4 Systèmes classiques, théorème de Liouville, principe ergodique et ensemble microcanonique

4.1 Trajectoire d'un système classique dans l'espace des phases

L'objectif principal de la mécanique statistique est la description des systèmes macroscopiques sur la base des lois microscopiques. Considérons un système macroscopique à N degrés de liberté cinématiques (par exemple un gaz à $\frac{N}{3}$ particules dans un volume tridimensionnel), alors l'espace des phases est de dimension $2N$: $(q_1, \ldots, q_N, p_1, \ldots, p_N)$ est un élément de cet espace qui décrit un état possible du système, où

les q_i représentent la position des particules

les p_i représentent la quantité de mouvement canoniquement conjuguée à la position q_i

Le Hamiltonien $H\left(\{p_i, q_i\}_{i=1}^N\right)$ est une fonction de ces coordonnées $p_i q_i$, et les équations du mouvement sont :

$$\begin{aligned} \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i} \\ \dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i}. \end{aligned}$$

L'énergie totale du système est conservée, il en résulte une contrainte qui doit être satisfaite au cours de l'évolution du système :

$$H\left(\{p_i, q_i\}_{i=1}^N\right) = E = cte$$

la trajectoire du système est restreinte à l'hypersurface d'énergie constante S_E de dimension $2N - 1$ définie par cette équation.

4.2 Théorème de Liouville

(Voir V.I.Arnold, *Les méthodes mathématiques de la mécanique classique*)

On peut défnir le volume dans l'espace des phases de façon canonique :

$$d\Omega = \prod_{i=1}^N dq_i \, dp_i = \omega^N$$

où $\omega = \sum_{i=1}^N dq_i \wedge dp_i$ est la 2-forme differentielle (bilinéaire et antisymétrique sur les déplacements infinitésimals dans l'espace des phases) symplectique (non-dégénérée en tout point et fermée : $d\omega = 0$).

Le théorème de Liouville affirme que le volume $d\Omega$ se conserve sous le flot hamiltonien v_H (donnée par $v_H^p := \dot{p}$, $v_H^q := \dot{q}$) pour n'importe quel hamiltonien $H(p, q)$. La démostration de ce théorème repose sur le fait que la divergence de la vitesse v_H dans l'espace des phases est nulle:

$$\operatorname{div} v_H = 0\,,$$

le "fluide hamiltonien" est incompressible.

La dérivée du volume $d\Omega$ le long du flot hamiltonien v_H (dérivée de Lie) est aussi nulle,

$$\mathcal{L}_{v_H} d\Omega = \operatorname{div} v_H \;\cdot d\Omega$$

donc Ω est conservé sous v_H.

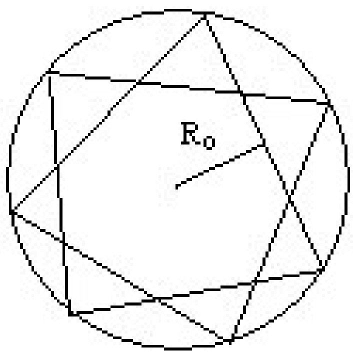
4.3 Systèmes ergodiques

Comme on a vu, la trajectoire du système dans l'espace des phases est restreinte à l'hypersurface d'énergie constante S_E. D'autres constantes du mouvement $I_i, i = 1, ..., k$ restreindront d'avantage cette trajectoire : si ces k constantes de mouvements sont indépendantes, alors la région de l'espace des phases accessible au système est de dimension $2N - 1 - k$.

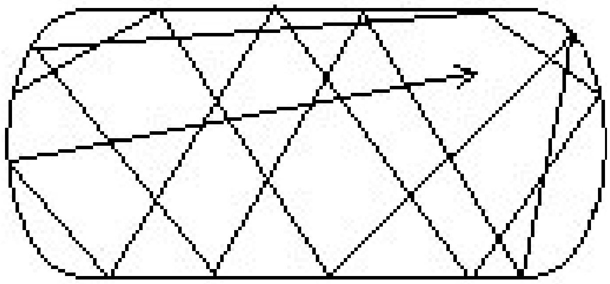
Définition: un système *ergodique* est un système dont les trajectoires peuvent traverser toutes les régions de l'espace des phases accessible (l'hypersuface déterminée par les constantes de mouvement E et $I_{i=1,...,k}$).

Exemples :

1. un billard circulaire est non ergodique : il est facile de voire que la trajectoire n'explore pas tout l'espace disponible, en effet, la distance entre le centre et le mobile reste $\geq R_0$.



2. un billard "stade" est ergodique (prouvé par L.Bunimovich en 1979).



La situation où le système est intégrable (où l'on peut résoudre les équations de mouvement) est une situation spéciale : elle requiert l'existence de N constantes du mouvement indépendantes. Dans ce cas, la trajectoire du système dans l'espace des phases est restreinte à un tore invariant à $2N - N = N$ dimensions, caractérisé par les valeurs de E et de $I_i ... I_{N-1}$.

Un système intégrable isolé ne s'équilibre pas, donc une description statistique d'un tel système est impossible. Cependant, une petite perturbation ne laisse qu'un nombre restreint de constantes de mouvement. (dans la limite $N \to \infty$, le nombre de constantes de mouvement reste fini $< N$).

Dans la limite $N \to \infty$, une perturbation infinitésimale est suffisante pour rendre le système ergodique. Cette affirmation est difficile à prouver dans le cas général (les détails de la théorie ergodique ne sont pas traités dans ce cours); on postule que les systèmes considérés dans ce cours sont ergodiques, ou bien couplés à des systèmes ergodiques.

4.4 Distribution de probabilité d'un système ergodique

Considérons un système ergodique, et, pour simplifier la discussion, supposons que la seule constante du mouvement est l'énergie E.

Pour un tel système, il existe une distribution de probabilité de trouver le système dans l'état (p, q), notée $d\mu(p, q)$, concentrée sur la surface d'énergie constante S_E ($d\mu = 0$ si $(p, q) \notin S_E$). Pour un système ergodique, dans la limite du temps infini, $T \to \infty$, cette distribution ne dépend pas des conditions initiales. On peut donc remplacer la moyenne temporelle d'une fonction $f(p, q)$ par une moyenne dans l'espace des phases:

$$\frac{1}{T} \int_0^T f(p, q)\, dt = \int f(p, q)\, d\mu \tag{1}$$

Cette condition est souvent utilisée comme définition d'un système ergodique.

Proposition:

$$d\mu = \frac{1}{\rho(E)} \cdot \delta\left(H(p, q) - E\right) \cdot d\Omega \tag{2}$$

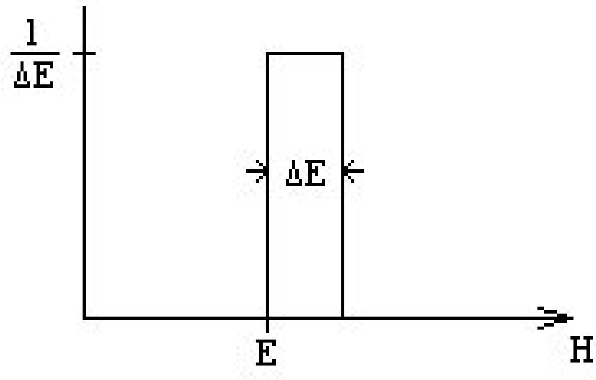
où le $\delta(\ldots)$ est la fonction delta de Dirac

$$\int f(x)\, \delta(x - x_0)\, dx = f(x_0)$$

et $\rho(E)$ est la constante de normalisation

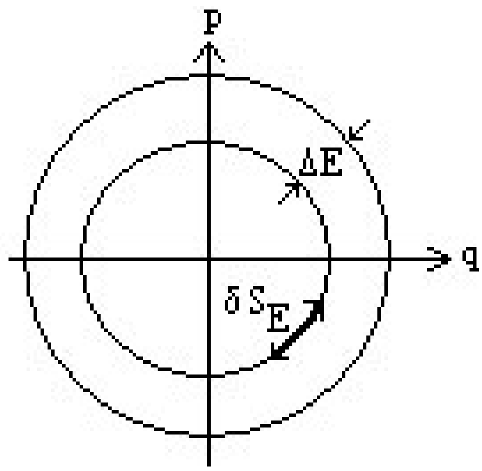
$$\rho(E) = \int \delta\left(H(p, q) - E\right) \cdot d\Omega. \tag{3}$$

Une façon de construire la distribution $\delta(H - E)$ est de considérer une certaine incertitude sur l'énergie ΔE, puis de prendre la limite $\Delta E \to 0$. Pour une incertitude ΔE, on definit la fonction $\delta_{\Delta E}(H - E)$ dont le graphe est donné ci-dessous. Dans la limite $\Delta E \to 0$, cette fonction s'approche de la fonction delta de Dirac.



$\int \delta(H-E)dH = 1$, donc l'air sous la courbe de $\delta_{\Delta E}$ doit être égale à un, ce qui détermine la hauteur de la fonction $\delta_{\Delta E}(H-E)$.

Maintenant rappelons nous que H est une fonction de (p,q) donc l'intégration se fait sur l'espace des phases. On va remplacer l'axe H de la figure ci-dessus par le plan (p,q) , on obtient ainsi le graphe suivant:



où les cercles intérieur et extérieur représentent les surfaces d'énergie constante aux énergies E et $E+\Delta E$.

La mesure d'intégration $d\mu(p,q)$ dans (1) est par définition la densité de probabilité. La probabilité du système de se trouver dans un petit élément de volume $\Delta\Omega$ de l'espace des phases autour de (p,q) est donnée par $d\mu(p,q)\cdot\Delta\Omega$.

Considérons un système avec une incertitude d'énergie ΔE autour d'une énergie E. Si la probabilité initiale de trouver le système est équidistribuée dans le domaine entre les deux cercles (voir Fig. ci-dessus), i.e.

$$d\mu = \text{const}\,\delta_{\Delta E}\left(H\left(p,q\right)-E\right)\cdot d\Omega$$

cette distribution de probabilité reste invariante au cours du temps (par le théorème de Liouville).

Dans la limite $\Delta E \to 0$, avec l'énergie du système fixée à E, la distribution de probabilité $d\mu$ prend la forme (2). Cette distribution de probabilité est invariante par rapport au flot hamiltonien, une telle distribution invariante est déterminée uniquement dans le cas d'un système ergodique.

Remarques:

1. On peut calculer des moyennes temporelles avec la formule (1) où l'intégrale est calculée sur le volume dans l'espace des phases. Si l'énergie E du systéme est fixée, cette intégrale peut être réexprimée comme celle sur la surface d'énergie constante S_E:

$$\int f(p,q)\, d\mu = \int_{S_E} f(p,q) d\mu_S$$

avec

$$d\mu_S = \frac{1}{\rho(E)} \cdot \frac{dS}{|\nabla_{p,q} H|}$$

où dS est l'aire de la surface S_E et $\nabla_{p,q} H$ est le gradient de H dans l'espace des phases. Pour prouver cette relation on utilise la proprieté de la fonction delta

$$\delta(F(x) - F(x_0)) = \frac{1}{|F'(x_0)|} \delta(x - x_0).$$

2. La signification de $\rho(E)$ est la *densité d'états* du système. Le volume de l'espace des phases correspondant à un petit élément dE autour d'une énergie E est donné par $\rho(E)\, dE$.

Le volume de l'espace de phase ≈ "le nombre d'états microscopiques". Cette correspondance est precisée dans la mécanique quantique. La dimension

$$[d\Omega] = [\prod dp_i\, dq_i] = [h]^N$$

où h est la constante de Planck (de la dimension de l'action classique).

Dans l'approximation quasiclassique de la mécanique quantique (voir *Physique Quantique III*, 4ème année), le nombre d'états quantiques correspondantes à une région dans l'espace des phases est donné par

$$M \approx \frac{\int d\Omega}{h^N}$$

Pour des calculs *classiques*, on prend $M \propto \int d\Omega$ avec un coefficient indéterminé. Ce coefficient ne joue aucun rôle pour des lois classiques.

4.5 Ensemble microcanonique

L'ensemble des systèmes à énergie fixe E avec la distribution de probabilité (2) s'appelle l'ensemble *microcanonique*.