Mécanique analytique Lecture 8 : Transformations Canoniques 2

Notes de cours de Paolo De le Rios

March 24, 2021

Transformations canoniques

Pour rappel,

$$\sum_i p_i\dot{q}_i - H = \sum_i P_i\dot{Q}_i - K + \underbrace{\sum_i \frac{\partial F}{\partial Q_i}\dot{Q}_i + \sum_i \frac{\partial F}{\partial P_i}\dot{P}_i + \sum_i \frac{\partial F}{\partial q_i}\dot{q}_i + \sum_i \frac{\partial F}{\partial p_i}\dot{p}_i + \frac{\partial F}{\partial t}}_{\frac{dF}{dt}} \tag{1}$$

On cherche F de la forme $F\left(\{q_i\},\{P_i\},t\right)$ (avec une nouvelle impulsion)

Donc $\frac{\partial F}{\partial Q_i}=0 \quad \frac{\partial F}{\partial p_i}=0 \quad \forall i$ et

$$\sum_i p_i\dot{q}_i - H = \sum_i P_i\dot{Q}_i - K + \sum_i \frac{\partial F}{\partial P_i}\dot{P}_i + \sum_i \frac{\partial F}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial t} \tag{2}$$

En regardant les différents termes, on voit qu'on ne peut pas satisfaire l'égalité. Donc il faut modifier la fonction F comme suit :

$$F = -\sum_i P_iQ_i + F_2\left(\{q_i\},\{P_i\},t\right) \tag{3}$$

Alors on a

$$\sum_i p_i\dot{q}_i - H = \sum_i P_i\dot{Q}_i - K + \underbrace{\left\{-\sum_i \dot{P}_iQ_i - \sum_i P_i\dot{Q}_i + \sum_i \frac{\partial F_2}{\partial P_i}\dot{P}_i + \sum_i \frac{\partial F_2}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F_2}{\partial t}\right\}}_{\frac{dF}{dt}} \tag{4}$$

Et on peut satisfaire l'égalité avec

$$\begin{cases} p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} \\ Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \end{cases} \qquad \text{et} \qquad K = H + \frac{\partial F_2}{\partial t} \tag{5}$$

De manière similaire on peut chercher des F qui dépendent uniquement de $\left(\{p_i\},\{Q_i\}\right)$ ou de $\left(\{p_i\},\{P_i\}\right)$ (regarder le polycopié). On remarque que l'on avait $P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i}$ et $Q_i = -\frac{\partial F_1}{\partial P_i}$ qui est exactement la relation qui découle des transformations de Legendre.
En effet les différentes façon d'engendrer les transformations sont liées par des transformations de Legendre.

Pourquoi insiste-t-on sur les transformations canoniques ?

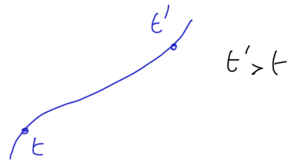
On écrit les équations canoniques de Hamilton au temps t :

$$\begin{cases} \dot{q}_i(t) = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i(t) = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{cases} \tag{6}$$

En connaissant $q_i(t)$ et $p_i(t)$, on va calculer $q_i(t')$ et $q_i(t)$:

$$\begin{cases} q_i\left(\{q_i(t)\},\{p_i(t)\},t-t'\right) \\ p_i\left(\{q_i(t)\},\{p_i(t)\},t-t'\right) \end{cases} \tag{7}$$

Donc à partir de $q_i(t)$, $p_i(t)$ on trouve $q_i(t)$, $q_i(t')$ et puisque l'on peut inverser le temps, on à la relation inverse. Mais le système obéit les équations canoniques de Hamilton aussi au temps t', donc :



L'évolution du système transforme les variables au temps t (qui obéissent les équations canoniques de Hamilton) dans les variables au temps t' (qui obéissent les équations canoniques de Hamilton)

$\boxed{\text{L'évolution du système } \textbf{est une transformation canoniques !!!}}$

Intégration à la Verlet

Si on veut intégrer numériquement les équations du mouvement, on doit discrétiser le temps (ici on le fait pour un seul degré de liberté, pour simplicité)

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} q(t+\Delta t) = q(t) + \Delta t \frac{\partial H(q,p)}{\partial p} \\ p(t+\Delta t) = p(t) - \Delta t \frac{\partial H(q,p)}{\partial q} \end{array} \right. \tag{8}$$

La question est : quels q et p on utilise dans H ? $q(t)$ et $p(t)$? $q(t+\Delta t)$ et $p(t+\Delta t)$? un mélange ?
Dans la limite (mathématique mais pas accessible à l'ordinateur), chaque choix donne le même résultat. Mais on sait que l'évolution du système est une transformation canonique. Donc un algorithme qui est une transformation canonique est plus appropriée (plus proche) à la vrai dynamique du système.
On doit le construire. D'abord on appelle :

$$\left\{ \begin{array}{l} q(t+\Delta t) = Q \\ p(t+\Delta t) = P \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} q = q(t) \\ p = p(t) \end{array} \right. \tag{9}$$

On ré-écrit d'abord : $Q = q + \Delta t \frac{\partial H}{\partial p}$ on fixe cette première égalité et on décide d'utiliser P dans H.
Donc on va chercher une fonction génératrice du type $F(p, Q, \Delta t)$. On reprend l'invariance de jauge

$$\underbrace{p\dot{q}}_{\text{pas compensé}} - H = P\dot{Q} - K + \underbrace{\frac{\partial F}{\partial p}\dot{p}}_{\text{pas compensé}} + \frac{\partial F}{\partial Q}\dot{Q} + \frac{\partial F}{\partial \Delta t} \tag{10}$$

il est évident qu'il faut ajouter un morceau

$$F(q, p, Q, P, \Delta t) = qp + F(p, Q, \Delta t) \tag{11}$$

$$\Rightarrow p\dot{q} - H = P\dot{Q} - K + q\dot{p} + \dot{q}p + \frac{\partial F}{\partial p}\dot{p} + \frac{\partial F}{\partial Q}\dot{Q} + \frac{\partial F}{\partial \Delta t} \tag{12}$$

$$q = -\frac{\partial F}{\partial p} \qquad\qquad P = -\frac{\partial F}{\partial Q} \tag{13}$$

On avait écrit $Q = q + \Delta t \frac{\partial H}{\partial p}$ qui devient $q = Q - \Delta t \frac{\partial H}{\partial p}$ et donc

$$F(p, Q) = -Qp + \Delta t H(p, Q) \tag{14}$$

qui engendre $P = p - \Delta t \frac{\partial H}{\partial Q}$, Donc dans H il faut utiliser $p(t)$ et $q(t+\Delta t) = Q$ qui est l'algorithme de Verlet !

Cas particulier de transformation canonique

$$\begin{array}{l} F_1(\{q_i\}, \{Q_i\}) = \sum_i q_i Q_i \\ \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i} = Q_i \\ P_i = -\frac{\partial F_i}{\partial Q_i} = -q_i \end{array} \right. \quad \text{donc} \quad \left\{ \begin{array}{l} Q_i = p_i \\ P_i = -q_i \end{array} \right. \end{array} \tag{15}$$

Donc, a part un changement de signe, on peut aisément échanger coordonnés et impulsions. Leur rôle, mathématiquement est le même.

Propriétés des transformations canoniques

D'abord, on définit le Jacobien $\underline{\underline{M}}$ (est une matrice) d'une transformation canonique. Dans l'espace de phase (dim $= 6N$) on définit

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} q_1 \\ \vdots \\ q_{3N} \\ p_1 \\ \vdots \\ p_{3N} \end{pmatrix} \qquad \text{et2}cm\vec{x} = \begin{pmatrix} Q_1 \\ \vdots \\ Q_{3N} \\ P_1 \\ \vdots \\ P_{3N} \end{pmatrix} \tag{16}$$

Donc la transformation est

$$\vec{y}(\vec{x}) \quad \text{et} \quad M_{ij} = \frac{\partial y_i}{\partial x_j} \tag{17}$$

La transformation inverse est

$$\vec{x}(\vec{y}) \quad \text{avec} \quad (\underline{\underline{M}}^{-1})_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial y_j} \tag{18}$$

en effet $\vec{y}(\vec{x}) = \vec{y}(\vec{x}(\vec{y}))$ donc

$$\frac{\partial y_i}{\partial y_j} = \sum_l \frac{\partial y_i}{\partial x_l}\frac{\partial x_l}{\partial y_j} = \sum_l (\underline{\underline{M}})_{il}\left(\underline{\underline{M}}^{-1}\right)_{lj} = \delta_{ij} \qquad \text{(par déf de matrice inverse)} \tag{19}$$

Il est d'ailleurs bien évidement que $\frac{\partial y_i}{\partial y_j} = \delta_{ij}$

On peut construire une nouvelle propriété à partir de $\underline{\underline{M}}$:

$$\underline{\underline{MJM}}^T = \underline{\underline{J}} \qquad \underline{\underline{M}}^T\underline{\underline{JM}} = \underline{\underline{J}} \qquad \underline{\underline{MJ}}^T = \underline{\underline{M}}^{-1}\underline{\underline{J}} \qquad \underline{\underline{M}}^T\underline{\underline{J}} = \underline{\underline{MJ}}^{-1} \tag{20}$$

Démo :
D'abord on rappelle que

$$P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \tag{21}$$

et

$$\frac{\partial P_i}{\partial q_j} = -\frac{\partial}{\partial q_j}\frac{\partial F_1}{\partial Q_i} = -\frac{\partial}{\partial Q_i}\frac{\partial F_1}{\partial q_j} = -\frac{\partial P_j}{\partial Q_i} \tag{22}$$

$$\underline{\underline{M}}_{3N+i,j} = -(\underline{\underline{M}}^{-1})_{3N+i,j} \tag{23}$$

En utilisant les autres relations on peut trouver que chaque élément de $\underline{\underline{M}}$ est associé à un élément de $\underline{\underline{M}}^{-1}$
Pour exemple

$$\frac{\partial Q_i}{\partial q_j} = -\frac{\partial}{\partial q_j}\frac{\partial F_2}{\partial P_i} = -\frac{\partial}{\partial P_i}\frac{\partial F_2}{\partial q_j} = -\frac{\partial p_j}{\partial P_i} \tag{24}$$

$$\underline{\underline{M}}_{i,j} = -(\underline{\underline{M}}^{-1})_{3N+i,3N+i} \tag{25}$$

si on écrit

$$\underline{\underline{M}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial Q}{\partial q} & \vdots & \frac{\partial Q}{\partial p} \\ \cdots & & \cdots \\ \frac{\partial P}{\partial q} & \vdots & \frac{\partial P}{\partial p} \end{pmatrix} \qquad \text{il y a quatre bloques chacun de } 3N \times 3N \tag{26}$$

$$\underline{\underline{M}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial q}{\partial Q} & \vdots & \frac{\partial q}{\partial P} \\ \cdots & & \cdots \\ \frac{\partial p}{\partial Q} & \vdots & \frac{\partial p}{\partial P} \end{pmatrix} \tag{27}$$

Les relations que l'on vient de trouver sont :

$$\frac{\partial Q}{\partial q} = \left(\frac{\partial p}{\partial P}\right)^\top \Rightarrow \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)^\top = \frac{\partial p}{\partial P} \tag{28}$$

$$\frac{\partial P}{\partial q} = -\left(\frac{\partial p}{\partial Q}\right)^\top \Rightarrow \left(\frac{\partial P}{\partial q}\right)^\top = -\frac{\partial p}{\partial Q} \tag{29}$$

Mais

$$\underline{\underline{JM}}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial q}{\partial Q} & \frac{\partial q}{\partial P} \\ \frac{\partial p}{\partial Q} & \frac{\partial p}{\partial P} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial p}{\partial Q} & \frac{\partial p}{\partial P} \\ -\frac{\partial q}{\partial Q} & -\frac{\partial q}{\partial P} \end{pmatrix} \tag{30}$$

et

$$\underline{\underline{M}}^\top \underline{\underline{J}} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)^\top & \left(\frac{\partial P}{\partial q}\right)^\top \\ \left(\frac{\partial Q}{\partial p}\right)^\top & \left(\frac{\partial P}{\partial p}\right)^\top \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\left(\frac{\partial P}{\partial q}\right)^\top & \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)^\top \\ -\left(\frac{\partial P}{\partial p}\right)^\top & \left(\frac{\partial Q}{\partial p}\right)^\top \end{pmatrix} \tag{31}$$

et similairement pour les autres.

Donc

$$\underline{\underline{M}}^\top \underline{\underline{J}} = \underline{\underline{JM}}^{-1} \Rightarrow \underline{\underline{M}}^\top \underline{\underline{JM}} = \underline{\underline{J}} \tag{32}$$

et on peut aussi prouver que $\underline{\underline{MJM}}^\top = \underline{\underline{J}}$:

de $\underline{\underline{M}}^\top \underline{\underline{J}} = \underline{\underline{JM}}^{-1}$ on prend l'inverse : $\underline{\underline{J}}(\underline{\underline{M}}^\top)^{-1} = \underline{\underline{MJ}}$ (on rappelle que $\underline{\underline{J}}^{-1} = -\underline{\underline{J}}$)

et après on multiplie à droite par $\underline{\underline{M}}^\top$:

$$\underline{\underline{J}}(\underline{\underline{M}}^\top)^{-1}\underline{\underline{M}}^\top = \underline{\underline{MJM}}^\top \qquad \Rightarrow \qquad \underline{\underline{MJM}}^\top = \underline{\underline{J}} \tag{33}$$

A partir de cette propriété on peut montrer que les crochets de Poisson sont préservées par les transformations canoniques:

$$\{f, g\}_{\vec{x}} = \vec{\nabla}_{\vec{x}} f^\top \underline{\underline{J}} \vec{\nabla}_{\vec{x}} g \tag{34}$$

Mais

$$f = f(\vec{y}) = f(\vec{y}(\vec{x})) \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial Q_i} = \sum_j \frac{\partial f}{\partial q_j} \underbrace{\frac{\partial q_j}{\partial Q_i}}_{(\underline{\underline{M}}^{-1})_{ij}} \tag{35}$$

Donc

$$\vec{\nabla}_{\vec{y}} f^\top = \vec{\nabla}_{\vec{x}} f^\top \underline{\underline{M}}^{-1} \tag{36}$$

et donc

$$\{f, g\}_{\vec{y}} = \vec{\nabla}_{\vec{y}} f^\top \underline{\underline{J}} \vec{\nabla}_{\vec{y}} g = \vec{\nabla}_{\vec{x}} f^\top \underbrace{\underline{\underline{M}}^{-1} \underline{\underline{J}} (\underline{\underline{M}}^{-1})^\top}_{=(\underline{\underline{M}}^{-\top} \underline{\underline{JM}})^{-1} = -\underline{\underline{J}}^{-1} = \underline{\underline{J}}} \vec{\nabla}_{\vec{x}} g \tag{37}$$

$$= \vec{\nabla}_{\vec{x}} f^\top \underline{\underline{J}} \vec{\nabla}_{\vec{x}} g = \{f, g\}_{\vec{x}} \tag{38}$$

Alors $\{f, g\}_{\vec{y}} = \{f, g\}_{\vec{x}}$

En particulier

$$\begin{array}{lcl} \{q_i, p_j\} = \delta_{ij} & & \{Q_i, P_j\} = \delta_{ij} \\ \{q_i, q_j\} = 0 & \Rightarrow & \{Q_i, Q_j\} = 0 \\ \{p_i, p_j\} = 0 & & \{P_i, P_j\} = 0 \end{array} \tag{39}$$

On peut vérifier si une transformation est canoniques de trois façons :

1. par intégration : à partir, pour exemple, de

$$\begin{cases} p_i = p_i\left(\{q_i\}, \{Q_i\}, t\right) \\ P_i = P_i\left(\{q_i\}, \{Q_i\}, t\right) \end{cases} \qquad \text{on essaye de trouver } F_1\left(\{q_i\}, \{Q_i\}, t\right) \tag{40}$$

si elle existe alors la transformation est, par construction, canonique. Bien évidemment on peut le faire par biais de F_2, F_3 ou F_4, selon laquelle qui est plus appropriée.

2. On calcule $\underline{\underline{M}}$ et on vérifie si $\underline{\underline{MJM}}^\top = \underline{\underline{J}}$ (ou $\underline{\underline{M}}^\top \underline{\underline{JM}} = \underline{\underline{J}}$)

3. On calcule $\{Q_i, Q_j\}, \{P_i, P_j\}, \{Q_i, P_j\}$ pour tous les couples et on vérifie qu'elles donnent les bons résultats

Matrices symplectiques

Le matrices qui obéissent la propriété $\underline{\underline{MJM}}^\top = \underline{\underline{J}}$ sont appelées "sysmplectiques" et elles forment le groupe symplectiques $S_{p_{6N}}(\mathbb{R})$ (élements des matrices réels)

1. $\underline{\underline{1}}$ est part du groupe $\underline{\underline{1J1}}^\top = \underline{\underline{J}}$ triviale
2. $\underline{\underline{M}}^{-1}$ est part du groupe

$$\underline{\underline{MJM}}^\top = \underline{\underline{J}} \underbrace{\rightarrow}_{\underline{\underline{M}}^{-1}\text{à gauche}} \underline{\underline{JM}}^\top = \underline{\underline{M}}^{-1}\underline{\underline{J}} \underbrace{\rightarrow}_{(\underline{\underline{M}}^\top)^{-1}\text{à droite}} \underline{\underline{J}} = \underline{\underline{M}}^{-1}\underline{\underline{J}}(\underline{\underline{M}}^\top)^{-1} \tag{41}$$

3. si $\underline{\underline{M}}_1$ et $\underline{\underline{M}}_2$ sont part du groupe, alors $\underline{\underline{M}}_1\underline{\underline{M}}_2$ est part du groupe

$$\underline{\underline{M_1M_2}}\underline{\underline{J}}\underline{\underline{M_1M_2}})^\top = \underline{\underline{M}}_1\underline{\underline{M_2}}\underline{\underline{J}}\underline{\underline{M_2}}^\top\underline{\underline{M_1}}^\top = \underline{\underline{M_1}}\underline{\underline{J}}\underline{\underline{M_1}}^\top = \underline{\underline{J}} \tag{42}$$

4. La multiplication est associative (évident pour des matrices)

Le déterminant d'une matrice symplectique $\underline{\underline{M}}$ est unitaire $\det\underline{\underline{\mathrm{M}}} = 1$
En effet :

$$\det(\underline{\underline{\mathrm{MJM}}}^\top) = \det\underline{\underline{\mathrm{J}}} \tag{43}$$
$$\Rightarrow \det(\underline{\underline{\mathrm{M}}}) \cdot \det(\underline{\underline{\mathrm{J}}}) \cdot \det(\underline{\underline{\mathrm{M}}}^\top) = \det\underline{\underline{\mathrm{J}}} \tag{44}$$
$$\Rightarrow \det(\underline{\underline{\mathrm{M}}}) \cdot \det(\underline{\underline{\mathrm{M}}}^\top) = 1 \tag{45}$$

Donc $[\det(\underline{\underline{\mathrm{M}}})]^2 = 1 \Rightarrow \det(\underline{\underline{\mathrm{M}}}) = \pm 1$
Mais on peut associer $\det(\underline{\underline{\mathrm{M}}})$ à une fonction génératrice $F_2(\{q_i\}, \{P_i\})$ telle que

$$F_2(\{a_i\}, \{P_i\}) = \lim_{\varepsilon \to 1} F_2(\{q_i\}, \{P_i\}, \varepsilon) \tag{46}$$

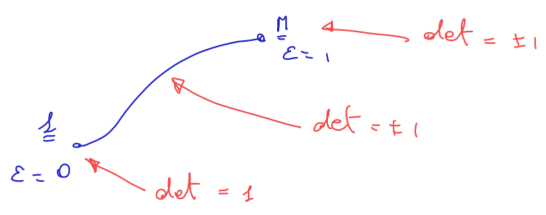
avec

$$F_2(\{q_i\}, \{Q_i\}, \varepsilon) = \varepsilon(F_2 - \sum_i q_i P_i) + \sum_i q_i P_i \tag{47}$$

Mais dans le cas $\varepsilon = 0$ on a

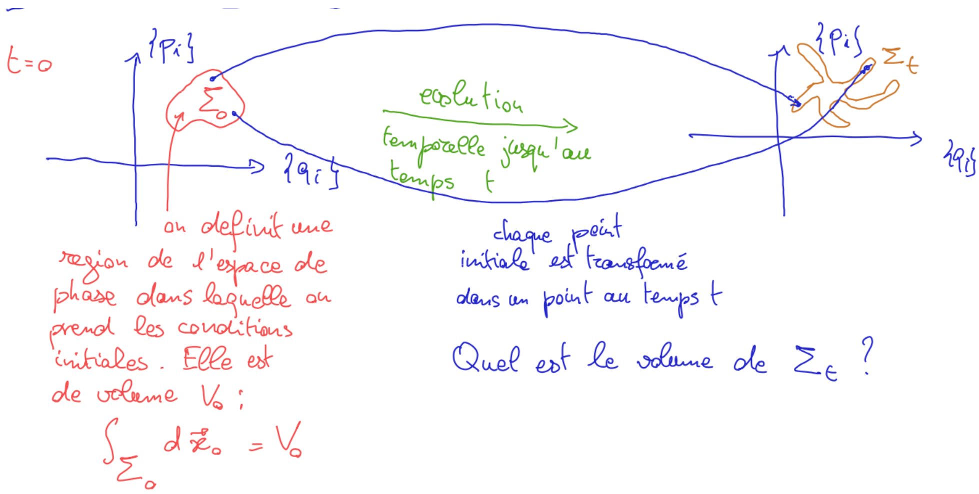
$$\begin{cases} p_i = \frac{\partial F_2(\varepsilon=0)}{\partial q_i} = P_i \\ Q_i = \frac{\partial F_2(\varepsilon=0)}{\partial P_i} = q_i \end{cases} \qquad \text{qui est l'identité} \tag{48}$$

Donc on a une matrice symplectique $\underline{\underline{M}}(\varepsilon)$ qui eset l'identité pour $\varepsilon = 0$ (donc $\det(\underline{\underline{\mathrm{M}}}(0)) = 1$)
Graphiquement, dans l'espace des matrices



Par continuité (les matrices sont contines en ε), le déterminant ne peut pas sauter de $+1$ à -1, et donc $\boxed{\det\underline{\underline{\mathrm{M}}} = 1}$

Théorème de Liouville



$$V_t = \int_{\Sigma_t} d\vec{x}_t = \int_{\Sigma_0} \overbrace{|\det \underline{\underline{M}}|}^{=1} d\vec{x}_0 = \int_{\Sigma-0} d\vec{x}_0 = V_0 \tag{49}$$

Où l'on a utilisé $\vec{x}_t = \vec{x}_t(\vec{x}_0, t)$ dans la deuxième égalité. C'est une transformation canonique ! Donc on peut changer de variables : $\vec{x}_t \to \vec{x}_0$, au prix de tenir compte du déterminant de la matrice Jacobienne, $\det\underline{\underline{M}}$

Don, un système régit par une évolution canonique préserve les volumes dans l'espace de phase.