



# Chapitre

## Équation de Hamilton

### 4.1 Notions de variables conjuguées et transformation de Legendre

L'accès au formalisme hamiltonien repose sur un changement de variables des vitesses généralisées  $\dot{q}_i$  vers les moments conjugués  $p_i$ . Historiquement, cette transition répond à la recherche d'une symétrie accrue dans les équations du mouvement, une problématique initialement abordée par Legendre.

Pour lier le formalisme lagrangien au formalisme hamiltonien, on utilise la transformation de Legendre.

#### $\pi$ Définition 1.1 : Transformation de Legendre

Soit une fonction  $f(x)$  dont la dérivée est  $u = \frac{\partial f}{\partial x}$ . On définit sa transformée de Legendre  $g(u)$  par :

$$g = -f + ux \quad (4.1)$$

Sa différentielle vérifie alors  $dg = -vdx + xdu$  (où  $v = \frac{\partial f}{\partial x}$  dans un cadre multidimensionnel), ce qui donne les relations réciproques :

$$x = \frac{\partial g}{\partial u} \quad \text{et} \quad v = -\frac{\partial g}{\partial x} \quad (4.2)$$

En appliquant cette transformation mathématique au Lagrangien  $L(q_i, \dot{q}_i, t)$ , on effectue les identifications suivantes :

- Variables de départ :  $x \equiv \dot{q}_i$  et  $y \equiv q_i$
- Nouvelle variable (moment conjugué) :  $u \equiv p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$
- Fonctions :  $f \equiv L$  et  $g \equiv H$

On définit ainsi la fonction de Hamilton, ou Hamiltonien<sup>!</sup> :

#### ! Attention

Le Hamiltonien  $H(q_i, p_i, t)$  doit impérativement être exprimé en fonction des positions  $q_i$  et des moments  $p_i$ . Il est indispensable d'inverser la relation  $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$  pour éliminer complètement les vitesses  $\dot{q}_i$  de l'expression finale.

### $\pi$ Définition 1.2 : Hamiltonien

$$H(q_i, p_i, t) = \sum_{i=1}^N p_i \dot{q}_i - L(q_i, \dot{q}_i, t) \quad (4.3)$$

En différentiant  $H$  et en utilisant les équations de Lagrange  $\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{\partial L}{\partial q_i}$ , on obtient le système d'équations différentielles du premier ordre du mouvement.

### $\pi$ Théorème 1.1 : Équations de Hamilton

L'évolution temporelle du système dans l'espace des phases est régie par les  $2N$  équations du premier ordre :

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{et} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (4.4)$$

## 4.1. Exemple : Particule dans un potentiel

Soit le lagrangien classique d'une particule :  $L = \frac{1}{2} m \dot{r}_i^2 - V(r_i)$ .

1. Calcul des moments conjugués :  $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i} = m \dot{r}_i \implies \dot{r}_i = \frac{p_i}{m}$
2. Construction du Hamiltonien :

$$H = \sum_i p_i \dot{r}_i - L = \sum_i p_i \left( \frac{p_i}{m} \right) - \left[ \frac{1}{2} m \left( \frac{p_i}{m} \right)^2 - V(r_i) \right] = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + V(r_i) \quad (4.5)$$

On retrouve ici  $H = T + V$ , l'énergie totale du système.

## 4.2 Crochets de Poisson

Soient  $f(q_\alpha, p_\alpha, t)$  et  $g(q_\alpha, p_\alpha, t)$  deux fonctions définies sur l'espace des phases.

### $\pi$ Définition 2.1 : Crochet de Poisson

$$\{f, g\} = \sum_{\alpha=1}^N \left( \frac{\partial f}{\partial q_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial p_{\alpha}} - \frac{\partial f}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial q_{\alpha}} \right) \quad (4.6)$$

### Proposition 2.1 : Propriétés algébriques

Le crochet de Poisson possède les propriétés remarquables suivantes :

- Antisymétrie :  $\{f, g\} = -\{g, f\}$
- Dérivation (Règle de Leibniz) :  $\{f, gh\} = h\{f, g\} + g\{f, h\}$
- Identité de Jacobi :  $\{f, \{g, h\}\} + \{h, \{f, g\}\} + \{g, \{h, f\}\} = 0$

### Théorème 2.1 : Évolution temporelle

L'évolution d'une observable physique  $f$  le long d'une trajectoire hamiltonienne est donnée par :

$$\frac{df}{dt} = \{f, H\} + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (4.7)$$

### Constantes du mouvement

Une grandeur  $f$  est une constante du mouvement si et seulement si  $\{f, H\} + \frac{\partial f}{\partial t} = 0$ . Si  $f$  ne dépend pas explicitement du temps, cette condition devient simplement  $\{f, H\} = 0$ .

### Théorème 2.2 : Théorème de Poisson

Si deux fonctions  $f$  et  $g$  ne dépendent pas explicitement du temps et sont des constantes du mouvement, alors leur crochet de Poisson  $\{f, g\}$  est également une constante du mouvement.

### Corollaire pour le moment cinétique

Si deux composantes du moment cinétique  $\vec{L}$  sont conservées

(ex :  $\{L_x, H\} = 0$  et  $\{L_y, H\} = 0$ ), alors la troisième composante l'est aussi, car  $\{L_x, L_y\} = L_z$ .

## 4.3 Transformations canoniques

Une transformation des variables de l'espace des phases  $(q_i, p_i) \rightarrow (Q_i, P_i)$  est dite canonique si elle préserve la forme des équations de Hamilton.

### $\pi$ Théorème 3.1 : Critère des crochets de Poisson

Une transformation est canonique si et seulement si elle préserve les crochets de Poisson fondamentaux :

$$\{Q_i, Q_j\}_{q,p} = 0, \quad \{P_i, P_j\}_{q,p} = 0, \quad \{Q_i, P_j\}_{q,p} = \delta_{ij} \quad (4.8)$$

### $\times$ Application temporelle

Si la transformation canonique est indépendante du temps ( $\frac{\partial F}{\partial t} = 0$ ), alors le nouveau Hamiltonien  $K(Q, P)$  a exactement la même forme fonctionnelle que l'ancien :  $K = H$ .

## 4.3.1 Formalisme et notation symplectique

Pour condenser les notations, on regroupe les  $2N$  coordonnées dans un seul vecteur colonne  $\xi = (q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)^T$ . On définit la matrice symplectique standard  $J$  de taille  $2N \times 2N$  par :

$$J = \begin{pmatrix} 0 & I_N \\ -I_N & 0 \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

Les équations de Hamilton et le crochet de Poisson se condensent alors sous la forme :

$$\dot{\xi}_i = \sum_j J_{ij} \frac{\partial H}{\partial \xi_j} \quad \text{et} \quad \{f, g\} = \sum_{i,j} \frac{\partial f}{\partial \xi_i} J_{ij} \frac{\partial g}{\partial \xi_j} \quad (4.10)$$

## 4.3.2 Exemple d'application

Soit la transformation définie par :

$$\begin{aligned} Q_1 &= q_1 \cos \alpha - \frac{\sin \alpha}{\beta} p_2 & Q_2 &= q_2 \cos \alpha - \frac{\sin \alpha}{\beta} p_1 \\ P_1 &= \beta q_2 \sin \alpha + p_1 \cos \alpha & P_2 &= \beta q_1 \sin \alpha + p_2 \cos \alpha \end{aligned}$$



### Méthode de vérification

Pour prouver que cette transformation est canonique, il suffit de calculer les crochets de Poisson de base et de vérifier s'ils respectent les relations  $\{Q_1, P_1\} = 1$ ,  $\{Q_2, P_2\} = 1$ ,  $\{Q_1, P_2\} = 0$ , etc.

Pour prouver que cette transformation est canonique, nous devons vérifier qu'elle préserve les crochets de Poisson fondamentaux, à savoir :

$$\{Q_1, P_1\} = 1, \quad \{Q_2, P_2\} = 1, \quad \{Q_1, P_2\} = 0, \quad \{Q_2, P_1\} = 0 \quad (4.11)$$

Pour 2 DDL :

$$\{f, g\} = \sum_{i=1}^2 \left( \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} \right) \quad (4.12)$$

Déterminons les dérivées partielles nécessaires :

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q_1}{\partial q_1} &= \cos \alpha & \frac{\partial P_1}{\partial p_1} &= \cos \alpha \\ \frac{\partial Q_1}{\partial p_1} &= 0 & \frac{\partial P_1}{\partial q_1} &= 0 \\ \frac{\partial Q_1}{\partial q_2} &= 0 & \frac{\partial P_1}{\partial p_2} &= 0 \\ \frac{\partial Q_1}{\partial p_2} &= -\frac{\sin \alpha}{\beta} & \frac{\partial P_1}{\partial q_2} &= \beta \sin \alpha \end{aligned}$$

En injectant ces expressions dans le crochet de Poisson, on obtient :

$$\begin{aligned} \{Q_1, P_1\} &= \left( \frac{\partial Q_1}{\partial q_1} \frac{\partial P_1}{\partial p_1} - \frac{\partial Q_1}{\partial p_1} \frac{\partial P_1}{\partial q_1} \right) + \left( \frac{\partial Q_1}{\partial q_2} \frac{\partial P_1}{\partial p_2} - \frac{\partial Q_1}{\partial p_2} \frac{\partial P_1}{\partial q_2} \right) \\ &= (\cos \alpha \cdot \cos \alpha - 0) + \left( 0 - \left( -\frac{\sin \alpha}{\beta} \right) \cdot \beta \sin \alpha \right) \\ &= \cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha = 1 \end{aligned}$$

De la même manière, calculons les dérivées pour la seconde paire de

variables :

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q_2}{\partial q_2} &= \cos \alpha & \frac{\partial P_2}{\partial p_2} &= \cos \alpha \\ \frac{\partial Q_2}{\partial p_2} &= 0 & \frac{\partial P_2}{\partial q_2} &= 0 \\ \frac{\partial Q_2}{\partial q_1} &= 0 & \frac{\partial P_2}{\partial p_1} &= 0 \\ \frac{\partial Q_2}{\partial p_1} &= -\frac{\sin \alpha}{\beta} & \frac{\partial P_2}{\partial q_1} &= \beta \sin \alpha \end{aligned}$$

On évalue le crochet de Poisson associé :

$$\begin{aligned} \{Q_2, P_2\} &= \left( \frac{\partial Q_2}{\partial q_1} \frac{\partial P_2}{\partial p_1} - \frac{\partial Q_2}{\partial p_1} \frac{\partial P_2}{\partial q_1} \right) + \left( \frac{\partial Q_2}{\partial q_2} \frac{\partial P_2}{\partial p_2} - \frac{\partial Q_2}{\partial p_2} \frac{\partial P_2}{\partial q_2} \right) \\ &= \left( 0 - \left( -\frac{\sin \alpha}{\beta} \right) \cdot \beta \sin \alpha \right) + (\cos \alpha \cdot \cos \alpha - 0) \\ &= \sin^2 \alpha + \cos^2 \alpha = 1 \end{aligned}$$

Calculons maintenant le crochet  $\{Q_1, P_2\}$  pour s'assurer de l'indépendance des variables :

$$\begin{aligned} \{Q_1, P_2\} &= \left( \frac{\partial Q_1}{\partial q_1} \frac{\partial P_2}{\partial p_1} - \frac{\partial Q_1}{\partial p_1} \frac{\partial P_2}{\partial q_1} \right) + \left( \frac{\partial Q_1}{\partial q_2} \frac{\partial P_2}{\partial p_2} - \frac{\partial Q_1}{\partial p_2} \frac{\partial P_2}{\partial q_2} \right) \\ &= (\cos \alpha \cdot 0 - 0 \cdot \beta \sin \alpha) + \left( 0 \cdot \cos \alpha - \left( -\frac{\sin \alpha}{\beta} \right) \cdot 0 \right) = 0 \end{aligned}$$

Par symétrie des équations, on vérifie aisément que  $\{Q_2, P_1\} = 0$ , de même que  $\{Q_1, Q_2\} = 0$  et  $\{P_1, P_2\} = 0$ .

Les relations canoniques fondamentales étant toutes satisfaites, la transformation couplée  $(q_i, p_i) \rightarrow (Q_i, P_i)$  est rigoureusement **canonique**.

## 4.4 Théorèmes de Liouville

Le théorème de Liouville décrit le comportement d'un "fluide" de points représentatifs dans l'espace des phases au cours du temps.



### Théorème 4.1 : Théorème de Liouville

Le volume d'un domaine de l'espace des phases occupé par un ensemble de systèmes en évolution est invariant au cours du temps.

En termes de densité de probabilité  $\rho(q_i, p_i, t)$  de trouver un système dans un état donné, le théorème se traduit par une équation de continuité semblable à celle d'un fluide incompressible :

$$\frac{d\rho}{dt} = \{\rho, H\} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (4.13)$$