Chaos et équation de Liouville

Frédéric Élie

mars 2014

Abstract : Selon une idée de Prigogine (*Ilya Prigogine: Les lois du chaos - Flammarion, 1994*), on peut rapprocher le formalisme quantique au formalisme issu de l'équation de Liouville, exprimée dans l'espace spectral, pour l'évolution de l'état des systèmes; ce rapprochement permettrait d'introduire l'explication du comportement chaotique dans les systèmes dynamiques, et donc la rupture de symétrie du temps (irréversibilité), fondée sur les solutions des équations d'évolution qui n'admettent plus une trajectoire du point figuratif dans l'espace des phases, contrairement à ce qui se passe pour les solutions exprimées dans les espaces de Hilbert, comme c'est le cas en mécanique quantique.

SOMMAIRE

1 – La densité de probabilité d'un état comme solution de l'équation de Liouville appartenant à un espace de Hilbert

En mécanique statistique classique (non quantique), l'évolution de l'état d'un système peut être décrite d'au moins deux façons:

– Soit en termes de trajectoire d'un point figuratif de coordonnées (p, q) dans l'espace des phases, q étant les coordonnées généralisées du système, p les moments conjugués. Les équations de la trajectoire sont alors données par les équations de Hamilton:

$$\dot{q}=\frac{\partial H}{\partial p} \quad \dot{p}=-\frac{\partial H}{\partial q}$$

où les « points » désignent la dérivée par rapport au temps. H(q,p) est le hamiltonien du système: H représente l'énergie, quantité invariante par translation du temps, lorsque le système est conservatif (comme c'est le cas pour un système isolé).

– Soit en termes de densité de probabilité ρ(q,p), dont l'évolution est solution de l'équation de Liouville:

$$j\frac{\partial \rho}{\partial t}=\hat{L}\rho \quad (1)$$

$\hat{L}$ est l'***opérateur de Liouville***:

$$\hat{L}=j\left(\frac{\partial H}{\partial q}\frac{\partial}{\partial p}-\frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial}{\partial q}\right) \quad (2)$$

Si la densité de probabilité est connue, ρ, on peut alors calculer les valeurs moyennes des grandeurs A sur l'ensemble des états accessibles au système dans l'espace des phases (Γ):

$$\langle A\rangle=\int_{\Gamma}\rho A(q,p)\,dq\,dp \quad (3)$$

Une grandeur A est donc une fonctionnelle dans l'espace des phases.
L'approche habituelle, en physique statistique classique, consiste à imposer que les valeurs propres de l'opérateur de Liouville (2) soient réelles.
Cette condition permet d'introduire sur l'espace des phases (Γ) un produit scalaire de deux fonctionnelles f et g, prenant des valeurs uniquement réelles:

$$\langle f|g\rangle=\int_{\Gamma} f^{*}(q,p)\,g(q,p)\,dq\,dp$$

L'opérateur $\hat{L}$ est alors hermitien, c'est-à-dire qu'il est égal à son auto-adjoint ([1]):

$$\hat{L}=\hat{L}^{+}$$

(Rappel: on dit qu'un opérateur $\hat{A}$ a pour adjoint $\hat{A}^{+}$ si l'on a:

$$\langle \hat{A} f|g\rangle=\langle f|\hat{A}^{+} g\rangle$$

quelles que soient les fonctionnelles f et g de (Γ)).
Il s'ensuit que l'opérateur d'évolution $\hat{U}$ associé à $\hat{L}$ est unitaire. En effet, toute solution de l'équation de Liouville (1) s'exprime comme:

$$\rho(t)=(\exp-j\hat{L}t)\rho(0)=\hat{U}(t,t_0)\rho(0) \quad (4)$$

et l'on a bien la propriété d'unitarité:

$$\hat{U}^{+}=\hat{U}^{-1}$$

ce qui définit un comportement dynamique:

$$\hat{U}(t+t')=\hat{U}(t)\hat{U}(t')$$

L'espace des fonctionnelles, définie sur l'espace des phases muni d'une densité de probabilité solution de l'équation de Liouville (1), possède donc une structure d'espace de Hilbert. Soit (u_n) une base unitaire et orthogonale (base orthonormée) de cet espace, formée d'un ensemble infini de fonctionnelles u_n. Toute fonctionnelle f se décompose sur cette base:

1 Un opérateur hermitien a ses valeurs propres réelles et est auto-adjoint.

$$f=\sum_n c_n u_n$$

où les c_n sont les « coordonnées » de f dans cette base, appelées encore coefficients de Fourier:

$$c_n=\langle u_n|f\rangle$$

avec donc: $\langle u_n|u_m\rangle=\delta_{n,m}$

A ce stade, la démarche est similaire à celle de la mécanique quantique et l'on peut employer comme pour elle les notations de Dirac pour représenter les vecteurs et les formes linéaires (c'est-à-dire les éléments du dual de l'espace de Hilbert):

$$f = |f> = \Sigma_n c_n |u_n> = \Sigma_n |u_n><u_n|f>$$

autrement dit:

$$|f> = \{\Sigma_n |u_n><u_n|\} |f>$$

ce qui entraîne la condition de fermeture sur la base:

$$\Sigma_n |u_n><u_n| = \mathbf{1} \quad (5)$$

Les $<u_n|$ appartiennent à l'espace dual dont ils forment une base. Une conséquence est que tout opérateur $\hat{A}$ qui agit sur l'espace de Hilbert des fonctionnelles est représenté par une matrice dans la base choisie:

$$\hat{A} |f> = \Sigma_n \hat{A} |u_n><u_n|f>$$

or $\hat{A} |u_n>$ est une fonctionnelle de l'espace de Hilbert, elle se décompose donc sur la base selon:

$$\hat{A} |u_n> = \Sigma_m a_{mn} |u_m>$$

avec:

$$a_{mn} = <u_m| \hat{A} u_n>$$

d'où:

$$\hat{A} |f> = \Sigma_{nm} a_{nm} |u_m><u_n|f> = \Sigma_{nm} <u_m| \hat{A} u_n>|u_m><u_n|f>$$

Posant les composantes de la matrice de $\hat{A}$:

$$a_{nm} = <u_m| \hat{A} u_n>$$

la relation précédente s'écrit:

$$\hat{A} = \Sigma_{nm} a_{nm} |u_m><u_n| \quad (6)$$

Tout opérateur s'exprime par une matrice diagonale dans sa base propre; pour l'opérateur de Liouville on obtient:

– équation aux valeurs propres: $\hat{L} |\varphi_\lambda> = \lambda|\varphi_\lambda>$, où $|\varphi_\lambda>$ vecteurs propres de $\hat{L}$ et λ valeurs propres;
– les $|\varphi_\lambda>$ forment une base orthonormale de l'espace de Hilbert. D'après (6), les composantes de $\hat{L}$ dans cette base sont donc:

$$\hat{L} = \Sigma_\lambda |\varphi_\lambda> \lambda <\varphi_\lambda| \quad (7)$$

– l'opérateur d'évolution associé est donc:

$$\hat{U} = \Sigma_\lambda |\varphi_\lambda> e^{-j\lambda t} <\varphi_\lambda| \quad (8)$$

puisque $e^{-j\lambda t}$ est valeur propre de $\hat{U}$;

Il résulte de (4) et de (8) que toute solution de l'équation de Liouville, la densité de probabilité ρ(t), considérée comme une fonctionnelle sur l'espace de Hilbert, s'écrit:

$$|\rho(t)> = \Sigma_\lambda |\varphi_\lambda> e^{-j\lambda t} <\varphi_\lambda| \rho(0)> \quad (9)$$

2 – Discussion: comment rendre le chaos compatible avec la théorie de Liouville? L'idée de Prigogine

L'inconvénient du formalisme rappelé au point 1, réside dans son incapacité à prendre en compte les ruptures de symétrie dans l'évolution des probabilités des états.

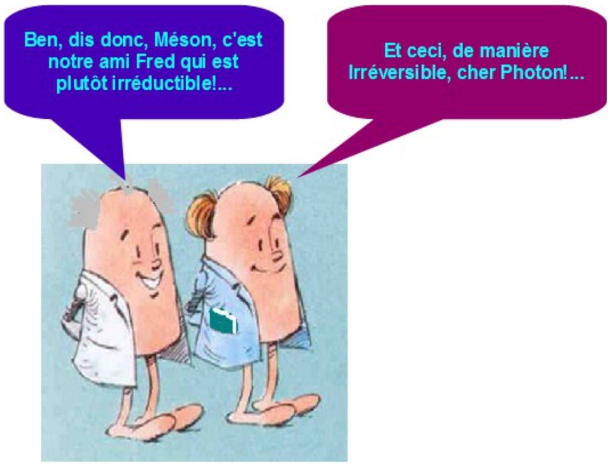
Notons que la mécanique quantique, malgré son caractère hilbertien, le permet parce que les fonctionnelles sont des fonctions d'onde, qu'elles interviennent sans perdre leurs termes de phase dans les grandeurs moyennes ([2]), et que les opérateurs associés aux grandeurs ne commutent pas toujours, et $\hat{U}$ est très différent.

Dans le formalisme de la théorie de Liouville, étant donné que les valeurs propres de $\hat{L}$ sont réelles, l'opérateur d'évolution $\hat{U}$ contient uniquement des fréquences λ correspondant à des oscillations temporelles (exp -jλt) et donc ne peut pas prévoir de rupture de symétrie du temps (irréversibilité) qui peut conduire aux situations chaotiques: c'est un obstacle à toute théorie microphysique des phénomènes irréversibles à partir de la formulation de Liouville.

Pour lever cet obstacle, I. Prigogine a proposé d'étendre les solutions de l'équation de Liouville à des espaces de Hilbert généralisés, ou « faibles », où, par définition, on exige seulement que le produit scalaire <f|g> soit fini, avec f non nécessairement fonction dans un espace de Hilbert, mais suffisamment régulière.

Les valeurs propres peuvent alors être complexes: λ = α + jβ, avec donc un terme de dissymétrie sur le temps (jβ).

Dans ce cas, les opérateurs d'évolution $\hat{U}$ n'admettent plus de représentation spectrale dans l'espace de Hilbert et on ne peut plus définir de trajectoire du point figuratif (q,p) dans l'espace des phases (Γ). Selon Prigogine: *« les systèmes dynamiques sont chaotiques quand leur opérateur d'évolution admet une représentation spectrale irréductible »*.



2 Ainsi, en théorie de Liouville: $\langle A\rangle = \int_\Gamma \rho A(q,p)\, dq dp$, tandis qu'en formalisme quantique: $\langle A\rangle = \int_H <\psi, \hat{A}\psi> dq\, dp$