L peut être écrite comme $y(v, v') = p(v)(v' - v) + L(v)$. Notons ensuite $y(v, 0)$ l'ordonnée du point d'intersection de la tangente à la courbe avec l'axe vertical du graphique ci-dessus. On a $y(v, 0) = -p(v)v + L(v)$.

1. Rappelons que le théorème de la fonction inverse affirme que toute fonction de \mathcal{R} dans \mathcal{R} strictement croissante (ou strictement décroissante) et continue (et donc, en particulier, toute fonction dont la dérivée ne s'annule pas) possède un inverse.

La transformée de Legendre $H(p)$ de $L(v)$ est alors définie comme la fonction qui à tout p associe $H(p) = -y(v, 0)$. Il vient donc :

$$\mathcal{L}_{v \rightarrow p}(L(v)) = H(p) = pv(p) - L(v(p))$$

Il est intéressant de remarquer que l'on peut retrouver la fonction de départ $L(v)$ en prenant la transformée de Legendre de $H(p)$. En effet, si on définit $u(p) = dH/dp$, on a, vu la définition de H

$$u = \frac{dH}{dp} = v(p) + p \frac{dv}{dp} - \frac{dL}{dv} \frac{dv}{dp} = v(p)$$

puisque $p = dL/dv$. On peut ensuite exprimer p en fonction de u car, vu les propriétés de la fonction inverse, on a

$$\frac{du}{dp} = \frac{dv}{dp} = \left(\frac{dp}{dv}\right)^{-1} \neq 0$$

puisqu'on a supposé ci-dessus que dp/dv ne s'annulait pas. Il vient donc

$$\mathcal{L}_{p \rightarrow v}(H(p)) = up - H = vp(v) - p(v)v + L = L$$

Remarquons aussi que la fonction $L(v)$ peut être reconstruite géométriquement à partir de $H(p)$. Dans un diagramme $L - v$, on peut en effet associer à tout p une droite de pente p et qui coupe l'axe vertical en $-H(p)$.

En laissant varier p , on engendre une famille de droites dont l'enveloppe n'est rien d'autre que le graphique de la fonction $L(v)$ initiale (voir Figure 2.2).

Les fonctions L et H sont donc d'une certaine manière équivalentes puisqu'elles peuvent se déduire l'une de l'autre. Dans le contexte de la physique, on peut donc considérer qu'elles contiennent la même information et qu'elles peuvent donc être utilisées indifféremment dans l'analyse d'un problème.

A titre d'exemple, on peut calculer la transformée de Legendre de $L(v) = (1/2)mv^2$. On a tout d'abord $p = dL/dv = mv$. Cette relation peut s'inverser puisque $dp/dv = m \neq 0$. On vérifie alors que $H(p) = p^2/(2m)$. On peut également s'assurer que $\mathcal{L}_{p \rightarrow v}(H(p)) = L(v)$.

Notons enfin que si la fonction L dépend de f variables v_i , sa transformée de Legendre peut s'obtenir en généralisant la démarche présentée ci-dessus. On définit tout d'abord les f variables $p_i = \partial L/\partial v_i$. Vu le théorème des fonctions implicites², ces relations de définition des p_i peuvent ensuite être inversées si la matrice

$$\frac{\partial p_i(v_k)}{\partial v_j} = \frac{\partial^2 L}{\partial v_i \partial v_j}$$

est non singulière. On exprime donc les v_i en fonction des p_j avant de construire la transformée de Legendre de L :

$$\mathcal{L}_{v_i \rightarrow p_j}(L(v_i)) = H(p_j) = p_k v_k(p_j) - L(v_i(p_j))$$

2. Ce théorème constitue en fait une généralisation du théorème de la fonction inverse

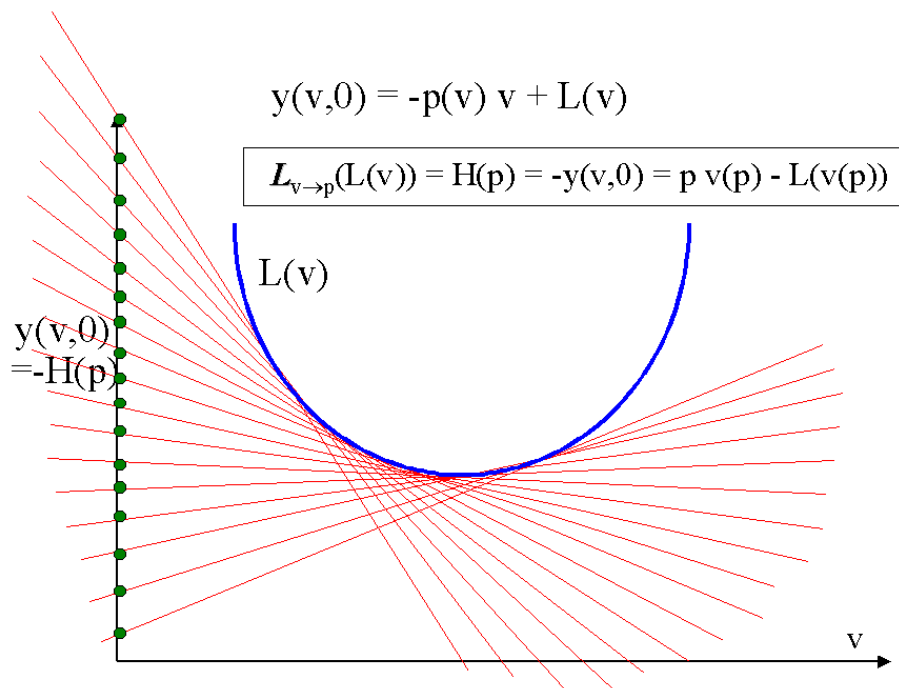


FIGURE 2.2 –

2.1 Equations d'Hamilton et systèmes canoniques

Comme nous l'avons vu au chapitre précédent, le lagrangien d'un système mécanique à f degrés de liberté dépend explicitement des f coordonnées généralisées q_1, \dots, q_f , de leurs dérivées temporelles et du temps. Les équations de Lagrange constituent des équations différentielles du second ordre en les fonctions inconnues $q_i(t)$. Le passage à $2f$ équations différentielles du premier ordre constitue le cœur de la formulation hamiltonienne de la dynamique des systèmes mécaniques.

Le procédé le plus élégant pour engendrer ce système d'équations différentielles du premier ordre (*les équations d'Hamilton*) équivalentes aux équations de Lagrange est d'appliquer au lagrangien la *transformation de Legendre* conduisant à un hamiltonien dépendant des variables indépendantes q_i, p_i et t . Rappelons la définition de l'*impulsion conjuguée* à la coordonnée q_i (cf. Eq. (1.60)).

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (i = 1, 2, \dots, f) \quad (2.1)$$

Si la condition suivante est vérifiée³

$$dtm \left(\frac{\partial p_i}{\partial \dot{q}_j} \right) = dtm \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} \right) \neq 0 \quad (2.3)$$

on peut exprimer les \dot{q}_i en fonction des p_j :

$$\dot{q}_i = \dot{q}_i(q, p, t) \quad (2.4)$$

et construire le hamiltonien

$$H(q, p, t) = \mathcal{L}_{\dot{q}_i \rightarrow p_i}(L(q, \dot{q}, t)) = p_i \dot{q}_i(q, p, t) - L(q, \dot{q}(q, p, t), t) \quad (2.5)$$

qui doit être considéré comme une fonction de q, p, t (et non comme une fonction de q, \dot{q}, t comme c'était le cas dans le cadre de la formulation lagrangienne de la mécanique). Remarquons que dans cette transformation de Legendre, les variables q_i et t doivent être considérées comme des variables "passives" qui n'interviennent nullement dans la transformation.

Dans l'expression de l'hamiltonien engendrée par la transformation de Legendre, c'est-à-dire

$$\overline{H(q, p, t) = \mathcal{L}L(q, p, t) = p_i \dot{q}_i(q, p, t) - L(q, \dot{q}(q, p, t), t)} \quad (2.6)$$

rappelons que la sommation est sous-entendue de 1 à f sur l'indice i répété dans le premier terme du membre de droite de l'équation (2.6). Comme nous l'avons mentionné précédemment, une application de la transformation de Legendre au hamiltonien rend le lagrangien original $L(q, \dot{q}, t)$.

A partir des relations (2.1), (2.3) et (2.6), il est à présent possible de formuler directement les équations du mouvement à partir du hamiltonien plutôt que, comme au chapitre précédent, à partir du lagrangien. En effet, en différenciant (2.6), il vient

$$dH = \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt = \dot{q}_i dp_i + p_i d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \quad (2.7)$$

En y substituant les expressions de $\frac{\partial L}{\partial q_i}$ et $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ données par les équations de Lagrange (1.28) et la relation (2.1) respectivement, l'expression (2.7) de dH devient :

$$dH = \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt = -\dot{p}_i dq_i + \dot{q}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \quad (2.8)$$

3. Comme le potentiel $V(q, \dot{q}, t)$ est en général tout au plus linéaire en les vitesses généralisées, la matrice $\partial^2 L / \partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j$ est définie positive, et donc non singulière, puisqu'elle s'écrit :

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} = \frac{\partial^2 (T - V)}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} = \frac{\partial^2 T}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} \quad (2.2)$$

où T est l'énergie cinétique.

En identifiant les coefficients de dq_i , dp_i et dt dans (2.8), on obtient :

$$\boxed{\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (i = 1, \dots, f)} \quad (2.9)$$

ainsi que (cf. (1.63)) :

$$\boxed{\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}} \quad (2.10)$$

Les équations (2.9) constituent les *équations d'Hamilton*. Suite à leur apparence symétrique (ou antisymétrique) par rapport à q et p , elles sont aussi connues sous le nom d'*équations canoniques* du mouvement. La description du mouvement à l'aide de ces équations est appelée *dynamique hamiltonienne*. La comparaison de l'équation (2.10) avec le premier groupe des équations canoniques (2.9) montre que H est lié à t par la même relation qui lie les q_i aux p_i ; autrement dit, on peut considérer H et t comme des variables conjuguées.

Notons que ces équations font appel au seul hamiltonien, supposé fonction des variables q , p et t . Elles constituent un système de $2f$ équations différentielles ordinaires du *premier ordre*, complètement équivalent au système des f équations différentielles du second ordre de Lagrange (pourvu que la condition (2.3) soit satisfaite). Remarquons que si une coordonnée q_i est cyclique (dans le contexte lagrangien), elle l'est également dans le cadre hamiltonien, en ce sens que le hamiltonien est indépendant de ce q_i . La seconde des équations (2.9) nous confirme alors que l'impulsion conjuguée est une constante du mouvement.

Quant à l'équation (2.10), elle exprime le fait que si le hamiltonien H (et donc le lagrangien L) ne dépend pas explicitement du temps, le hamiltonien est une constante des mouvements (cf. (1.63)). Nous savons aussi que si, en plus, les liaisons sont indépendantes du temps et s'il existe un potentiel V indépendant des vitesses généralisées, alors le hamiltonien conservé H s'écrit sous la forme $T + V$ et est identifié à l'énergie totale du système mécanique conservatif (cf. section (1.8)).

Nous définirons un *système canonique* comme un système mécanique qui admet un hamiltonien tel que les équations du mouvement prennent la forme (2.9). En fait, tout système lagrangien qui vérifie la condition (2.3) est canonique. Les $2f$ variables (q_i, p_i) sont dites *canoniques*, les coordonnées généralisées q_i étant appelées *coordonnées canoniques* et les p_i , *impulsions canoniques conjuguées aux q_i* .

L'espace à $2f$ dimensions sous-tendu par les variables canoniques (q_i, p_i) est appelé *espace de phase*. L'état dynamique complet d'un système à un instant quelconque est représenté par un point de l'espace de phase. Lorsque le temps s'écoule, ce point se déplace, décrivant une trajectoire unique. Il existe donc par chaque point de l'espace de phase une seule trajectoire⁴ et ainsi, deux

4. Cette propriété de l'espace des phases est fondamentale en mécanique statistique. Elle est à la base du théorème de Liouville (cf. section 2.10), l'un des deux théorèmes sur lesquels repose cette théorie.

trajectoires dans l'espace de phase ne se coupent jamais, ceci en vertu des théorèmes d'existence et d'unicité des solutions d'un système d'équations différentielles ordinaires du premier ordre. La collection complète des trajectoires de l'espace de phase (ou un sous-ensemble représentatif d'entre elles) fournit ce qu'on appelle un *portrait* de l'espace de phase. De tels portraits sont riches en informations, particulièrement dans le cas de systèmes à un seul degré de liberté, pour lesquels ils peuvent être aisément dessinés, fournissant ainsi une représentation picturale du comportement dynamique global de ces systèmes.

2.2 Exemples de systèmes canoniques

Nous allons illustrer les résultats de la section précédente à l'aide de quelques exemples instructifs.

Exemple 1 :

Considérons une particule de masse m contrainte à se déplacer sur la surface d'un cylindre d'équation $x^2 + y^2 = R^2$. La particule est soumise à une force dirigée vers l'origine et proportionnelle à la distance entre la particule et l'origine : $\vec{F} = -k\vec{r}$ (voir Figure 2.3).

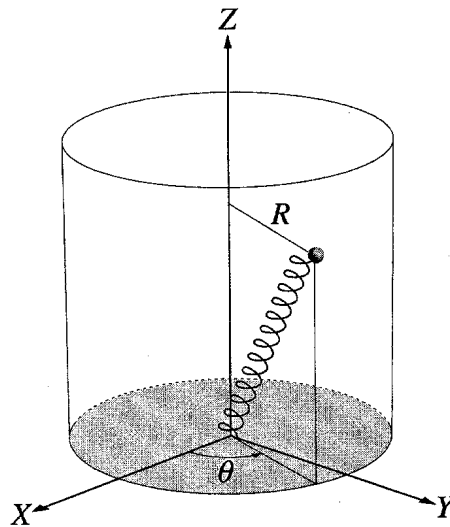


FIGURE 2.3 –

Choisissons comme coordonnées généralisées θ et z . Le potentiel correspondant à la force \vec{F} est donné par (r désigne la distance à l'origine et R est la coordonnée radiale cylindrique) :

$$V = \frac{1}{2}kr^2 = \frac{1}{2}k(x^2 + y^2 + z^2) = \frac{1}{2}k(R^2 + z^2)$$

Le carré de la vitesse de la particule en coordonnées cylindriques s'écrit :

$$v^2 = \dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2 = \dot{R}^2 + R^2\dot{\theta}^2 + \dot{z}^2$$

Compte tenu de $x = R \cos \theta$ et $y = R \sin \theta$ et de la contrainte $R = \text{constante}$, l'expression de l'énergie cinétique s'écrit alors :

$$T = \frac{1}{2}m (R^2\dot{\theta}^2 + \dot{z}^2)$$

si bien que le lagrangien prend la forme suivante :

$$L = T - V = \frac{1}{2}m(R^2\dot{\theta}^2 + \dot{z}^2) - \frac{1}{2}k(R^2 + z^2)$$

Les coordonnées généralisées étant θ et z , les impulsions conjuguées correspondantes sont données par (cf. (2.1)) :

$$\begin{cases} p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = mR^2\dot{\theta} \\ p_z = \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} = m\dot{z} \end{cases}$$

On vérifie que le déterminant de la matrice des dérivées secondes de L par rapport aux \dot{q}_i est bien différent de zéro. On a, en effet :

$$dtm \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} \right) = dtm \left(\frac{\partial^2 T}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} \right) = dtm \begin{pmatrix} mR^2 & 0 \\ 0 & m \end{pmatrix} = m^2 R^2 \neq 0$$

On peut donc exprimer les vitesses généralisées en termes des impulsions :

$$\dot{\theta} = \frac{p_\theta}{mR^2}, \quad \dot{z} = \frac{p_z}{m}$$

Nous sommes dans les conditions d'un système conservatif (liaison indépendante du temps, potentiel V indépendant des vitesses généralisées et du temps, lagrangien et donc hamiltonien ne dépendant pas explicitement du temps). Le hamiltonien H est donc identifié à l'énergie totale exprimée en termes de variables θ, p_θ, z et p_z et est une constante du mouvement. Vérifions-le :

$$\begin{aligned} H &= p_\theta \dot{\theta} + p_z \dot{z} - L = mR^2\dot{\theta}^2 + m\dot{z}^2 - \frac{1}{2}m(R^2\dot{\theta}^2 + \dot{z}^2) + \frac{1}{2}k(R^2 + z^2) \\ &= \frac{p_\theta^2}{2mR^2} + \frac{p_z^2}{2m} + \frac{1}{2}kz^2 + \frac{1}{2}kR^2 = T + V \end{aligned}$$

Nous choisissons pour le hamiltonien l'expression suivante où nous avons supprimé le terme constant $\frac{1}{2}kR^2$:

$$H(z, p_\theta, p_z) = \frac{p_\theta^2}{2mR^2} + \frac{p_z^2}{2m} + \frac{1}{2}kz^2$$

Les équations d'Hamilton s'écrivent alors :

$$\begin{aligned} \frac{d\theta}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p_\theta} = \frac{p_\theta}{mR^2} \\ \frac{dz}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p_z} = \frac{p_z}{m} \\ \frac{dp_\theta}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial \theta} = 0 \\ \frac{dp_z}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial z} = -kz \end{aligned}$$

La coordonnée θ étant *cyclique* (à la fois pour le lagrangien et le hamiltonien), l'impulsion p_θ est une constante :

$$p_\theta = mR^2\dot{\theta} = \text{constante}$$

Cette relation exprime la conservation de la composante z du moment cinétique par rapport à l'axe z , axe de symétrie du problème.

En combinant la deuxième et la quatrième équation canonique, on obtient pour z l'équation suivante, qui n'est autre que celle de l'oscillateur harmonique :

$$\ddot{z} + \omega_0^2 z = 0 \quad \text{avec} \quad \omega_0^2 = \frac{k}{m}$$

et qui permet donc de déterminer le mouvement de la particule dans la direction z .

Exemple 2 : La pendule plan

Ce problème a déjà été traité dans le cadre du formalisme lagrangien de la section (1.6) (exemple 1). Repartons de l'expression du lagrangien correspondant

$$L = \frac{1}{2}m\ell^2\dot{\theta}^2 + mg\ell \cos \theta$$

L'impulsion p_θ conjuguée à θ est donnée par

$$p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = m\ell^2\dot{\theta}$$

et représente la seule composante non nulle du moment cinétique de la masse m par rapport au point de support (ce moment est dirigé perpendiculairement au plan d'oscillation du pendule).

Le hamiltonien s'écrit :

$$H = p_\theta\dot{\theta} - L = \frac{1}{2}m\ell^2\dot{\theta}^2 - mg\ell \cos \theta = \frac{p_\theta^2}{2m\ell^2} - mg\ell \cos \theta$$

et représente physiquement l'énergie totale. Vu que le hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps, celui-ci constitue une *constante des mouvements*. Il s'agit de l'énergie totale du système que l'on désigne par E .

Quant aux équations canoniques, elles s'écrivent alors directement

$$\begin{aligned} \frac{d\theta}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p_\theta} = \frac{p_\theta}{m\ell^2} \\ \frac{dp_\theta}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial \theta} = -mg\ell \sin \theta \end{aligned}$$

Les trajectoires du système dans le plan de phase (θ, p_θ) sont donc définies par la relation paramétrique (E est le paramètre) :

$$\frac{p_\theta^2}{2m\ell^2} - mg\ell \cos \theta = E$$

Les trajectoires sont représentées sur les figures 2.4(a) et (b) pour différentes valeurs de l'énergie E . Sur la figure 2.4(a), $\theta = \pi$ et $\theta = -\pi$ représentent le même point physique, de sorte qu'on devrait imaginer cette figure roulée en un cylindre, les deux droites verticales en tirets étant identifiées. Ainsi, quand un point se déplaçant dans l'espace de phase "quitte" la figure 2.4(a) en un point $(\theta = \pm\pi, p_\theta)$, elle y "rentre" instantanément en $(\theta = \mp\pi, p_\theta)$. Une autre manière de procéder serait d'imaginer le diagramme de la figure 2.4(a) répété de manière continue dans la direction θ , comme sur la figure 2.4(b).

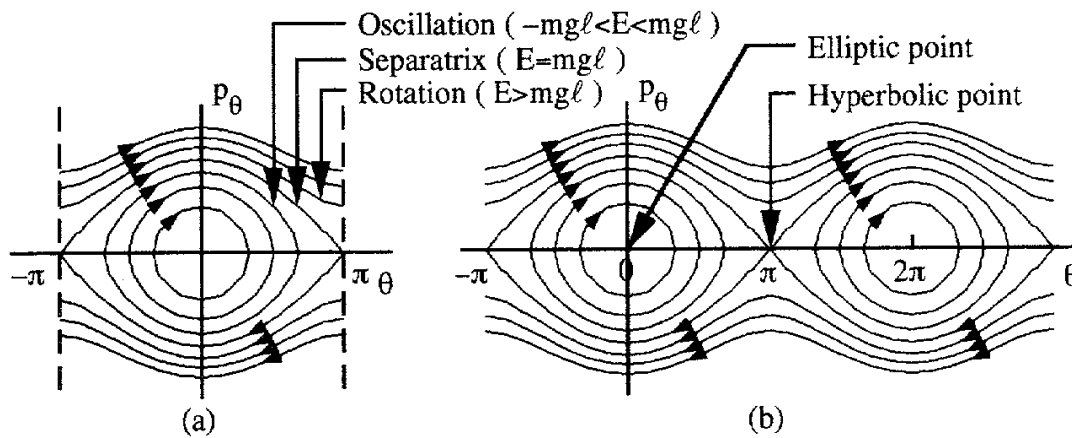


FIGURE 2.4 –

Montrons à présent comment ces figures, qui constituent diverses représentations du portrait de phase du pendule circulaire, peuvent être construites à partir de l'équation précédente.

Notons tout d'abord que la valeur minimale de E est $-mgl$; elle correspond au pendule en position verticale vers le bas ($\theta = 0$) et au repos ($p_\theta = 0$). Pour les faibles énergies, c'est-à-dire pour $0 < E + mgl \ll mgl$, θ et p_θ restent proches de $(0,0)$ et l'on peut alors développer $\cos \theta$ en série, ce qui permet de réécrire la relation précédente sous la forme suivante :

$$\frac{p_\theta^2}{2ml^2} + \frac{1}{2}mgl\theta^2 \simeq E + mgl$$

Les trajectoires correspondantes - c'est-à-dire à faible énergie - dans l'espace de phase sont des ellipses centrées sur $(0,0)$; elles sont associées aux mouvements oscillatoires harmoniques du pendule. Le point $(0,0)$ est parfois appelé "point elliptique" et représente un point d'équilibre stable, comme le diagramme le montre clairement.

Si l'énergie E augmente en restant inférieure à mgl , l'amplitude des mouvements croît et les oscillations perdent progressivement leur caractère harmonique; les trajectoires correspondantes dans l'espace des phases sont des courbes fermées centrées sur l'origine.

Lorsque $E = mgl$, le pendule atteint $\theta = \pi$ (avec $p_\theta = 0$). L'équation du pendule se réduit alors à

$$p_\theta = \pm 2m\ell\sqrt{g\ell} \cos(\theta/2)$$

Dans l'espace des phases, les deux branches de cosinus qui sont associées à cette valeur de l'énergie rendent compte du mouvement de limitation du pendule. Comme ces courbes constituent la frontière dans l'espace des phases entre les oscillations dont nous venons de parler et les rotations que nous allons décrire ci-dessous, elles portent le nom de *séparatrices* (en anglais, *separatrix* se traduit par *separatrix*). Lorsque la valeur de E dépasse mgl , le mouvement du pendule n'est plus oscillatoire, mais bien de type rotationnel, en ce sens que le pendule tourne complètement autour de son point de support. Le point $(\pm\pi, 0)$ est un point dit *hyperbolique* : il s'agit en fait d'un point d'équilibre instable, aussi solution de l'équation précédente. La figure 2.4(b) semble donner l'impression que la propriété mentionnée précédemment, à savoir que par un point donné de l'espace de phase, il ne peut passer qu'une seule trajectoire, soit violée en ce point. Il n'en est rien cependant car un agrandissement du voisinage du point $(\pm\pi, 0)$ montre que celui-ci est constitué des trajectoires représentées sur la figure 2.5 : le point lui-même, deux "extrémités" des séparatrices qui approchent le point asymptotiquement et donc ne l'atteindront jamais en un temps fini, et deux "extrémités" similaires qui s'en écartent. Les autres trajectoires voisines se présentent sous la forme d'hyperboles, comme on peut le voir en développant l'équation des trajectoires au voisinage du point $(\pm\pi, 0)$, avec comme résultat :

$$\frac{p_\theta^2}{2m\ell^2} - \frac{1}{2}mgl(\pm\pi - \theta)^2 \simeq E - mgl$$

Pour terminer ce paragraphe, mentionnons enfin que le sens de parcours des trajectoires dans l'espace des phases se détermine aisément en recherchant le signe de $dp_\theta/d\theta$.

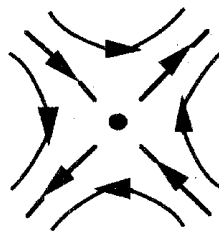


FIGURE 2.5 –

Exemple 3 : Le pendule sphérique

On montre aisément à partir de l'expression suivante du lagrangien pour le pendule sphérique :

$$L = \frac{1}{2}m\ell^2(\dot{\theta}^2 + \dot{\phi}^2 \sin^2 \theta) + mgl \cos \theta$$

que les équations canoniques s'écrivent comme suit :

$$\begin{aligned}\frac{d\theta}{dt} &= \frac{p_\theta}{m\ell^2} \\ \frac{d\phi}{dt} &= \frac{p_\phi}{m\ell^2 \sin^2 \theta} \\ \frac{dp_\theta}{dt} &= \frac{p_\phi^2 \cos \theta}{m\ell^2 \sin^2 \theta} - mg\ell \sin \theta \\ \frac{dp_\phi}{dt} &= 0\end{aligned}$$

On notera le caractère *cyclique* de la coordonnée ϕ , entraînant la constance le long du mouvement de l'impulsion conjuguée à ϕ , c'est-à-dire de p_ϕ .

Exemple 4 : La particule chargée en mouvement dans un champ électromagnétique

Partons de l'expression du lagrangien obtenue dans le cadre de l'étude Lagrangienne de ce problème (voir section 1.6, exemple 5), c'est-à-dire :

$$L = \frac{1}{2}mv^2 - e\phi + \frac{e}{c}\vec{A} \cdot \vec{v}$$

Les impulsions canoniques conjuguées aux x_i sont données par

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m\dot{x}_i + \frac{e}{c}A_i$$

Ces équations peuvent être résolues par rapport à \dot{x}_i :

$$\dot{x}_i = \frac{p_i}{m} - \frac{e}{mc}A_i$$

de sorte qu'on obtient pour le hamiltonien :

$$H = \frac{p_i}{m}(p_i - \frac{e}{c}A_i) - \frac{1}{2m}(p_i - \frac{e}{c}A_i)^2 + e\phi - \frac{e}{mc}(p_i - \frac{e}{c}A_i)A_i$$

c'est-à-dire, après simplification⁵ :

$$H(q, p, t) = \frac{1}{2m}(p_i - \frac{e}{c}A_i)^2 + e\phi(q, t)$$

Notons que ce hamiltonien, qui peut aussi s'écrire $T + e\phi$, n'est pas égal à la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle, et n'est pas constant en général. On peut toutefois montrer que H représente encore l'énergie totale du système. Par ailleurs, ce hamiltonien peut être déduit

5. Il est intéressant de souligner que ni le hamiltonien, ni les impulsions ne sont invariants dans un changement de jauge.

de celui pour la particule libre, $H = \frac{p_i^2}{2m}$, en y effectuant les substitutions suivantes : $H \rightarrow H + e\phi$ et $p_i \rightarrow p_i - \frac{e}{c}A_i$. Cette manière purement formelle mais rapide d'introduire l'interaction électromagnétique est fréquemment utilisée en théorie quantique.

Notons aussi la différence entre l'*impulsion cinématique* :

$$m\dot{x}_i = p_i - \frac{e}{c}A_i$$

et l'*impulsion canonique conjuguée* à q_i , c'est-à-dire p_i .

2.3 Le principe variationnel d'Hamilton modifié

Les équations canoniques du mouvement (2.9) peuvent aussi être déduites directement d'un principe variationnel, appelé *principe d'Hamilton modifié*. Nous savons que le lagrangien d'un système mécanique peut s'exprimer à partir de (2.6) comme suit :

$$L(q, \dot{q}(q, p, t), t) = p_i \dot{q}_i(q, p, t) - H(q, p, t) \quad (2.11)$$

Le principe d'Hamilton requérant le caractère extrémal de l'intégrale d'action (1.46) devient, après remplacement de L par son expression (2.11), le principe d'Hamilton modifié, caractérisé par l'exigence que la variation de l'intégrale suivante soit nulle, c'est-à-dire :

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (p_i \dot{q}_i - H(q, p, t)) dt = 0 \quad (2.12)$$

Notons que les variables q_i et p_i étant à présent considérées comme *indépendantes*, il y a lieu d'écrire un système d'équations d'Euler-Lagrange pour chacune d'entre elles, c'est-à-dire :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial(p_i \dot{q}_i - H)}{\partial \dot{q}_k} \right) = \frac{\partial(p_i \dot{q}_i - H)}{\partial q_k}$$

ou :

$$\boxed{\dot{p}_k = - \frac{\partial H}{\partial q_k}} \quad (2.13)$$

et :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial(p_i \dot{q}_i - H)}{\partial \dot{p}_k} \right) = \frac{\partial(p_i \dot{q}_i - H)}{\partial p_k}$$

ou :

$$\boxed{0 = \dot{q}_k - \frac{\partial H}{\partial p_k}} \quad (2.14)$$

Les équations (2.13) et (2.14) sont bien identiques aux équations canoniques (2.9).

Notons que, tout comme dans la dérivation des équations d'Euler-Lagrange (cf. section 1.7), les \dot{q}_j ne sont pas considérés comme indépendants des q_j , ni d'ailleurs ici les \dot{p}_j des p_j .

2.4 Transformations canoniques

La pratique des formalismes lagrangien et hamiltonien montre que dans la plupart des problèmes traités, les équations du mouvement ne paraissent pas être plus aisées ni à obtenir ni à résoudre par la méthode hamiltonienne – du moins lorsque celle-ci est utilisée de manière directe – que par la méthode lagrangienne. Quels peuvent donc être les avantages d'étudier un problème mécanique sous l'angle du formalisme hamiltonien ? Bien sûr, comme dans le contexte de la dynamique hamiltonienne, il y a deux fois plus de variables canoniques indépendantes (q, p) que de coordonnées généralisées (rappelons que les q et \dot{q} ne sont pas indépendants), l'ensemble des transformations possibles qui préservent la structure des équations du mouvement (équations canoniques) est plus vaste que dans le contexte lagrangien. Cette liberté accrue, propre au formalisme hamiltonien, peut être utilisée pour simplifier la structure des équations dynamiques sous forme canonique, comme c'est le cas, par exemple, en mécanique céleste.

L'intérêt majeur de l'approche hamiltonienne de la dynamique se manifeste cependant plutôt dans la structure formelle profonde de la mécanique qu'elle permet de mettre en évidence. Cette façon de voir débouche sur une manière plus abstraite de présenter le contenu physique de la mécanique, qui joue un rôle capital dans la construction des grandes théories physiques, telles que la mécanique quantique, la mécanique statistique, la théorie quantique des champs, la relativité générale et les théories unifiées des diverses interactions physiques.

Nous reviendrons plus loin sur cette formulation plus abstraite de la dynamique hamiltonienne mais, pour l'instant, nous allons nous tourner vers l'étude d'une classe de transformation de coordonnées importante, les *transformations canoniques*, qui permettent de simplifier de manière considérable l'écriture et la résolution des équations canoniques pour toute une série de problèmes mécaniques.

Il existe un type de problème pour lequel la solution des équations de Hamilton est triviale. Considérons en effet une situation dans laquelle le lagrangien et donc le hamiltonien ne dépendent pas d'une certaine coordonnée, disons q_k , celle-ci étant alors dite *cyclique*. Dans ce cas, nous savons que (cf. (2.9)) :

$$\dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k} = 0 \quad (2.15)$$

ce qui entraîne : $p_k = \alpha_k = \text{constante}$.

Le système canonique décrit par $H(q_1, \dots, q_{k-1}, q_{k+1}, \dots, q_f, p_1, \dots, p_{k-1}, \alpha_k, p_{k+1}, \dots, p_f, t)$ est alors réduit à un système à $f - 1$ degrés de liberté régi par $2f - 2$ équations différentielles du premier ordre.

Dans le cas où toutes les coordonnées généralisées q_i sont cycliques, c'est-à-dire si $H =$

$H(p_1, \dots, p_f, t)$, la solution des équations canoniques est élémentaire, parce que :

$$\dot{p}_i = 0 \quad \text{entraîne} \quad p_i = \alpha_i = \text{constante} \quad (i = 1, \dots, f)$$

et, par conséquent,

$$\dot{q}_i = \left. \frac{\partial H}{\partial p_i} \right|_{p_i = \alpha_i} = \nu_i(t) \quad (2.16)$$

où les ν_i ($i = 1, \dots, f$) sont des fonctions de α_i et du temps t .

Les solutions des équations différentielles (2.16) sont alors aisément obtenues par intégration, c'est-à-dire :

$$q_i = \int_{t_0}^t \nu_i(t') dt' + \beta_i \quad (2.17)$$

où les f quantités β_i sont des constantes d'intégration, déterminées comme les α_i par les conditions initiales.

Notons que si le hamiltonien n'est pas une fonction explicite du temps, les fonctions $\nu_i(t)$ sont alors des constantes et les coordonnées cycliques q_i s'écrivent alors (cf. (2.17)) sous la forme simple suivante : $q_i = \nu_i t + \beta_i$.

Par conséquent, la formulation canonique de Hamilton est particulièrement bien adaptée à des problèmes dans lesquels une ou plusieurs coordonnées sont cycliques. La solution la plus simple possible pour un problème de mécanique correspond au cas où *toutes* les coordonnées sont cycliques. L'évolution temporelle de chacune de ces coordonnées est alors connue : elle est donnée par une expression du type (2.17).

Ceci soulève une question générale : est-il possible de transformer les coordonnées et les impulsions de telle sorte que la structure canonique des équations du mouvement soit préservée et que certaines ou toutes les coordonnées deviennent cycliques ? Cette question conduit à l'introduction des *transformations canoniques* dont nous allons à présent étudier les propriétés.

Les transformations considérées jusqu'à présent, dans le cadre du formalisme lagrangien, sont du type :

$$Q_i = Q_i(q, t) \quad (i = 1, \dots, f) \quad (2.18)$$

où $q = \{q_1, \dots, q_f\}$ et $Q = \{Q_1, \dots, Q_f\}$ désignent respectivement les anciennes et les nouvelles coordonnées généralisées. De telles transformations sont souvent appelées *transformations ponctuelles*. Le passage des coordonnées cartésiennes aux coordonnées sphériques est évidemment de ce type.

Cependant, dans le cadre de la formulation hamiltonienne de la mécanique, les impulsions constituent aussi des variables indépendantes, que l'on doit placer sur le même pied que les coordonnées généralisées. Il est donc nécessaire d'élargir le concept de transformation de coordonnées de manière à inclure les transformations simultanées des coordonnées et impulsions indépendantes,

représentées par l'ensemble (q, p) , ou un autre ensemble de variables canoniques désigné par (Q, P) avec $P = \{P_1, \dots, P_f\}$, c'est-à-dire :

$$\begin{cases} Q_i = Q_i(q, p, t) \\ P_i = P_i(q, p, t) \end{cases} \quad (i = 1, \dots, f) \quad (2.19)$$

Ces équations de transformation seront toujours, dans la suite, supposées invertibles. Elles définissent des transformations de l'espace de phase, alors que les transformations (2.18) étaient limitées à l'espace de configuration.

Des transformations du type (2.19) sont dites *canoniques*, si elles préservent la structure des équations canoniques, ce qui implique (cf. (2.9)) :

$$\boxed{\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} \quad (i = 1, \dots, f)} \quad (2.20)$$

où $K(Q, P, t)$ joue le rôle de hamiltonien dans le nouveau système de variables.

Comme nous l'avons vu dans la section précédente, si q et p sont des variables canoniques et H le hamiltonien du système correspondant, le principe variationnel d'Hamilton modifié doit être vérifié par ce système, ce qui se traduit par la condition suivante (cf. (2.12)) :

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (p_i \dot{q}_i - H(q, p, t)) dt = 0$$

Il doit alors en être de même pour le même système décrit cette fois par les nouvelles variables canoniques (Q, P) et le nouvel hamiltonien $K(Q, P, t)$, c'est-à-dire que l'on doit avoir :

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (P_i \dot{Q}_i - K(Q, P, t)) dt = 0 \quad (2.21)$$

La validité simultanée de (2.12) et de (2.21) ne signifie cependant nullement que les intégrands de ces deux intégrales soient nécessairement identiques. Ceux-ci peuvent en effet différer d'un terme contenant au plus la dérivée totale temporelle d'une fonction F dépendant des anciennes et des nouvelles variables (mais pas de leur dérivée temporelle) et éventuellement du temps, si bien que la relation la plus générale entre ces deux intégrands (à un facteur global multiplicatif constant près, dit facteur d'échelle) s'écrira sous la forme suivante :

$$p_i \dot{q}_i - H = P_i \dot{Q}_i - K + \frac{dF}{dt} \quad (2.22)$$

En effet, le terme additionnel $\frac{dF}{dt}$ ne contribue à la variation de l'intégrale d'action qu'aux extrémités de l'intervalle temporel, c'est-à-dire en t_1 et t_2 . Cette contribution s'annule puisque F est une fonction de (q, p, t) ou (Q, P, t) ou d'un mélange quelconque de ces coordonnées de l'espace de phase, qui, dans le contexte du principe de Hamilton (modifié), ont toutes une variation nulle en t_1 et t_2 .

Il existe, en fait, quatre manières de choisir la fonction F correspondant aux quatre possibilités de choix de couples des variables canoniques parmi les anciennes variables (q, p) et les nouvelles (Q, P) .

a) Le premier choix possible est :

$$F = F_1(q, Q, t) \quad (2.23)$$

La relation (2.22) prend alors la forme :

$$\begin{aligned} p_i \dot{q}_i - H &= P_i \dot{Q}_i - K + \frac{dF_1}{dt} \\ &= P_i \dot{Q}_i - K + \frac{\partial F_1}{\partial t} + \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \dot{Q}_i \end{aligned} \quad (2.24)$$

Vu que les nouvelles et les anciennes coordonnées, q_i et Q_i sont indépendantes, la relation (2.24) ne peut être satisfaite que si les coefficients de \dot{q}_i et \dot{Q}_i s'annulent individuellement, ce qui conduit aux relations suivantes :

$$p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \quad (2.25a)$$

$$P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \quad (2.25b)$$

$$K = H + \frac{\partial F_1}{\partial t} \quad (2.25c)$$

Les relations (2.25a) constituent f équations définissant les p_i comme des fonctions de q, Q et t . En supposant qu'elles peuvent être inversées, elles peuvent alors être résolues pour les f variables Q_i en termes de q, p et t , fournissant ainsi la première moitié des équations de transformation (2.19). En substituant les expressions pour les Q_i ainsi obtenues dans (2.25b), on obtient les f P_i comme fonctions de q, p et t , c'est-à-dire la seconde moitié des équations de transformation (2.19). Quant à la relation (2.25c), elle fournit la connexion entre le nouvel Hamiltonien K et l'ancien H . La fonction F_1 est appelée *fonction génératrice* car sa connaissance, grâce au processus que nous venons de décrire, permet d'établir les équations explicites de la transformation canonique.

b) Un autre choix intéressant possible pour la fonction F est :

$$F = F_2(q, P, t) - Q_i P_i \quad (2.26)$$

En substituant (2.26) dans (2.22), on obtient :

$$p_i \dot{q}_i - H = -Q_i \dot{P}_i - K + \frac{dF_2}{dt} \quad (2.27)$$

Après développement de la dérivée totale temporelle de la fonction généralisée F_2 et identification des coefficients de \dot{q}_i et \dot{P}_i dans les deux membres, on obtient les relations suivantes :

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} \quad (2.28a)$$

$$Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \quad (2.28b)$$

$$K = H + \frac{\partial F_2}{\partial t} \quad (2.28c)$$

Comme dans le cas a), la résolution des équations (2.28a) fournit les P_i en termes de q, p et t , c'est-à-dire la seconde moitié des équations de transformation (2.19). Quant à la première moitié, elle est obtenue à partir des équations (2.28b).

Nous donnons finalement les relations importantes pour les deux derniers cas de transformation canonique :

c)

$$F = q_i p_i + F_3(p, Q, t) \quad (2.29)$$

$$q_i = -\frac{\partial F_3}{\partial p_i} \quad (2.30a)$$

$$P_i = -\frac{\partial F_3}{\partial Q_i} \quad (2.30b)$$

$$K = H + \frac{\partial F_3}{\partial t} \quad (2.30c)$$

d)

$$F = q_i p_i - Q_i P_i + F_4(p, P, t) \quad (2.31)$$

$$q_i = -\frac{\partial F_4}{\partial p_i} \quad (2.32a)$$

$$Q_i = \frac{\partial F_4}{\partial P_i} \quad (2.32b)$$

$$K = H + \frac{\partial F_4}{\partial t} \quad (2.32c)$$

Cette classification des fonctions génératrices des transformations canoniques peut paraître, au premier abord, assez compliquée et sa structure générale manque de transparence. En réalité, les quatre types de transformations canoniques que nous venons de décrire brièvement sont intimement reliés et peuvent être traités d'une manière unifiée, suite au rôle symétrique et interchangeable que jouent coordonnées et impulsions canoniques, qui peuvent être transformées les unes en les autres. Nous reviendrons plus loin (cf. section (2.6)) sur cette formulation unifiée qui clarifie les fondements de la mécanique hamiltonienne mais, auparavant, nous allons considérer quelques exemples instructifs de transformations canoniques.

2.5 Exemples de transformations canoniques

a) Considérons une fonction génératrice de deuxième type avec comme forme particulière :

$$F_2(q, P) = q_i P_i \quad (2.33)$$

Des relations (2.28a), (2.28b) et (2.28c), on déduit alors les équations de transformation :

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} = P_i \quad (2.34a)$$

$$Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} = q_i \quad (2.34b)$$

$$K = H \quad (2.34c)$$

Les nouvelles et les anciennes variables canoniques sont donc les mêmes ; ainsi, la fonction F_2 donnée par (2.33) engendre la *transformation identique*. La deuxième classe de transformations canoniques est d'ailleurs la seule à contenir la transformation identique.

b) Considérons, à présent, une fonction génératrice de premier type $F_1(q, Q, t)$ de la forme suivante :

$$F_1 = q_k Q_k \quad (2.35)$$

Les équations de transformation s'écrivent alors comme suit : (cf. (2.25a), (2.25b) et (2.25c)) :

$$p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i} = Q_i \quad (2.36a)$$

$$P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i} = -q_i \quad (2.36b)$$

$$K(Q, P) = H(-P, Q) \quad (2.36c)$$

Cette transformation permute donc coordonnées et impulsions canoniques, puisque les nouvelles coordonnées sont les anciennes impulsions et les nouvelles impulsions sont essentiellement les anciennes coordonnées. Cet exemple simple met clairement en évidence le statut d'indépendance des coordonnées et des impulsions canoniques. La distinction que l'on introduit habituellement entre elles n'est donc essentiellement qu'une question de nomenclature.

On peut d'ailleurs vérifier directement à partir des équations d'Hamilton (2.9) que la transformation qui échange coordonnées et impulsions canoniques (p_i remplacé par q_i et q_i par $-p_i$) est bien canonique puisqu'elle laisse les équations canoniques inchangées.

c) Considérons le problème classique de l'*oscillateur harmonique*.

A partir de la forme du lagrangien établie dans la section 1.6, il est aisé d'écrire le hamiltonien correspondant (avec $\dot{q} = \frac{p}{m}$) :

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2q^2 \quad (f = 1) \quad (2.37)$$

Appliquons la transformation canonique de premier type engendrée par la fonction génératrice F_1 donnée par l'expression suivante :

$$F_1 = \frac{m\omega q^2}{2} \cotg Q \quad (2.38)$$

Les équations de la transformation données par (2.25a) et (2.25b) s'écrivent alors :

$$p = \frac{\partial F_1}{\partial q} = m\omega q \cotg Q \quad (2.39a)$$

$$P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} = \frac{m\omega q^2}{2 \sin^2 Q} \quad (2.39b)$$

c'est-à-dire en résolvant ces relations pour q et p en termes de Q et P :

$$q = \sqrt{\frac{2P}{m\omega}} \sin Q \quad (2.40a)$$

$$p = \sqrt{2m\omega P} \cos Q \quad (2.40b)$$

Quant au hamiltonien, il s'écrit, dans les nouvelles variables :

$$K = \omega P \quad (2.41)$$

K ne dépendant pas de Q , celle-ci est une coordonnée *cyclique* et les équations d'Hamilton correspondantes s'écrivent :

$$\dot{P} = -\frac{\partial K}{\partial Q} = 0 \quad (2.42a)$$

$$\dot{Q} = \frac{\partial K}{\partial P} = \omega \quad (2.42b)$$

si bien que :

$$P = \alpha = \text{constante} \quad \text{et} : \quad Q = \omega t + \beta \quad (2.43)$$

où β est une constante.

On déduit donc aisément de (2.40a) la solution pour $q(t)$

$$q(t) = \sqrt{\frac{2\alpha}{m\omega}} \sin(\omega t + \beta) \quad (2.44)$$

On reconnaît la solution bien connue pour l'oscillateur harmonique : α (supposé positif) détermine l'amplitude de l'oscillation et β , sa phase.

Quand la nouvelle impulsion P est une constante et la nouvelle coordonnée Q est une fonction linéaire du temps, P est appelée *variable d'action* et Q , *variable angulaire*.

On pourrait penser que résoudre le problème du mouvement de l'oscillateur harmonique en ayant recours au formalisme des transformations canoniques s'apparente plutôt à essayer de tuer une mouche avec un canon. Cependant, l'intérêt de cet exemple simple est de montrer comment il est possible de réduire un hamiltonien à une forme indépendante de toutes les coordonnées en utilisant explicitement des transformations canoniques. La méthode d'Hamilton-Jacobi qui fera l'objet de la section 2.11 ira encore un pas plus loin en imposant que *toutes les variables canoniques* soient constantes. Mais, avant d'exposer cette méthode, nous allons examiner les transformations canoniques d'un point de vue plus formel, plus abstrait, dans le contexte de l'approche symplectique de la mécanique hamiltonienne.

2.6 L'approche symplectique des transformations canoniques

Il existe une autre approche des transformations canoniques, à première vue déconnectée du formalisme étudié dans la section 2.4 et centré sur le concept de générateur. Elle est basée sur une formulation matricielle des équations d'Hamilton, dite *symplectique*, que nous allons décrire à présent.

Pour un système à f degrés de liberté, nous introduisons un vecteur colonne η à $2f$ éléments, tel que

$$\eta_i = q_i \quad , \quad \eta_{i+f} = p_i \quad i \leq f \quad (2.45)$$

De manière semblable, le vecteur colonne $\frac{\partial H}{\partial \eta}$ a pour éléments :

$$\left(\frac{\partial H}{\partial \eta} \right)_i = \frac{\partial H}{\partial q_i} \quad , \quad \left(\frac{\partial H}{\partial \eta} \right)_{i+f} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad i \leq f \quad (2.46)$$

Désignons finalement par J la matrice carrée $2f \times 2f$ composée de matrices "zéro" $f \times f$ et de matrices "unité", $f \times f$, selon la disposition suivante :

$$J = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

0 représente ici la matrice $f \times f$ dont tous les éléments sont nuls et $\mathbf{1}$ désigne la matrice unité habituelle $f \times f$.

Les équations du mouvement d'Hamilton (2.9) peuvent alors être écrites sous forme compacte de la manière suivante :

$$\dot{\eta} = J \frac{\partial H}{\partial \eta} \quad (2.48)$$

Cette forme des équations d'Hamilton est connue sous le nom de forme *symplectique* des équations canoniques (le terme symplectique provient du grec et signifie "entrelacé" ; il a été introduit pour la première fois en 1939 par H. Weyl).

Notons que la matrice antisymétrique J possède les propriétés suivantes :

$$J^2 = -\mathbf{1} \quad (2.49a)$$

$$J\tilde{J} = \mathbf{1} \quad (2.49b)$$

$$\tilde{J} = -J = J^{-1} \quad (2.49c)$$

$$dtm(J) = +1 \quad (2.49d)$$

Dans (2.49a) et (2.49b), $\mathbf{1}$ désigne la matrice unité $2f \times 2f$. La relation (2.49b) exprime l'orthogonalité de la matrice J . Quant à la relation (2.49d), elle peut se démontrer en utilisant la formule

de Schür donnant le déterminant d'une matrice carrée partitionnée en quatre matrices carrées de même ordre $f : A, B, C, D$, disposées comme suit : $\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$. Le déterminant de cette matrice a pour valeur : $dtm(AD - CB)$, pour autant que les matrices A et C commutent.

Il est à présent possible de réécrire les équations d'Hamilton sous forme matricielle dans les nouvelles variables canoniques Q_i, P_i , en introduisant un vecteur colonne ζ à $2f$ éléments. Les équations de la transformation canonique liant (Q, P) à (q, p) (cf. 2.19) s'écrivent alors :

$$\zeta = \zeta(\eta) \quad (2.50)$$

Nous nous limitons dans ce qui suit à des transformations canoniques ne dépendant pas explicitement du temps. On peut donc écrire la dérivée temporelle d'une composante typique de ζ sous la forme suivante :

$$\dot{\zeta}_i = \frac{\partial \zeta_i}{\partial \eta_j} \dot{\eta}_j \quad (i, j = 1, \dots, 2f)$$

c'est-à-dire, sous forme matricielle :

$$\dot{\zeta} = M \dot{\eta} \quad (2.51)$$

en introduisant la matrice jacobienne de la transformation (2.50), désignée par M , et dont les éléments s'écrivent comme suit :

$$M_{ij} = \frac{\partial \zeta_i}{\partial \eta_j} \quad (2.52)$$

En utilisant les équations canoniques vérifiées par η , c'est-à-dire (2.48), (2.51) s'écrit :

$$\dot{\zeta} = MJ \frac{\partial H}{\partial \eta} \quad (2.53)$$

H peut être considéré comme une fonction de ζ , via la transformation inverse $\eta = \eta(\zeta)$, et sa dérivée par rapport à η peut être écrite sous la forme suivante :

$$\frac{\partial H}{\partial \eta_i} = \frac{\partial H}{\partial \zeta_j} \frac{\partial \zeta_j}{\partial \eta_i}$$

c'est-à-dire sous la forme matricielle :

$$\frac{\partial H}{\partial \eta} = \tilde{M} \frac{\partial H}{\partial \zeta} \quad (2.54)$$

En combinant (2.53) et (2.54), on obtient la forme des équations du mouvement, valable pour tout ensemble de variables ζ , résultant d'une transformation canonique – indépendante du temps – effectuée sur un ensemble de variables canoniques, η_i :

$$\dot{\zeta} = MJ\tilde{M} \frac{\partial H}{\partial \zeta} \quad (2.55)$$

Nous savons, d'autre part, à partir du formalisme des transformations canoniques développé à la section 2.4 et basé sur le concept de fonction génératrice que, pour une transformation canonique ne dépendant pas explicitement du temps, l'“ancien” hamiltonien exprimé en termes des nouvelles variables constitue le “nouvel” hamiltonien, si bien que les équations canoniques s'écrivent aussi dans les nouvelles variables sous la forme suivante (cf. (2.48)) :

$$\dot{\zeta} = J \frac{\partial H}{\partial \zeta} \quad (2.56)$$

Par conséquent, la transformation $\zeta = \zeta(\eta)$ sera canonique si la matrice M satisfait à la condition suivante (2.57a), dite *symplectique* (ou à sa forme équivalente (2.57b)) :

$$MJ\tilde{M} = J \quad (2.57a)$$

$$\tilde{M}JM = J \quad (2.57b)$$

En fait, la *condition symplectique* est une condition à la fois nécessaire et suffisante qui assure le caractère canonique d'une transformation (même d'ailleurs si celle-ci dépend explicitement du temps) et la matrice M qui vérifie cette condition est appelée *matrice symplectique*. La condition symplectique entraîne d'ailleurs, comme on peut le montrer, l'existence d'une fonction génératrice.

Il est aussi possible de considérer la transformation canonique d'un point de vue purement algébrique, celui de la théorie des *groupes*. En effet, les transformations canoniques constituent un groupe ; plus précisément, les matrices symplectiques (c'est-à-dire celles qui vérifient la condition (2.57)) forment un groupe, le *groupe symplectique réel* sur l'espace R^{2f} .

De plus, la condition (2.57) montre que la matrice J est invariante sous l'action des transformations canoniques, ce qui suggère de lui faire jouer le rôle de métrique dans l'espace de phase. Ce point de vue purement géométrique a connu des développements intéressants au cours des dernières années, qui ont permis de mieux cerner la structure géométrique de l'espace de phase. Si le temps l'avait permis, ce point de vue aurait été développé avec plus de détail.

2.7 Les crochets de Poisson

Le *crochet de Poisson* de deux fonctions u, v par rapport aux variables canoniques (q, p) , est défini comme suit :

$$\boxed{[u, v]_{q,p} = \frac{\partial u}{\partial q_i} \frac{\partial v}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i} \frac{\partial v}{\partial q_i}} \quad (2.58)$$

Cette définition peut s'écrire sous la forme matricielle suivante :

$$[u, v]_{\eta} = \widetilde{\frac{\partial u}{\partial \eta}} J \frac{\partial v}{\partial \eta} \quad (2.59)$$

où le symbole de transposition sur le premier vecteur du membre de droite rappelle que ce vecteur doit être considéré comme un vecteur ligne.

Supposons, à présent, que nous choisissons les fonctions u et v parmi les variables canoniques (q, p) elles-mêmes. Il est alors aisé de déduire de la définition (2.58) les valeurs des divers crochets de Poisson correspondants :

$$\begin{cases} [q_j, q_k]_{q,p} = 0 \\ [p_j, p_k]_{q,p} = 0 \\ [q_j, p_k]_{q,p} = -[p_j, q_k]_{q,p} = \delta_{jk} \end{cases} \quad (2.60)$$

On peut synthétiser les relations (2.60) en une seule équation en introduisant une *matrice crochet de Poisson*, désignée par $[\eta, \eta]$ dont l'élément (ℓm) est $[\eta_{\ell}, \eta_m]$. Les équations (2.60) s'écrivent alors, sous la forme suivante :

$$[\eta, \eta]_{\eta} = J \quad (2.61)$$

Choisissons à présent pour u, v les variables canoniques (Q, P) (ou ζ), définies en fonction de (q, p) par les équations de transformation : $\zeta = \zeta(\eta, t)$. L'ensemble de tous les crochets de Poisson que l'on peut former à partir des variables (Q, P) constitue la matrice crochet de Poisson $[\zeta, \zeta]$, définie comme suit :

$$[\zeta, \zeta]_{\eta} = \widetilde{\frac{\partial \zeta}{\partial \eta}} J \frac{\partial \zeta}{\partial \eta} \quad (2.62)$$

c'est-à-dire, en tenant compte de (2.52) :

$$[\zeta, \zeta]_{\eta} = \widetilde{M} J M \quad (2.63)$$

Si la transformation $\eta \rightarrow \zeta$ est *canonique*, alors la condition symplectique est satisfaite et l'équation précédente se réduit à :

$$[\zeta, \zeta]_{\eta} = J \quad (2.64)$$

On peut aussi montrer que réciproquement, si la relation (2.64) est satisfaite, alors la transformation $\eta \rightarrow \zeta$ est canonique.

Les crochets de Poisson des variables canoniques elles-mêmes (cf. (2.60) ou (2.61)) sont appelés *crochets de Poisson fondamentaux*. D'autre part, la relation (2.61) doit aussi être satisfaite pour les variables canoniques, ζ , c'est-à-dire :

$$[\zeta, \zeta]_{\zeta} = J \quad (2.65)$$

Ainsi donc, les crochets de Poisson fondamentaux des variables ζ ont exactement la même valeur, quel que soit l'ensemble de variables canoniques par rapport auquel ils sont évalués. En d'autres mots, *les crochets de Poisson fondamentaux sont invariants vis-à-vis des transformations canoniques*. Cette invariance des crochets de Poisson fondamentaux est donc complètement équivalente à la condition symplectique pour une transformation canonique.

On peut aussi montrer que *tous* les crochets de Poisson sont invariants vis-à-vis de transformations canoniques. Considérons le crochet de Poisson de deux fonctions u, v par rapport à l'ensemble η de coordonnées canoniques, donné par l'équation (2.59). Par analogie avec la relation (2.54), la dérivée partielle de v par rapport à η peut être exprimée en fonction des dérivées partielles par rapport à ζ sous la forme suivante :

$$\frac{\partial v}{\partial \eta} = \tilde{M} \frac{\partial v}{\partial \zeta} \quad (2.66)$$

On a, de la même manière :

$$\frac{\partial u}{\partial \eta} = \tilde{M} \frac{\partial u}{\partial \zeta} = \frac{\partial u}{\partial \zeta} M \quad (2.67)$$

Par conséquent, le crochet de Poisson (2.59) s'écrit :

$$[u, v]_{\eta} = \frac{\partial u}{\partial \eta} J \frac{\partial v}{\partial \eta} = \frac{\partial u}{\partial \zeta} M J \tilde{M} \frac{\partial v}{\partial \zeta} \quad (2.68)$$

Si la transformation est canonique, la condition symplectique (2.57a) est satisfaite, et donc :

$$\boxed{[u, v]_{\eta} = \frac{\partial u}{\partial \zeta} J \frac{\partial v}{\partial \zeta} = [u, v]_{\zeta}} \quad (2.69)$$

ce qui montre que *tous les crochets de Poisson sont des invariants canoniques*. Il est dès lors superflu d'indiquer par rapport à quel ensemble de variables le crochet de Poisson est défini, pour autant que la nature canonique des variables soit assurée.

L'intérêt majeur des transformations canoniques est l'invariance de la forme des équations d'Hamilton vis-à-vis de telles transformations. Il en va de même pour la forme des équations canoniques exprimées en termes de crochets de Poisson, suite à l'invariance canonique des crochets de Poisson. Il est dès lors possible de développer une formulation de la mécanique classique en termes des crochets de Poisson uniquement, qui a le grand intérêt de posséder la même forme dans

n'importe quel système de variables canoniques. Cette formulation est particulièrement utile pour réaliser la transition entre mécanique classique et *mécanique quantique*, au travers du "principe de correspondance" qui régit le remplacement du crochet de Poisson classique par un commutateur des opérateurs quantiques correspondants défini de manière appropriée.

L'étude des propriétés algébriques du crochet de Poisson est dès lors d'un intérêt considérable. Celui-ci vérifie les propriétés suivantes, dont les trois premières sont triviales :

$$[u, u] = 0 \quad (2.70a)$$

$$[u, v] = -[v, u] \quad (2.70b)$$

$$[au + bv, w] = a[u, w] + b[v, w] \quad (2.70c)$$

$$[uv, w] = [u, w]v + u[v, w] \quad (2.70d)$$

$$[u, [v, w]] + [v, [w, u]] + [w, [u, v]] = 0 \quad (2.70e)$$

La deuxième propriété exprime l'antisymétrie du crochet de Poisson, la troisième (où a et b sont des constantes), sa linéarité. La dernière propriété que vérifie le crochet de Poisson et qui en caractérise d'ailleurs la nature profonde est l'*identité de Jacobi* (u , v et w y sont des fonctions des variables canoniques possédant au moins des dérivées secondes continues). Le premier membre de cette identité se présente sous la forme de la somme des permutations cycliques du crochet de Poisson double des trois fonctions u , v , et w .

On peut simplifier la démonstration directe de cette identité, faisant appel à des manipulations algébriques assez longues, en introduisant les notations suivantes :

$$u_i \equiv \frac{\partial u}{\partial \eta_i}, \quad v_{ij} = \frac{\partial^2 v}{\partial \eta_i \partial \eta_j}$$

Le crochet de Poisson de u et v s'écrit alors (cf. (2.59)) :

$$[u, v] = u_i J_{ij} v_j$$

J_{ij} désigne, comme d'habitude, l'élément (ij) de la matrice J . La seule propriété de J dont nous avons besoin dans cette démonstration est l'antisymétrie de J .

Considérons maintenant le premier double crochet de Poisson de l'identité (2.70e) :

$$[u, [v, w]] = u_i J_{ij} [v, w]_j = u_i J_{ij} (v_k J_{k\ell} w_\ell)_j$$

Les éléments de J étant constants, leur dérivée par rapport à η est nulle, et la dernière relation s'écrit alors comme suit :

$$[u, [v, w]] = u_i J_{ij} (v_k J_{k\ell} w_\ell)_j + v_{kj} J_{k\ell} w_\ell \quad (2.71)$$

Les deux autres doubles crochets de Poisson peuvent être directement obtenus de (2.71) par permutation cyclique de u , v et w . Le premier membre de l'identité de Jacobi contient donc six termes, chacun apparaissant sous la forme d'une quadruple somme sur les indices muets i , j , k et ℓ . Considérons le terme de (2.71) contenant des dérivées secondes de w , c'est-à-dire :

$$J_{ij}J_{k\ell}u_iv_kw_{\ell j}$$

Le seul autre terme contenant des dérivées secondes de w apparaîtra dans le deuxième double crochet de Poisson dans (2.70e), c'est-à-dire :

$$[v, [w, u]] = v_k J_{k\ell} (w_j J_{ji} u_i)_\ell$$

Ce terme a pour expression : $J_{ji}J_{k\ell}u_iv_kw_{j\ell}$. Comme l'ordre de différentiation est indifférent, $w_{\ell j} = w_{j\ell}$ et vu l'antisymétrie de la matrice J , la somme des deux termes contenant des dérivées secondes de w s'annule. En effet,

$$(J_{ij} + J_{ji})J_{k\ell}u_iv_kw_{\ell j} = 0 \quad (2.72)$$

Les quatre termes restants constituent des permutations cycliques des deux termes que nous venons d'analyser de manière détaillée ; ils peuvent être groupés par deux, le premier et le second groupe formés des termes contenant des dérivées secondes de u et v respectivement. Chacun de ces deux groupes s'annule individuellement par le même raisonnement que celui utilisé pour démontrer (2.71), si bien que l'identité de Jacobi (2.70e) est vérifiée.

Si l'on considère le crochet de Poisson de u et v comme un "produit généralisé" de deux fonctions, alors l'identité de Jacobi peut être interprétée comme une généralisation de la loi associative de la multiplication ordinaire, c'est-à-dire : $a(bc) = (ab)c$. L'opération "crochet de Poisson", vu l'identité de Jacobi n'est pas associative. En fait, l'ensemble des propriétés (2.70b), (2.70c) et (2.70e) du crochet de Poisson définit un type particulier de structure algébrique, une algèbre non associative, appelée *algèbre de Lie*. Il existe d'autres types de "produits" plus familiers, qui vérifient tout comme le crochet de Poisson, les conditions caractéristiques d'une algèbre de Lie, ainsi, le produit vectoriel de deux vecteurs $\vec{A} \wedge \vec{B}$ et le commutateur de deux matrices, $AB - BA$. C'est d'ailleurs cette similitude de structure mathématique que partage le crochet de Poisson avec le commutateur de deux opérateurs quantiques (ou matrices) qui permet, via le principe de correspondance, le passage de la mécanique classique à la mécanique quantique, via la correspondance formelle :

$$[u, v] \rightarrow \frac{1}{i\hbar}(uv - vu)$$

où u et v désignent, à gauche, des fonctions classiques et à droite des opérateurs quantiques représentés par des matrices, et $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, où h est la constante de Planck.

2.8. Formulation de la mécanique hamiltonienne dans le langage des crochets de Poisson

La mécanique hamiltonienne peut, en très grande partie, être reformulée en termes des crochets de Poisson. Vu l'invariance canonique des crochets de Poisson, la forme des équations ainsi obtenues est invariante vis-à-vis de transformations canoniques.

Considérons, par exemple, une fonction $g(q, p, t)$, des variables canoniques et du temps (au moins de classe C^1 par rapport à ces variables). Evaluons la dérivée totale par rapport au temps de cette fonction. On obtient alors en utilisant les équations du mouvement d'Hamilton (2.9) :

$$\frac{dg}{dt} = \frac{\partial g}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial g}{\partial p_i} \dot{p}_i + \frac{\partial g}{\partial t} = \frac{\partial g}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial g}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} + \frac{\partial g}{\partial t}$$

c'est-à-dire, en utilisant la définition (2.58) du crochet de Poisson :

$$\boxed{\frac{dg}{dt} = [g, H] + \frac{\partial g}{\partial t}} \quad (2.73)$$

En notation symplectique, l'équation précédente s'écrit (cf.(2.48)) :

$$\frac{dg}{dt} = \frac{\partial g}{\partial \eta} \dot{\eta} + \frac{\partial g}{\partial t} = \frac{\tilde{\partial} g}{\partial \eta} J \frac{\partial H}{\partial \eta} + \frac{\partial g}{\partial t} \quad (2.74)$$

Vu (2.59), cette relation est équivalente à (2.73).

L'équation (2.73) représente l'équation généralisée du mouvement pour une variable dynamique arbitraire g dans la formulation des crochets de Poisson. Elle contient les équations d'Hamilton comme cas particulier : en effet, il suffit d'y remplacer g par les variables canoniques q_i et p_i , respectivement, ce qui fournit les relations suivantes :

$$\begin{cases} \dot{q}_i = [q_i, H] \\ \dot{p}_i = [p_i, H] \end{cases} \quad (2.75)$$

soit, en notation symplectique (cf. (2.59)) :

$$\dot{\eta} = [\eta, H] = J \frac{\partial H}{\partial \eta} \quad (2.76)$$

relation équivalente à la forme symplectique des équations d'Hamilton (2.48). En choisissant pour la fonction g le hamiltonien lui-même, on retrouve un résultat déjà obtenu précédemment (cf. (2.10)) :

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} \quad (2.77)$$

La forme de l'équation généralisée du mouvement (2.73) reste donc invariante vis-à-vis d'une transformation canonique : elle est donc valable quel que soit l'ensemble de variables canoniques

(q, p) choisi pour exprimer la dépendance de la fonction g ou pour évaluer le crochet de Poisson. Il est cependant important de noter qu'il y a lieu d'utiliser le hamiltonien approprié à l'ensemble particulier de variables canoniques choisi. Ainsi, si la transformation canonique dépend explicitement du temps, c'est le hamiltonien transformé K qu'il conviendra d'utiliser en lieu et place de H dans les relations précédentes.

Si g est une constante des mouvements, alors (2.73) implique la relation suivante :

$$\frac{\partial g}{\partial t} = [H, g] \quad (2.78)$$

Toutes les fonctions qui vérifient cette relation sont des constantes des mouvements et, réciproquement, le crochet de Poisson du hamiltonien H avec toute constante des mouvements doit être égal à la dérivée temporelle explicite de la fonction constante. Nous disposons donc là d'un test général de recherche et d'identification des intégrales premières d'un système. Dans le cas de constantes des mouvements ne dépendant pas explicitement du temps, l'équation (2.78) se réduit à l'annulation de leur crochet de Poisson avec le hamiltonien, c'est-à-dire :

$$[H, g] = 0 \quad (2.79)$$

L'analogie en mécanique quantique de ce résultat est le théorème selon lequel des quantités conservées commutent avec le hamiltonien (au sens du "commutateur quantique" introduit à la fin de la section 2.7).

Si l'on connaît deux constantes des mouvements, l'identité de Jacobi permet en principe d'en obtenir d'autres. Supposons, en effet, que u et v sont deux constantes des mouvements. Désignons par w leur crochet de Poisson, c'est-à-dire : $w = [u, v]$.

La relation (2.73) est vérifiée par la fonction w et s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \frac{dw}{dt} &= [w, H] + \frac{\partial w}{\partial t} \\ &= \frac{\partial}{\partial t}[u, v] + [[u, v], H] \end{aligned}$$

c'est-à-dire, en tenant compte de l'identité de Jacobi (2.70e) :

$$\begin{aligned} \frac{dw}{dt} &= \left[\frac{\partial u}{\partial t}, v \right] + \left[u, \frac{\partial v}{\partial t} \right] + [u, [v, H]] + [v, [H, u]] \\ &= \left[\frac{\partial u}{\partial t} + [u, H], v \right] + \left[u, \frac{\partial v}{\partial t} + [v, H] \right] \\ &= \left[\frac{du}{dt}, v \right] + \left[u, \frac{dv}{dt} \right] \end{aligned} \quad (2.80)$$

en utilisant les propriétés d'antisymétrie (2.70b) et de linéarité (2.70c) du crochet de Poisson et la relation (2.73). Par conséquent, puisque u et v sont des constantes des mouvements, c'est-à-dire

$\frac{du}{dt} = 0$, et $\frac{dv}{dt} = 0$, (2.80) implique

$$\frac{d}{dt}[u, v] = 0 \quad (2.81)$$

Ce résultat constitue le *théorème de Poisson* qui s'énonce comme suit :

Le crochet de Poisson de deux constantes des mouvements est lui-même une constante des mouvements.

On pourrait donc espérer qu'une application répétée du théorème de Poisson puisse nous permettre de construire une séquence complète de constantes des mouvements. C'est vrai en principe mais, en pratique, les résultats de ce processus sont fréquemment décevants, en ce sens que le crochet de Poisson de u et v ne fournit souvent qu'une fonction triviale des fonctions u et v elles-mêmes, ou alors un résultat identiquement nul. La relation (2.73) et le théorème de Poisson n'en restent cependant pas moins des résultats essentiels de la mécanique hamiltonienne.

2.9 Transformations canoniques infinitésimales et intégrales premières

Les transformations canoniques qui peuvent être déformées de manière continue en la transformation identique forment une classe particulièrement importante. Il est possible, parmi celles-ci, de construire des transformations canoniques qui ne diffèrent de la transformation identique que de manière infinitésimale. Il est donc possible d'étudier l'action locale d'une transformation canonique, d'une manière analogue à l'étude des rotations infinitésimales présentée à la fin de la section 1.8.

Nous savons que seules les transformations canoniques appartenant à la deuxième classe contiennent la transformation identique (cf. section 2.5). La fonction génératrice associée à cette transformation désignée par $F_2(q, P)$ dans la section 2.4, sera rebaptisée dorénavant $S_E(q, P)$ avec :

$$S_E(q, P) = q_i P_i \quad (2.82)$$

La transformation canonique correspondante s'écrit (cf. (2.34)) :

$$\begin{cases} q_i = Q_i \\ p_i = P_i \\ K = H \end{cases} \quad (2.83)$$

Considérons, à présent, une quantité infinitésimale, ε , et une fonction – supposée différentiable – $\sigma(q, P)$ des anciennes coordonnées et des nouvelles impulsions. Nous nous limiterons à des transformations ne dépendant pas explicitement du temps. Introduisons la fonction $S(q, P, \varepsilon)$ définie comme suit :

$$S(q, P, \varepsilon) = S_E + \varepsilon \sigma(q, P) + O(\varepsilon^2) \quad (2.84)$$

La fonction

$$\sigma(q, P) = \left. \frac{\partial S}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} \quad (2.85)$$

est appelée *fonction génératrice de la transformation infinitésimale* (2.84).

Utilisant les relations (2.28), on obtient :

$$\begin{cases} Q_i = \frac{\partial S}{\partial P_i} = q_i + \varepsilon \frac{\partial \sigma}{\partial P_i} + O(\varepsilon^2) \\ p_j = \frac{\partial S}{\partial q_j} = P_j + \varepsilon \frac{\partial \sigma}{\partial q_j} + O(\varepsilon^2) \end{cases} \quad (2.86)$$

Les dérivées $\frac{\partial \sigma}{\partial P_i}$ et $\frac{\partial \sigma}{\partial q_i}$ dépendent des anciennes coordonnées et des nouvelles impulsions. Cependant, si nous limitons nos développements au premier ordre en ε , nous pouvons par souci de

cohérence remplacer tous les P_j par p_j . En effet, P_j diffère de p_j par des termes d'ordre ε . Si nous les conservons, nous inclurons, en fait, certains termes d'ordre ε^2 – mais pas tous ! – dans (2.86). Les relations (2.86) s'écrivent alors :

$$\begin{cases} \delta q_i = Q_i - q_i = \varepsilon \frac{\partial \sigma(q, p)}{\partial p_i} \\ \delta p_j = P_j - p_j = -\varepsilon \frac{\partial \sigma(q, p)}{\partial q_j} \end{cases} \quad (2.87)$$

En utilisant la définition (2.58) du crochet de Poisson, nous pouvons écrire ces relations sous une forme plus symétrique :

$$\begin{cases} \delta q_i = \varepsilon [q_i, \sigma(q, p)] \\ \delta p_j = \varepsilon [p_j, \sigma(q, p)] \end{cases} \quad (2.88)$$

c'est-à-dire sous forme symplectique (cf. (2.59)) :

$$\delta \eta = \varepsilon J \frac{\partial \sigma(\eta)}{\partial \eta} = \varepsilon [\eta, \sigma(\eta)] \quad (2.89)$$

Le transformation canonique infinitésimale (2.84) a donc pour effet de modifier la coordonnée (l'impulsion) généralisée d'une quantité proportionnelle à ε et au crochet de Poisson de la fonction génératrice (2.85) avec cette coordonnée (cette impulsion).

Un cas particulier spécialement intéressant est le suivant. Remplaçons, d'une part, ε par un intervalle temporel infinitésimal, dt , et, d'autre part, la fonction σ par le hamiltonien $H(q, p)$, si bien que la fonction $S(q, P, \varepsilon)$ prend la forme suivante :

$$S(q, P, dt) = S_E + H(q, p) dt \quad (2.90)$$

Les équations (2.87) et (2.88) sont alors identiques aux équations canoniques sous leur forme (2.75). En effet, elles s'écrivent avec $\delta q_i \equiv dq_i$ et $\delta p_j \equiv dp_j$:

$$\begin{cases} dq_i = [q_i, H] dt \\ dp_j = [p_j, H] dt \end{cases} \quad (2.91)$$

Le hamiltonien H apparaît donc comme la fonction génératrice de la transformation canonique infinitésimale qui correspond au mouvement réel (dq_i, dp_j) effectué par le système durant l'intervalle temporel dt . Quant au mouvement du système durant un intervalle de temps fini, Δt , c'est-à-dire de t_0 à $t_0 + \Delta t$, il peut être représenté par une succession de transformations canoniques infinitésimales, équivalentes, comme on peut le montrer, à une transformation unique à temps fini. C'est ainsi que, dans ce contexte, le *hamiltonien* peut, en quelque sorte, être considéré comme le "générateur du mouvement du système au cours du temps".

Considérons maintenant le comportement d'une variable dynamique donnée $f(q, p)$ vis-à-vis d'une transformation infinitésimale de type (2.84). On a, en utilisant (2.87) et (2.88)

$$\begin{aligned}\delta_\sigma f(q, p) &= \sum_{k=1}^f \left(\frac{\partial f}{\partial q_k} \delta q_k + \frac{\partial f}{\partial p_k} \delta p_k \right) \\ &= \sum_{k=1}^f \left(\frac{\partial f}{\partial q_k} \frac{\partial \sigma}{\partial p_k} - \frac{\partial f}{\partial p_k} \frac{\partial \sigma}{\partial q_k} \right) \varepsilon = \varepsilon [f, \sigma]\end{aligned}\quad (2.92)$$

Si nous choisissons $\varepsilon = dt$ et $\sigma = H$, cette dernière relation s'écrit comme suit :

$$\frac{df}{dt} = [f, H] \quad (2.93)$$

relation identique à (2.73) (avec ici $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$).

Nous pouvons nous demander comment le hamiltonien H se comporte vis-à-vis d'une transformation canonique infinitésimale engendrée par la fonction $f(q, p)$. La réponse est obtenue à partir de (2.92) :

$$\delta_f H = \varepsilon [H, f] \quad (2.94)$$

En particulier, l'annulation du crochet $[H, f]$ signifie que H reste invariant vis-à-vis de cette transformation. Si c'est le cas, alors, de (2.93), compte tenu de l'antisymétrie du crochet de Poisson, on déduit que f est une constante des mouvements. On peut mettre en évidence cette réciprocity, en réécrivant (2.93) sous la forme suivante (à comparer avec (2.94)) :

$$\delta_H f = [f, H] dt \quad (2.95)$$

On voit donc que $\delta_f H$ s'annule si et seulement si $\delta_H f$ le fait. *La transformation canonique infinitésimale engendrée par $f(q, p)$ laisse le hamiltonien invariant si et seulement si la fonction f est constante le long des trajectoires physiques.*

On notera l'analogie très étroite entre ce résultat et le théorème de Noether considéré dans l'étude des systèmes lagrangiens (section 1.7). Nous allons illustrer cette analogie à l'aide de deux exemples simples :

a) Considérons une particule de masse m . Son *déplacement spatial* (ou *translation*) dans la direction associée au vecteur constant \vec{a} ($\vec{a} = a\hat{a}$, où a désigne le module du vecteur et \hat{a} le vecteur unitaire caractérisant la direction de ce vecteur) est donné par :

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{a} \quad (2.96)$$

Cette translation peut, du point de vue des transformations canoniques, être considérée comme engendrée par la transformation :

$$S(\vec{r}, \vec{p}') = (\vec{r} + \vec{a}) \cdot \vec{p}' = \vec{r} \cdot \vec{p}' + \vec{a} \cdot \vec{p}' \quad (2.97)$$

Les variables non primées doivent être identifiées aux anciennes variables canoniques q_k, p_k tandis que les variables primées doivent l'être aux nouvelles variables Q_k, P_k . On a, en effet (cf. (2.28)) :

$$\begin{cases} Q_k = \frac{\partial S}{\partial P_k} \rightarrow \vec{r}' = \vec{r} + \vec{a} \\ p_k = \frac{\partial S}{\partial q_k} \rightarrow \vec{p}' = \vec{p} \end{cases} \quad (k = 1, 2, 3) \quad (2.98)$$

Nous savons, d'autre part, que le hamiltonien de la particule libre qui s'écrit

$$H = \frac{|\vec{p}|^2}{2m} \quad (2.99)$$

est invariant vis-à-vis d'une translation donnée par (2.96).

Considérons, à présent, une translation infinitésimale : il suffit pour cela de supposer que le module du vecteur \vec{a} , c'est-à-dire a , est infinitésimalement petit. La transformation infinitésimale correspondante est alors engendrée par la fonction génératrice σ donnée par :

$$\sigma = \left. \frac{\partial S}{\partial a} \right|_{a=0} = \hat{a} \cdot \vec{p} \quad (2.100)$$

Vu l'invariance de H vis-à-vis de cette transformation, nous avons :

$$[H, \sigma] = 0 \quad (2.101)$$

c'est-à-dire, vu (2.93) :

$$\frac{d\sigma}{dt} = 0 \quad (2.102)$$

ce qui implique que σ , la projection de l'impulsion sur la direction \hat{a} , est une constante des mouvements (ou une intégrale première).

b) Considérons une *rotation spatiale* d'angle θ du système $Oxyz$ autour de l'axe Oz . Les nouvelles coordonnées d'une particule de masse m sont données par (cf. (1.77)) :

$$\begin{cases} x' = x \cos \theta + y \sin \theta \\ y' = -x \sin \theta + y \cos \theta \\ z' = z \end{cases}$$

Cette transformation de coordonnées peut être considérée comme une transformation canonique de deuxième type engendrée par la fonction :

$$S(x, y, z, p'_x, p'_y, p'_z) = (x \cos \theta + y \sin \theta)p'_x + (-x \sin \theta + y \cos \theta)p'_y + zp'_z \quad (2.103)$$

On tire, en effet, de (2.86) :

$$\begin{cases} x' = \frac{\partial S}{\partial p'_x} = x \cos \theta + y \sin \theta \\ y' = \frac{\partial S}{\partial p'_y} = -x \sin \theta + y \cos \theta \\ z' = \frac{\partial S}{\partial p'_z} = z \end{cases} \quad (2.104)$$

$$\begin{cases} p_x = \frac{\partial S}{\partial x} = p'_x \cos \theta - p'_y \sin \theta \\ p_y = \frac{\partial S}{\partial y} = p'_x \sin \theta + p'_y \cos \theta \\ p_z = \frac{\partial S}{\partial z} = p'_z \end{cases} \quad (2.105)$$

Les relations (2.105) peuvent être résolues pour p'_x, p'_y, p'_z en fonction de p_x, p_y et p_z :

$$\begin{cases} p'_x = p_x \cos \theta + p_y \sin \theta \\ p'_y = -p_x \sin \theta + p_y \cos \theta \\ p'_z = p_z \end{cases} \quad (2.106)$$

Les composantes de l'impulsion se transforment donc de la même manière que les coordonnées (ce qui est en accord avec le caractère vectoriel du rayon vecteur \vec{r} et du vecteur impulsion \vec{p}).

Considérons maintenant une rotation infinitésimale caractérisée par un angle θ infinitésimalement petit. La fonction S devient alors :

$$S = xp'_x + yp'_y + zp'_z + \theta(y p'_x - x p'_y) \quad (2.107)$$

La fonction génératrice de la transformation infinitésimale correspondante est alors donnée par :

$$\sigma = \left. \frac{\partial S}{\partial \theta} \right|_{\theta=0} = yp_x - xp_y \quad (2.108)$$

Le hamiltonien (2.99) étant aussi invariant vis-à-vis d'une rotation du système de coordonnées autour d'une direction quelconque et donc, en particulier, autour de l'axe Oz , nous avons alors comme dans le cas précédent

$$[H, \sigma] = 0 \quad \text{et} \quad \frac{d\sigma}{dt} = 0$$

avec cette fois, comme conséquence, la conservation de la composante du moment angulaire suivant l'axe Oz (cf. l'exemple similaire traité dans le contexte du théorème de Noether à la fin de la section 1.9).

2.10 Le théorème de Liouville

Un autre invariant canonique important est la mesure de l'élément de volume de l'espace de phase. Sous l'action d'une transformation canonique $\eta \rightarrow \zeta$, l'élément de volume de l'espace de phase qui possède, rappelons-le, $2f$ dimensions et qui s'écrit :

$$(d\eta) = dq_1 dq_2 \dots dq_f dp_1 dp_2 \dots dp_f$$

se transforme en le nouvel élément de volume

$$(d\zeta) = dQ_1 dQ_2 \dots dQ_f dP_1 dP_2 \dots dP_f$$

On sait que les mesures respectives de ces deux éléments de volume sont reliés de la manière suivante :

$$(d\zeta) = |dtm(M)|(d\eta) \quad (2.109)$$

où $|dtm(M)|$ représente la valeur absolue du déterminant de la matrice jacobienne de transformation d'éléments (cf. (2.52)) :

$$M_{ij} = \frac{\partial \zeta_i}{\partial \eta_j}$$

En prenant, d'autre part, le déterminant des deux membres de la condition symplectique (2.57a), on obtient :

$$|dtm(M)|^2 dtm(J) = dtm(J) \quad (2.110)$$

d'où l'on déduit que le déterminant de la matrice jacobienne M a pour valeur ± 1 . Notons que l'on peut montrer que toute matrice symplectique M a un déterminant égal à $+1$. Il suffit cependant, pour démontrer l'*invariance canonique de l'élément de volume de l'espace de phase* à partir de (2.109) ($(d\zeta) = (d\eta)$), de savoir que la valeur absolue de ce déterminant vaut $+1$. Il s'ensuit que la mesure du volume d'un domaine arbitraire Ω de l'espace de phase :

$$\int_{\Omega} d\eta$$

est un invariant canonique. Autrement dit, l'intégrale $\int_{\Omega} d\eta$ reste constante au cours du temps, dans tout mouvement du système hamiltonien considéré.

On peut donc énoncer le *théorème de Liouville* :

Les transformations canoniques conservent les volumes dans l'espace de phase.

Les deux figures suivantes (Figures 2.6(a) et (b)) illustrent le théorème de Liouville. La première concerne le cas de l'oscillateur harmonique (cf. section 1.6). Tous les points de l'espace de phase (q, p) se déplacent sur des cercles centrés sur l'origine, avec une vitesse angulaire constante. Un

domaine circulaire correspondant à un ensemble de conditions initiales choisies (représenté par le cercle hachuré) se déplace de manière uniforme autour de l'origine sans connaître de modification de «volume», ni de «forme».

Dans le cas du pendule plan (cf. sections 1.6 et 2.2), dont le plan de phase est représenté sur la deuxième figure (Figure 2.6(b)), un domaine circulaire (dont la frontière est dessinée en pointillés) associé à un ensemble de conditions initiales et dont le centre est situé sur l'axe p se déplace autour de l'origine dans le sens horlogique. Sa forme se modifie manifestement au cours de son mouvement, mais son volume original est préservé, en conformité avec le théorème de Liouville.

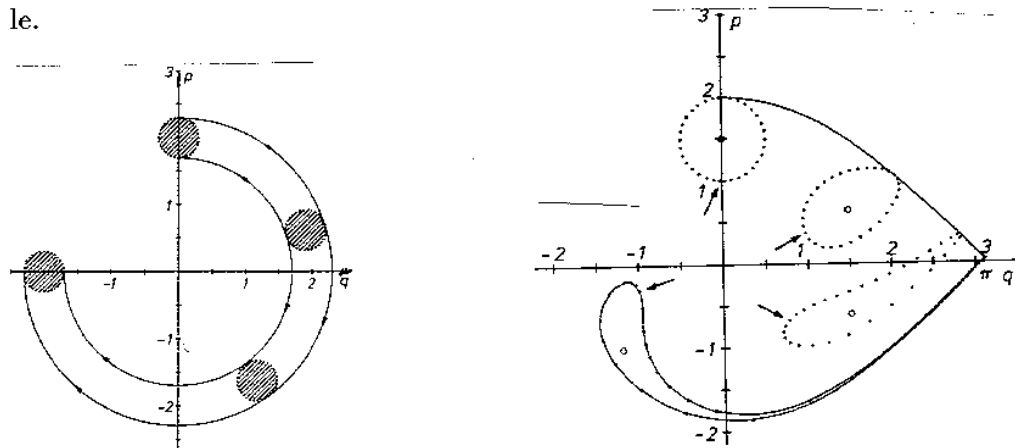


FIGURE 2.6 –

Le théorème de Liouville joue un rôle capital en *mécanique statistique*. La mécanique statistique étudie le comportement des systèmes physiques possédant un très grand nombre de degrés de liberté, comme un gaz contenant quelque 10^{23} molécules dans un volume de l'ordre d'un litre. Il est alors impossible, contrairement au cas de la mécanique classique, de spécifier l'état initial exact du système complet, c'est-à-dire de chaque molécule. Tout ce que l'on peut alors faire est de calculer la *probabilité* de trouver le système dans diverses régions de l'espace de phase. Si l'on désigne par $\rho(q, p, t) \delta V$ cette probabilité de trouver le système au temps t dans un petit volume de l'espace de phase, δV , entourant le point (q, p) , le théorème de Liouville implique la constance au cours du temps de cette probabilité sous la forme (cf. (2.73)) :

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + [\rho, H] = 0$$

2.11 La méthode d'Hamilton-Jacobi

Comme nous l'avons déjà noté, les transformations canoniques peuvent être utilisées pour faciliter la recherche de solutions des équations du mouvement de systèmes canoniques.

Une première méthode dont nous avons déjà souligné l'intérêt consiste à choisir de nouvelles coordonnées canoniques qui seront cycliques. Le nouvel hamiltonien ne dépendant plus que des nouvelles impulsions, les équations d'Hamilton sont alors aisément intégrables.

Une autre méthode consiste à rendre le nouvel hamiltonien strictement nul, si bien que *toutes* les nouvelles variables canoniques en vertu des équations d'Hamilton, sont des constantes. Considérons un système hamiltonien $H(q, p, t)$. Nous recherchons une transformation canonique (dépendant du temps) telle que le nouvel hamiltonien $K(Q, P, t)$ soit nul. Comme nous l'avons vu, quelle que soit la transformation canonique considérée, l'ancien et le nouvel hamiltoniens et la fonction génératrice, F , sont reliés par l'équation :

$$K = H + \frac{\partial F}{\partial t} \quad (2.111)$$

si bien que l'annulation de K impose la relation

$$H(q, p, t) + \frac{\partial F}{\partial t} = 0 \quad (2.112)$$

Nous choisissons pour F une fonction des anciennes coordonnées, q , des nouvelles impulsions, P , et du temps ; dans la nomenclature de la section (2.4), il s'agit d'une fonction génératrice de deuxième type, $F_2(q, P, t)$ que nous rebaptiserons ici conventionnellement $S(q, P, t)$. Utilisant les équations de transformation (2.28) associées à une fonction génératrice de deuxième type, nous avons alors :

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i} \quad (2.113)$$

si bien que l'équation (2.112) devient :

$$\boxed{H(q_1, \dots, q_f, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_f}, t) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0} \quad (2.114)$$

Cette équation est appelée l'*équation d'Hamilton-Jacobi*. Il s'agit d'une équation aux dérivées partielles du premier ordre en les variables (q_1, \dots, q_f, t) pour la fonction S . Une solution de cette équation engendre donc une transformation canonique qui conduit à des valeurs constantes des Q_i et des P_i .

L'intégration de l'équation (2.114) nous fournira seulement la dépendance de S vis-à-vis des coordonnées q_i et du temps t . En ce qui concerne sa dépendance vis-à-vis des nouvelles impulsions,

tout ce que nous savons c'est que ces nouvelles impulsions doivent être des constantes, puisque, suite à l'annulation du hamiltonien K , nous avons :

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} = 0 \quad (2.115)$$

Du point de vue mathématique, l'équation d'Hamilton-Jacobi se présente donc sous la forme d'une équation aux dérivées partielles à $f + 1$ variables. Supposons qu'il existe une solution de cette équation sous la forme :

$$S = S(q_1, \dots, q_f, \alpha_1, \dots, \alpha_{f+1}, t) \quad (2.116)$$

où les quantités $\alpha_1, \dots, \alpha_{f+1}$ désignent $f + 1$ constantes d'intégration indépendantes. Une telle solution est appelée *solution complète* de l'équation aux dérivées partielles du premier ordre. Ce n'est, en fait, pas le seul type de solution que peut posséder une telle équation : il peut exister des solutions plus générales qui dépendent d'une ou de plusieurs fonctions arbitraires plutôt que de constantes arbitraires. Il peut, d'autre part, exister plusieurs solutions complètes pour une équation donnée. L'essentiel, en ce qui nous concerne, est qu'il existe au moins *une* solution complète.

Comme la fonction S elle-même n'apparaît dans l'équation d'Hamilton-Jacobi que sous forme de dérivées partielles par rapport aux q_i et à t , si S est une solution de cette équation, alors $S + \alpha$, où α est une constante, en est une autre. On doit donc pouvoir faire apparaître une des $f + 1$ constantes d'intégration dans la solution complète (2.116) sous la forme d'une constante additive α_{f+1} et donc écrire :

$$S = S_0(q_1, \dots, q_f, \alpha_1, \dots, \alpha_f, t) + \alpha_{f+1} \quad (2.117)$$

Mais, comme seules les dérivées partielles de la fonction génératrice interviennent dans les équations de transformation, cette constante additive peut être négligée et nous appellerons *solution complète* une solution dépendant de f constantes $\alpha_1, \dots, \alpha_f$, dont aucune n'est de nature purement additive, et qui s'écrit dès lors, comme suit :

$$S = S(q_1, \dots, q_f, \alpha_1, \dots, \alpha_f, t) \quad (2.118)$$

Nous disposons alors de la liberté de choix des f constantes d'intégration et nous pouvons donc les identifier aux nouvelles impulsions canoniques, vu (2.115), c'est-à-dire :

$$P_i = \alpha_i \quad (i = 1, \dots, f) \quad (2.119)$$

Les f premières équations de transformation (2.113) peuvent alors être écrites sous la forme suivante :

$$p_i = \frac{\partial S(q, \alpha, t)}{\partial q_i} \quad (2.120)$$

où α désigne l'ensemble des f constantes $(\alpha_1, \dots, \alpha_f)$. Évaluées à l'instant initial t_0 , ces f équations relient les $f\alpha_i$ aux valeurs initiales choisies pour les q_i et les p_i , ce qui permet de déterminer les constantes d'intégration en fonction des conditions initiales choisies pour le problème considéré.

Quant aux f équations de transformation restantes (cf. (2.28)), elles prennent la forme :

$$Q_i = \frac{\partial S}{\partial P_i} = \frac{\partial S(q, \alpha, t)}{\partial \alpha_i} = \beta_i \quad (2.121)$$

où les β_i désignent f constantes, puisque les équations d'Hamilton impliquent, vu l'annulation du hamiltonien K :

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} = 0 \quad (2.122)$$

On peut déterminer les constantes β_i de manière semblable aux α_i à partir des conditions initiales, en évaluant simplement la valeur de l'expression $\frac{\partial S(q, \alpha, t)}{\partial \alpha_i}$ en $t = t_0$, compte tenu des valeurs initiales choisies pour les q_i .

Il est alors possible de résoudre les équations (2.121) pour les q_i en termes des α , β et de t :

$$q_i = q_i(\alpha, \beta, t) \quad (2.123)$$

pour autant que la condition suivante soit satisfaite :

$$dtm \left(\frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial \alpha_j} \right) \neq 0 \quad (2.124)$$

En introduisant alors la solution (2.123) pour q_i dans les relations (2.120), on obtient les impulsions p_i comme des fonctions des α , β et t :

$$p_i = p_i(\alpha, \beta, t) \quad (2.125)$$

Les relations (2.123) et (2.125) constituent alors la solution complète recherchée des équations du mouvement d'Hamilton, les $2f$ constantes α et β étant, rappelons-le, déterminées par les conditions initiales.

Notons qu'une fonction $S(q, \alpha, t)$ telle que la relation (2.124) soit vérifiée, est appelée *fonction principale d'Hamilton*. Cette fonction joue donc le rôle de générateur d'une transformation canonique conduisant à des coordonnées et des impulsions canoniques constantes : ainsi donc, la résolution de l'équation d'Hamilton-Jacobi débouche sur la résolution du problème mécanique étudié (remarque : à une constante additive près, S représente en fait l'intégrale d'action).

Considérons à présent le cas où le hamiltonien n'est pas une fonction explicite du temps. L'équation d'Hamilton-Jacobi pour S (2.114) s'écrit alors :

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H \left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i} \right) = 0 \quad (2.126)$$

On peut alors rechercher une solution de cette équation pour S de la forme

$$S(q_i, \alpha_i, t) = W(q_i, \alpha_i) - \alpha_1 t \quad (2.127)$$

Ce procédé, appelé séparation des variables, (la variable séparée est ici t) sera décrit en détail à la section suivante.

Portant l'expression (2.127) dans l'équation d'Hamilton-Jacobi (2.126), il vient :

$$H\left(q_i, \frac{\partial W}{\partial q_i}\right) = \alpha_1 \quad (2.128)$$

Cette équation aux dérivées partielles ne fait plus intervenir le temps. Elle est appelée *équation d'Hamilton-Jacobi réduite* ou simplement équation d'Hamilton-Jacobi.

Une des constantes d'intégration apparaissant dans S , α_1 en l'occurrence, est donc égale à la valeur constante de H (habituellement, H sera l'énergie, mais ce n'est pas toujours nécessairement le cas (cf. section 1.5)).

En fait, la fonction W engendre sa propre transformation canonique ($q \rightarrow Q'$) dont les propriétés sont différentes de celles de la transformation engendrée par S ($q \rightarrow Q$). Considérons une transformation canonique dans laquelle les nouvelles impulsions (P') sont toutes des constantes des mouvements, α'_i , et où, en particulier, α'_1 est la constante $H = \alpha_1$. Si la fonction génératrice de cette transformation est appelée $W(q, P')$, alors les équations de transformation s'écrivent

$$\begin{cases} p_i = \frac{\partial W}{\partial q_i} \\ Q'_i = \frac{\partial W}{\partial P'_i} = \frac{\partial W}{\partial \alpha'_i} \end{cases} \quad (2.129)$$

On notera la similitude de ces équations avec les relations (2.120) et (2.121) vérifiées par la fonction principale d'Hamilton, S . La condition essentielle caractérisant W est cependant ici que le hamiltonien H soit égal à la nouvelle impulsion, α'_1 :

$$H(q_i, p_i) = \alpha'_1 \quad (2.130)$$

Tenant compte des relations (2.129), cette condition s'écrit sous la forme d'une équation aux dérivées partielles pour W :

$$H\left(q_i, \frac{\partial W}{\partial q_i}\right) = \alpha'_1 \quad (2.131)$$

qui est identique à (2.128). La fonction W ne dépendant pas du temps, le nouveau et l'ancien hamiltoniens sont égaux, et donc : $K' = \alpha'_1 = H = \alpha_1$.

La fonction W appelée *fonction caractéristique d'Hamilton* engendre donc une transformation canonique dans laquelle toutes les nouvelles coordonnées sont cycliques ($K' = H(P'_i) = \alpha_1$). Les

équations canoniques s'écrivent alors dans les nouvelles variables :

$$\dot{P}'_i = -\frac{\partial K'}{\partial Q'_i} = 0 \rightarrow P'_i = \alpha'_i \quad (2.132)$$

$$\text{et} \quad \begin{aligned} \dot{Q}'_i &= \frac{\partial K'}{\partial \alpha'_i} = 1 & i &= 1 \\ &= 0 & i &\neq 1 \end{aligned} \quad (2.133)$$

avec pour solutions immédiates :

$$\begin{aligned} Q'_1 &= t + \beta'_1 = \frac{\partial W}{\partial \alpha_1} \\ Q'_i &= \beta'_i = \frac{\partial W}{\partial \alpha'_i} \quad (i \neq 1) \end{aligned} \quad (2.134)$$

où les β'_i ($i = 1$ à f) sont des constantes. La seule coordonnée qui ne soit pas simplement une constante des mouvements est donc Q'_1 , qui est égale au temps plus une constante ($Q'_1 = \beta'_1 + t$).

La dépendance de W vis-à-vis des anciennes coordonnées q_i est déterminée à partir de l'équation aux dérivées partielles (2.131). Une solution complète de cette équation contiendra f constantes d'intégration, dont une de nature additive. Les $(f-1)$ constantes indépendantes restantes complétées par α_1 peuvent être choisies comme les nouvelles impulsions constantes. Les f premières équations (2.129) évaluées à l'instant initial t_0 permettent d'évaluer les constantes α'_i en fonction des valeurs initiales des q_i et des p_i . Finalement, il est possible de résoudre les équations (2.134) pour les q_i en fonction des α' , β' et du temps t , ce qui complète la solution.

Notons qu'il peut être intéressant d'utiliser comme nouvelles impulsions constantes en lieu et place de α_1 et des $(f-1)$ constantes d'intégration $\alpha'_2, \dots, \alpha'_f$, un ensemble particulier de f fonctions des α'_i supposées indépendantes, que l'on désignera par γ_i . Dans ce cas, le hamiltonien dépendra en général de plus d'une de ces constantes γ_i et l'équation du mouvement pour Q_i s'écrira sous la forme suivante :

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial \gamma_i} = \nu_i \quad (2.135)$$

où les ν_i désignent f fonctions des γ_i . Les nouvelles coordonnées sont alors toutes des fonctions linéaires du temps :

$$Q_i = \nu_i t + \beta_i \quad (2.136)$$

où les β_i représentent f nouvelles constantes.

2.12 Méthode de séparation des variables et exemples

L'équation d'Hamilton-Jacobi qui est une équation aux dérivées partielles est, en général, très difficile à résoudre. Ce n'est que dans certaines circonstances particulières qu'elle peut être résolue : c'est le cas lorsqu'il est possible de séparer les variables dans cette équation, ce qui ramène la résolution du problème à des quadratures, c'est-à-dire au calcul de primitives à une dimension.

Nous allons illustrer cette méthode de séparation des variables par un premier exemple : celui de la séparation de la variable temporelle, t , dans le cas particulier où le hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps. En fait, comme nous allons le montrer, cette méthode est, dans ce cas, formellement équivalente au passage de la fonction principale d'Hamilton, S , à la fonction caractéristique, W , correspondant à la transition de l'équation d'Hamilton-Jacobi à l'équation d'Hamilton-Jacobi réduite, telle que nous l'avons décrite à la section précédente.

Le fait que le hamiltonien H ne dépend pas explicitement du temps permet de conclure à la *séparabilité* de t dans l'équation d'Hamilton-Jacobi (2.114). On peut en effet, dans ce cas, rechercher une solution pour S de la forme suivante :

$$S(q, \alpha, t) = S_0(\alpha, t) + W(q, \alpha) \quad (2.137)$$

la fonction S_0 dépendant du temps, la fonction W en étant indépendante. L'équation d'Hamilton-Jacobi (2.114) s'écrit alors en y remplaçant S par sa forme (2.137) :

$$H\left(q, \frac{\partial W}{\partial q}\right) + \frac{\partial S_0}{\partial t} = 0 \quad (2.138)$$

Le premier terme du membre de gauche de (2.138) est indépendant de t et ne peut donc dépendre que des q_i , tandis que le second terme ne peut être qu'une fonction de t . Ainsi donc, cette équation ne peut être vérifiée que si ces deux termes sont constants, avec des valeurs égales mais opposées, ce qui implique :

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} = -\alpha_1 \quad (2.139)$$

$$H\left(q, \frac{\partial W}{\partial q}\right) = \alpha_1 \quad (2.140)$$

La résolution de (2.139) fournit :

$$S_0 = -\alpha_1 t \quad (2.141)$$

tandis que la relation (2.140) n'est autre que l'équation d'Hamilton-Jacobi (réduite) pour W . On reconnaît là les relations (2.127) et (2.128) dérivées dans la section précédente. La constante α_1 du hamiltonien est appelée *constante de séparation* : elle correspond à l'énergie totale du système mécanique étudié.

A titre d'exemple, nous allons appliquer la méthode décrite au cas de l'oscillateur harmonique à un degré de liberté, pour lequel nous savons que le hamiltonien s'écrit sous la forme (cf. 2.37)) :

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$$

Cet hamiltonien est manifestement indépendant du temps. L'équation d'Hamilton-Jacobi correspondante a la forme suivante :

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + m^2 \omega^2 q^2 \right] + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

En y introduisant pour $S(q, \alpha, t)$ l'expression (2.137) avec $S_0 = -\alpha_1 t$, l'équation d'Hamilton-Jacobi réduite devient :

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial W}{\partial q} \right)^2 + m^2 \omega^2 q^2 \right] = \alpha_1$$

Notons qu'ici, il n'y a qu'une variable indépendante. On obtient donc une équation différentielle au lieu d'une équation aux dérivées partielles. Le paramètre α_1 est l'énergie totale.

Cette équation différentielle peut être intégrée aisément et on obtient pour W :

$$W = \sqrt{2m\alpha_1} \int \sqrt{1 - \frac{m\omega^2 q^2}{2\alpha_1}} dq$$

De (2.121), on tire alors, en accord avec (2.134) :

$$\beta_1 = \frac{\partial S}{\partial \alpha_1} = \frac{\partial W}{\partial \alpha_1} - t = \sqrt{\frac{2m}{\alpha_1}} \int \frac{dq}{\sqrt{1 - \frac{m\omega^2 q^2}{2\alpha_1}}} - t$$

où β_1 est une constante, c'est-à-dire, après primitivation (cf. (2.129)) :

$$Q = \frac{\partial W}{\partial \alpha_1} = t + \beta_1 = \frac{1}{\omega} \arcsin q \sqrt{\frac{m\omega^2}{2\alpha_1}}$$

d'où l'on tire l'expression de q en termes des deux constantes d'intégration α_1 et β_1 :

$$q = \sqrt{\frac{2\alpha_1}{m\omega^2}} \sin \omega(t + \beta_1)$$

qui est la solution bien connue du problème de l'oscillateur harmonique.

Quant à l'impulsion, elle est donnée par la première relation (2.129), c'est-à-dire :

$$\begin{aligned} p = \frac{\partial W}{\partial q} &= \sqrt{2m\alpha_1 - m^2 \omega^2 q^2} \\ &= \sqrt{2m\alpha_1} \cos \omega(t + \beta_1) \end{aligned}$$

On détermine alors aisément les constantes α_1 et β_1 à partir des conditions initiales, c'est-à-dire les valeurs de p et q en $t = 0$, désignées par p_0 et q_0 . On obtient

$$\alpha_1 = \frac{p_0^2 + m\omega^2 q_0^2}{2m}$$

en accord avec l'identification de α_1 à l'énergie totale, et

$$\text{tg} (\omega\beta_1) = m\omega \frac{q_0}{p_0}$$

Il est possible de trouver des cas où on peut résoudre l'équation d'Hamilton-Jacobi sans séparer la variable temporelle. Cependant, la quasi-totalité des applications utiles de la méthode d'Hamilton-Jacobi impliquent des hamiltoniens ne dépendant pas explicitement du temps et pour lesquels, par conséquent, la variable temporelle est séparable. Aussi, dans ce qui suit, nous limiterons notre étude à des systèmes pour lesquels H est une constante des mouvements et nous supposons que la séparation de la variable temporelle a été effectuée, si bien que nous ferons référence uniquement à la fonction caractéristique d'Hamilton, W , solution de l'équation d'Hamilton-Jacobi réduite.

On remarquera tout d'abord qu'une coordonnée *cyclique* est toujours séparable. Supposons, par exemple, que cette coordonnée cyclique est q_1 ; l'impulsion canonique p_1 est alors une constante, disons γ , et l'équation d'Hamilton-Jacobi (réduite) pour W s'écrit alors :

$$H \left(q_2, \dots, q_f; \gamma, \frac{\partial W}{\partial q_2}, \dots, \frac{\partial W}{\partial q_f} \right) = \alpha_1 \quad (2.142)$$

En choisissant pour W une solution séparée de la forme :

$$W = W_1(q_1, \alpha) + W'(q_2, \dots, q_f; \alpha) \quad (2.143)$$

on voit directement que l'équation (2.142) ne fait intervenir que la fonction séparée W' , tandis que W_1 est solution de l'équation suivante :

$$p_1 = \gamma = \frac{\partial W_1}{\partial q_1} \quad (2.144)$$

La constante γ est donc la constante de séparation et les solutions pour W_1 et W s'écrivent respectivement (à une constante additive triviale près) :

$$W_1 = \gamma q_1 \quad (2.145)$$

et

$$W = W' + \gamma q_1 \quad (2.146)$$

On remarquera immédiatement la ressemblance directe entre la relation (2.146) et la forme de S dans le cas où H n'est pas une fonction explicite du temps ($S = W - \alpha_1 t$). En effet, dans le cas

où H est conservé, la coordonnée temporelle t peut être considérée comme cyclique et la relation (2.139) peut être directement comparée à l'équation (2.144), ces deux équations admettant donc des solutions similaires.

Si toutes les coordonnées, sauf une, sont cycliques, alors par application répétée de la procédure qui vient d'être décrite, l'équation d'Hamilton-Jacobi peut être séparée complètement. Appelons cette fois q_1 la coordonnée non cyclique de sorte que toutes les impulsions conjuguées $p_i, i > 1$ sont constantes et égales à $\alpha_2, \dots, \alpha_f$. En suivant les mêmes étapes que dans le cas précédent où une seule coordonnée était cyclique, la forme séparée de W s'écrit comme suit (cf. (2.146)) :

$$W = \sum_{i=1}^f W_i(q_i, \alpha) = W_1(q_1, \alpha) + \sum_{i=2}^f \alpha_i q_i \quad (2.147)$$

où W_1 désigne la solution de l'équation d'Hamilton-Jacobi réduite :

$$H \left(q_1, \frac{\partial W_1}{\partial q_1}, \alpha_2, \dots, \alpha_f \right) = \alpha_1 \quad (2.148)$$

Vu qu'il s'agit là d'une équation différentielle ordinaire du premier ordre en la variable indépendante q_1 , elle peut être aisément réduite à des quadratures, ce qui permet d'obtenir finalement la solution complète pour W .

Un point essentiel au niveau des applications est évidemment la détection des coordonnées séparables dans le hamiltonien. En général, une coordonnée q_j pourra être séparée si q_j et son impulsion conjuguée p_j peuvent être regroupées au sein du hamiltonien en une fonction $f(q_j, p_j)$ qui ne contient aucune des autres variables. Si on recherche dans ce cas une fonction W de la forme :

$$W = W_j(q_j, \alpha) + W'(q_i, \alpha) \quad (2.149)$$

où q_i représente l'ensemble des q à l'exception de q_j , on obtient pour l'équation d'Hamilton-Jacobi :

$$H \left(q_i, \frac{\partial W'}{\partial q_i}, f \left(q_j, \frac{\partial W_j}{\partial q_j} \right) \right) = \alpha_1 \quad (2.150)$$

Cette équation peut, en principe du moins, être résolue pour f :

$$f \left(q_j, \frac{\partial W_j}{\partial q_j} \right) = g \left(q_i, \frac{\partial W'}{\partial q_i}, \alpha_1 \right) \quad (2.151)$$

Dans cette relation, le membre de gauche n'est fonction que de q_j et le membre de droite est, lui, indépendant de q_j . Cette équation ne peut être satisfaite que si les deux membres sont égaux à la même constante, c'est-à-dire :

$$\begin{cases} f \left(q_j, \frac{\partial W_j}{\partial q_j} \right) = \alpha_j \\ g \left(q_i, \frac{\partial W'}{\partial q_i}, \alpha_1 \right) = \alpha_j \end{cases} \quad (2.152)$$

et ainsi, la séparation de la variable q_j a été effectuée. Si, dans la seconde équation (2.152), on peut à nouveau séparer une variable et si on peut répéter cette procédure jusqu'à ce que toutes les variables aient été séparées, l'équation d'Hamilton-Jacobi associée au problème considéré est dite séparable (ou complètement séparable).

Il convient cependant de remarquer que la séparabilité de l'équation d'Hamilton-Jacobi dépend non seulement du problème mécanique étudié, mais aussi du système de variables canoniques utilisé pour le décrire. Ainsi, par exemple, comme nous allons le montrer explicitement, le problème du champ de force central est séparable en coordonnées polaires (il ne l'est par contre pas en coordonnées cartésiennes). Dans certains cas, comme celui du fameux problème des trois corps, il est, par contre, impossible de séparer l'équation d'Hamilton-Jacobi, quel que soit le système de variables choisi.

Il existe des cas où on peut affirmer la séparabilité de l'équation d'Hamilton-Jacobi si on adopte certains systèmes de variables canoniques (les 11 systèmes de coordonnées orthogonales, suivant les travaux d'Eisenhart et de Staeckel). Mais, pour un système hamiltonien quelconque, on ne connaît pas de critère simple permettant de savoir s'il existe un système de coordonnées dans lequel il est séparable et, le cas échéant, de trouver ce système de coordonnées.

Le problème de Kepler (champ de force central) et celui de l'atome d'hydrogène sont séparables, classiquement et quantiquement, en coordonnées sphériques. Il en est de même du problème de l'atome d'hydrogène en présence d'un champ électrique extérieur (effet Stark) qui est séparable, classiquement et quantiquement, en coordonnées paraboliques. Quant au problème du mouvement d'une particule dans le champ de gravitation ou dans le champ de Coulomb créé par deux masses ou deux charges fixes (problème de l'ion H_2^+), il est séparable en coordonnées elliptiques, de nouveau classiquement et quantiquement.

Nous allons illustrer la méthode générale de séparation des variables à l'aide de deux exemples où elle peut être réalisée complètement :

Exemple 1 :

Considérons l'orbite d'une particule dans un champ de force central. Nous savons que cette orbite est plane. Prenons des coordonnées polaires r, ϕ dans le plan de l'orbite. Le lagrangien et le hamiltonien s'écrivent respectivement :

$$L = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) - V(r)$$

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\phi^2}{r^2} \right) + V(r)$$

Le hamiltonien ne dépendant pas explicitement du temps, on peut écrire l'équation d'Hamilton-Jacobi réduite sous la forme :

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial W}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial W}{\partial \phi} \right)^2 \right] + V(r) = \alpha_1$$

La coordonnée ϕ est cyclique. Posons alors pour W (cf. (2.146)) :

$$W = W_\phi(\phi) + W_2(r) = \alpha_\phi \phi + W_2(r)$$

puisque $p_\phi = \frac{\partial W_\phi}{\partial \phi} = \alpha_\phi$ ($\alpha_\phi = \text{constante}$).

Il vient alors :

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{dW_2}{dr} \right)^2 + \frac{\alpha_\phi^2}{r^2} \right] + V(r) = \alpha_1$$

d'où on tire :

$$\frac{dW_2}{dr} = \sqrt{2m(\alpha_1 - V) - \frac{\alpha_\phi^2}{r^2}}$$

et donc :

$$W = \int \sqrt{2m(\alpha_1 - V) - \frac{\alpha_\phi^2}{r^2}} dr + \alpha_\phi \phi$$

Les équations de la transformation canonique correspondante s'écrivent alors (cf. (2.134)) :

$$t + \beta_1 = \frac{\partial W}{\partial \alpha_1} = \int \frac{m dr}{\sqrt{2m(\alpha_1 - V) - \frac{\alpha_\phi^2}{r^2}}}$$

et :

$$\beta_\phi = \frac{\partial W}{\partial \alpha_\phi} = - \int \frac{\alpha_\phi dr}{r^2 \sqrt{2m(\alpha_1 - V) - \frac{\alpha_\phi^2}{r^2}}} + \phi$$

La première équation fournit r en fonction de t , en conformité avec la solution habituelle du problème du champ de force central, α_ϕ étant identifié au moment cinétique. Quant à la deuxième équation, elle fournit l'équation de l'orbite (il suffit pour le vérifier d'y effectuer le changement de variable $u = \frac{1}{r}$).

Exemple 2 :

Considérons le même problème, mais en coordonnées sphériques r, θ, ϕ , c'est-à-dire en ne supposant plus a priori que l'orbite est située dans le plan $\theta = \frac{\pi}{2}$. Le lagrangien et le hamiltonien prennent les formes respectives suivantes :

$$L = \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 + r^2 \sin^2 \theta \dot{\phi}^2) - V(r)$$

et :

$$H = \frac{1}{2m}(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\phi^2}{r^2 \sin^2 \theta}) + V(r)$$

L'équation d'Hamilton-Jacobi réduite s'écrit alors :

$$\frac{1}{2m} \left(\left(\frac{\partial W}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial W}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial W}{\partial \phi} \right)^2 \right) + V(r) = E$$

avec de nouveau $\alpha_1 = E =$ énergie totale du système.

La coordonnée ϕ étant cyclique, on pose donc :

$$W(r, \theta, \phi) = W_\phi(\phi) + W'(r, \theta)$$

Il vient :

$$W_\phi = \alpha_\phi \phi$$

et :

$$\frac{1}{2m} \left\{ \left(\frac{\partial W'}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left[\left(\frac{\partial W'}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{\alpha_\phi^2}{\sin^2 \theta} \right] \right\} + V(r) = E$$

θ et $\frac{\partial W'}{\partial \theta}$ n'interviennent dans cette équation que sous la forme :

$$\left(\frac{\partial W'}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{\alpha_\phi^2}{\sin^2 \theta}$$

ce qui permet, conformément à la discussion théorique précédente, de séparer complètement l'équation d'Hamilton-Jacobi, en posant :

$$W'(r, \theta) = W_r(r) + W_\theta(\theta),$$

On obtient alors :

$$\left(\frac{dW_\theta}{d\theta} \right)^2 + \frac{\alpha_\phi^2}{\sin^2 \theta} = \alpha_\theta^2$$

et

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{dW_r}{dr} \right)^2 + \frac{\alpha_\theta^2}{r^2} \right] + V(r) = E$$

Ces équations se résolvent par quadratures :

$$W_\theta = \int \sqrt{\alpha_\theta^2 - \frac{\alpha_\phi^2}{\sin^2 \theta}} d\theta$$

$$W_r = \int \sqrt{2m[E - V(r)] - \frac{\alpha_\theta^2}{r^2}} dr$$

$\alpha_\phi = p_\phi$ représente la valeur constante du moment cinétique par rapport à l'axe polaire et α_θ désigne le module du moment cinétique total $\left[\alpha_\theta^2 = p_\theta^2 + \left(\frac{p_\phi}{\sin \theta} \right)^2 = m^2 r^4 (\dot{\theta}^2 + \sin^2 \theta \dot{\phi}^2) \right]$.