

A PROPOS DE DIVERSES DYNAMIQUES NON HAMILTONIENNES

par M. Jean FRONTEAU

U.E.R. des Sciences Fondamentales et Appliquées, Département
de Physique - Université d'Orléans - 45045 - ORLEANS

(manuscrit reçu le 19 Octobre 1976)

RESUME. *On montre comment il est possible de faire entrer dans une même grande classe de dynamiques non hamiltoniennes des faits aussi divers que les apports de chaleur, l'approche de l'équilibre thermique, les phénomènes thermodynamiques relativistes et les états quantiques stationnaires.*

Travail exposé aux séminaires de la Fondation Louis de Broglie, le 22 Novembre et le 6 Décembre 1976.

I - INTRODUCTION.

Le problème qui nous intéresse a été, en un certain sens, posé dès l'Antiquité. En effet, pour la pensée grecque, l'idée d'éternité, de permanence, de périodicité était primordiale puisqu'elle exprimait la perfection divine. Or, remplacer au 17^{ème} siècle le mouvement circulaire uniforme par le mouvement elliptique respectant la loi des aires n'a pas été, à cet égard, un bien grand changement, de sorte que la mécanique conservative et les divers principes de conservation de la physique moderne sont la forme contemporaine de l'antique idée de Permanence. Mais l'Evolution existe. C'est d'ailleurs en introduisant le concept d'évolution (sous le nom de "mouvement") qu'Aristote a défini la Physique et, quoiqu'il se soit, lui aussi, laissé prendre au leurre de la pérennité du ciel, il nous a légué un remarquable conseil (1) : "Il est nécessaire que les principes des choses sensibles soient sensibles, que ceux des choses éternelles soient éternels, que ceux des choses corruptibles soient corruptibles ; il faut, d'une manière absolument générale, que les principes soient homogènes aux êtres qu'ils dominent". Autrement dit, il ne faut pas chercher à décrire l'Evolution en termes de Permanence. Tel est le point de vue que j'essaie de défendre en étudiant les dynamiques non hamiltoniennes. L'entreprise est difficile. On peut y distinguer plusieurs parties :

1°) dresser une sorte de catalogue des diverses formes possibles de dynamiques non hamiltoniennes ;

2°) rechercher celles qui sont déjà utilisées -plus ou moins consciemment- par la Physique théorique contemporaine, souligner leur caractère non hamiltonien et, plus précisément, démontrer leur appartenance à la classe de modèles définie ci-dessus ;

3°) tenter d'étendre l'usage des dynamiques non hamiltoniennes à de nouveaux domaines de la Physique avec, en toile de fond, l'idée que toute interaction présente vraisemblablement un caractère évolutif non hamiltonien.

Ce programme est évidemment loin d'être réalisé. Analysons l'état de la situation.

II - GÉNÉRALITÉS.

Afin d'envisager différentes façons de généraliser la mécanique hamiltonienne, soulignons-en tout d'abord les traits essentiels. Il s'agit, d'une part, d'une description différentielle des phénomènes, $\frac{dX}{dt} = F(X,t)$; d'autre part, le cadre de cette description est l'espace des phases, $X = (x,p) \in \mathbb{R}^6$; enfin, la divergence du vecteur F , $\text{div}_X F$, est identiquement nulle. On peut donc a priori se proposer de modifier ces trois points.

La Physique a déjà souvent renoncé au caractère différentiel continu de la description hamiltonienne. L'équation de Langevin du mouvement brownien est l'expression d'un modèle stochastique, et la mécanique héréditaire est une description intégral-différentielle. Je n'aborderai pas cet aspect des choses, m'en tenant ici à la description différentielle. Passons maintenant au nombre de dimensions des espaces considérés.

On peut évidemment chercher à décrire l'évolution dans un espace différent de l'espace des phases \mathbb{R}^6 . On peut tout d'abord se contenter d'un modèle dans \mathbb{R}^3 qui sera, pour certains traitements du mouvement brownien par exemple, soit l'espace de configuration, soit l'espace des vitesses. Par contre, on peut augmenter le nombre de dimensions et passer à \mathbb{R}^9 pour décrire un oscillateur rayonnant par exemple, sous la forme $-\tau x'''' + x'' + \omega_0^2 x = 0$, c'est-à-dire, en posant $v = x'$ et $\gamma = x''$,

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x \\ v \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{\omega_0^2}{\tau} & 0 & \frac{1}{\tau} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ v \\ \gamma \end{pmatrix} ; \quad \begin{pmatrix} x \\ v \\ \gamma \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^9$$

On verra de même que la notion de non-localité propre à la mécanique quantique nous amènera à introduire deux positions x et r , et à écrire des équations du type :

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x \\ r \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{pmatrix} ; \quad \begin{pmatrix} x \\ r \\ v \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^9$$

Enfin la forme covariante de tels modèles exige bien sûr de passer de $\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^6, \mathbb{R}^9$ à $\mathbb{R}^4, \mathbb{R}^8, \mathbb{R}^{12}$.

Il nous reste maintenant la possibilité de compléter le second membre des systèmes différentiels. Ordinairement, l'influence du monde extérieur est représentée par un vecteur du type hamiltonien

$$\begin{pmatrix} \text{grad}_p H \\ -\text{grad}_x H \end{pmatrix}$$

Nous verrons que, pour traiter les problèmes de diffusion, il est intéressant d'introduire un champ "à caractère de gradient", selon l'expression de R. Thom. Il apparaîtra que l'argument de ce gradient doit être la densité dans l'espace considéré. Par ailleurs, on conçoit facilement que ce qui importe physiquement n'est pas la valeur brute du gradient, mais sa valeur rapportée à la densité elle-même. Les termes diffusifs constitueront donc un vecteur de la forme suivante :

$$\frac{1}{f} \begin{pmatrix} \lambda_1 \text{grad}_x f \\ \lambda_2 \text{grad}_p f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 \text{grad}_x \text{Log } f \\ \lambda_2 \text{grad}_p \text{Log } f \end{pmatrix} ; \lambda_1, \lambda_2 = \text{Cstes.}$$

On introduira enfin un vecteur qui n'aura ni le caractère hamiltonien, ni le caractère de gradient, à savoir un vecteur de la forme :

$$\begin{pmatrix} C(x) \\ D(p) \end{pmatrix}$$

où $D(p)$ représentera un phénomène dissipatif et $C(x)$ un phénomène de compression.

Nous avons déjà vu apparaître ci-dessus, à propos de la diffusion, l'expression $\text{Log } f$. On verra que ce terme joue également un rôle important dans le traitement des phénomènes dissipatifs. Pour souligner cette importance, nous donnerons un nom à ce terme et, puisque sa moyenne statistique $\int f(\text{Log } f) dx dp$ est, au signe près, l'entropie S de Boltzmann, nous appellerons "entropie fine", et nous noterons S^f , la quantité $(-\text{Log } f)$. Remarquons enfin qu'en présence de termes non hamiltoniens, la densité f varie quand on suit le flot dans l'espace des phases. De façon précise

$$f_t = \frac{f_0}{J_t} ;$$

où J_t est le jacobien qui commande la variation temporelle des volumes dans l'espace des phases. Dans ces conditions,

$$-\text{Log } f_t = -\text{Log } f_0 + \text{Log } J_t ;$$

c'est-à-dire que l'entropie fine à l'instant t est la somme de l'entropie fine initiale et d'une "entropie fine d'évolution" $S_{(J_t)}^f = \text{Log } J_t$:

$$S_t^f = S_0^f + S_{(J_t)}^f .$$

Notons enfin que, pour parvenir à la forme classique des résultats, nous introduisons la constante de Boltzmann k dans la définition de l'entropie fine.

III - LE MODÈLE DISSIPATIF ÉLÉMENTAIRE DE LA CHALEUR.

J'ai proposé, il y a plusieurs années déjà (3)(4), de décrire un apport ou une perte de chaleur par une équation de la forme suivante, valable pour chaque point matériel du système considéré,

$$\textcircled{1} \quad \frac{dp}{dt} = -\beta(t) \frac{p}{m} \quad \beta \geq 0 ; \text{ impulsion } p \in \mathbb{R}^3$$

Dans le cadre de ce modèle, la variation d'énergie cinétique, $dE_{\text{cin}} = \frac{p}{m} dp = -\frac{2}{m} \beta(t) E_{\text{cin}} dt$, qui est la circulation élémentaire de la force dissipative $-\beta \frac{p}{m}$, représente la "chaleur" δQ^f reçue, pendant le temps dt , par toute molécule d'énergie E_{cin} . D'autre part, l'équation de continuité dans l'espace des impulsions \mathbb{R}^3 (d'où la notation f_3 pour la densité), qui s'écrit :

$$\frac{df_3}{dt} = -f_3 \operatorname{div}_p \left[-\beta(t) \frac{p}{m} \right],$$

fournit la variation d'entropie fine de toute molécule :

$$dS_{f_3} \stackrel{\text{Notre Déf.}}{=} -k d(\operatorname{Log} f_3) = -\frac{3}{m} k \beta(t) dt = \frac{3}{2} k \frac{dE_{\text{cin}}}{E_{\text{cin}}} = \frac{3}{2} k \frac{\delta Q^f}{E_{\text{cin}}},$$

où k est la constante de Boltzmann.

Il est alors facile de calculer la distribution d'équilibre thermique. Si, en effet, nous imposons à $\beta(t)$ de maintenir E_{cin} au voisinage d'une valeur moyenne $\frac{3}{2} kT$, l'approximation $E_{\text{cin}} = \frac{3}{2} kT$ est justifiée. Avec cette approximation, il vient :

$$d(\operatorname{Log} f_3) = -\frac{dE_{\text{cin}}}{kT}$$

$$f_3 = (f_3)_0 e^{-\frac{E_{\text{cin}}}{kT}}$$

On passe ensuite sans difficulté de la description fine précédente à la description macroscopique traditionnelle. Si N est le nombre de molécules du système, et $\langle \rangle$ le symbole de la moyenne dans l'espace des impulsions, on a bien, à l'équilibre,

$$\langle E_{\text{cin}} \rangle = \frac{3}{2} kT$$

D'autre part,

$$\frac{\delta Q/dt}{T} \stackrel{\text{Notre Déf.}}{=} \frac{1}{T} N \left\langle \frac{dE_{\text{cin}}}{dt} \right\rangle$$

Or, on peut démontrer de façon très générale (6), pour un système dissipatif aussi bien que pour un système conservatif, que :

$$\left\langle \frac{d}{dt} \cdot \right\rangle = \frac{d}{dt} \langle \cdot \rangle$$

d'où, à l'équilibre thermique,

$$\frac{\delta Q/dt}{T} = \frac{1}{T} N \frac{d}{dt} \langle E_{cin} \rangle = \frac{3}{2} k N \frac{dT/dt}{T}$$

Ainsi, pour une transformation réversible, suite continue d'équilibres thermiques, la forme différentielle $\frac{\delta Q}{T}$ est intégrable. On démontrerait de même qu'elle est alors égale à la différentielle de l'entropie

$$dS \stackrel{\text{Notre Déf.}}{=} N \langle dS^f \rangle$$

Ces divers résultats justifient à nos yeux la formulation microscopique (1) de la Thermodynamique. Une question reste cependant posée : comment l'équilibre thermique se réalise-t-il ?

IV - L'APPROCHE DE L'ÉQUILIBRE THERMIQUE.

Si nous postulons que la diffusion moléculaire fait croître l'entropie fine, nous sommes conduits à introduire dans l'équation (1) un terme complémentaire de la forme $\frac{\alpha}{k} \text{grad}_p S^f$, $\alpha =$ constante positive, d'où :

$$(2) \quad \boxed{\frac{dp}{dt} = -\beta(t) \frac{p}{m} - \alpha \text{grad}_p \text{Log } f_3}, \quad \alpha > 0$$

Avant de développer les calculs, remarquons que, si $\beta(t)$ atteint avec le temps une valeur constante positive β (cas du frottement intermoléculaire du mouvement brownien), nous pouvons raisonner de la façon suivante. Le terme dissipatif $\frac{\beta p}{m}$ $\beta > 0$, tend à diminuer l'entropie fine (Cf. III) alors que le terme de diffusion tend à l'augmenter. Il est donc a priori vraisemblable qu'un équilibre s'établisse, et que cet équilibre soit caractérisé par la relation :

$$\alpha \text{grad}_p \text{Log } f_3 = -\frac{\beta}{m} p$$

c'est-à-dire :

$$f_3 = \phi(t) e^{-\frac{\beta}{\alpha} \frac{p^2}{2m}}, \quad \phi(t) \text{ fonction arbitraire du temps.}$$

Mais regardons les choses de plus près. On tire de (2) la relation énergétique suivante :

$$\frac{dE_{cin}}{dt} = -2 \frac{\beta(t)}{m} E_{cin} + \frac{\alpha}{mk} p \cdot \text{grad}_p S^f$$

et, en écrivant l'équation de continuité dans l'espace des impulsions

$$\frac{df_3}{dt} = -f_3 \text{div}_p \left[-\beta(t) \frac{p}{m} - \alpha \text{grad}_p \text{Log } f_3 \right]$$

et en utilisant la relation énergétique, on obtient la dérivée de l'entropie fine :

$$\frac{dS^f_3}{dt} \stackrel{\text{Notre Déf.}}{=} -k \frac{d}{dt} \text{Log } f_3 = \frac{3}{2} k \frac{dE_{\text{cin}}/dt}{E_{\text{cin}}} + \alpha \left(\Delta_p S^f - \frac{3}{p^2} p \cdot \text{grad}_p S^f \right)$$

Quoiqu'ils généralisent ceux qui, en III, nous ont permis de passer à la Thermodynamique macroscopique -ce qui est essentiel-, les résultats précédents semblent a priori peu intéressants pour étudier l'approche de l'équilibre. Et pourtant, écrite d'une autre manière, la relation entropique est bien connue, et permet de résoudre analytiquement le problème. En effet, reprenons l'équation de continuité :

$$\frac{df_3}{dt} = -f_3 \text{div}_p \left[-\beta(t) \frac{p}{m} - \alpha \text{grad}_p \text{Log } f_3 \right], \quad f_3 = f_3(p, t)$$

Il vient :

$$\frac{\partial f_3}{\partial t} + \left[-\beta(t) \frac{p}{m} - \alpha \text{grad}_p \text{Log } f_3 \right] \cdot \text{grad}_p f_3 = -f_3 \text{div}_p \left[-\beta(t) \frac{p}{m} - \alpha \text{grad}_p \text{Log } f_3 \right]$$

et, grâce aux deux identités

$$\begin{cases} \text{div}_p [fp] = p \cdot \text{grad}_p f + f \text{div}_p p \\ \Delta_p f = f \text{div}_p \text{grad}_p \text{Log } f + (\text{grad}_p f) \cdot (\text{grad}_p \text{Log } f) \end{cases}$$

on obtient finalement :

$$\frac{\partial f_3}{\partial t} = \frac{\beta(t)}{m} \text{div}_p (f_3 p) + \alpha \Delta_p f_3$$

Or ceci est l'équation de Fokker-Planck relative à l'espace des impulsions et l'on sait (2) que, pour $\beta(t) = \beta = \text{constante positive}$ et $t \rightarrow +\infty$, la solution de cette équation tend vers la distribution d'équilibre thermique, avec $\frac{\beta}{\alpha} = \frac{1}{kT}$.

V - L'ÉQUATION DE FOKKER-PLANCK RELATIVE À L'ESPACE DES PHASES,

Reprenons le modèle précédent, (2), et écrivons-le de façon plus complète, c'est-à-dire en abandonnant l'espace des impulsions au bénéfice de l'espace des phases et en introduisant un champ de forces hamiltonien (7)(11).

En d'autres termes, postulons que :

$$\textcircled{3} \quad \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{grad}_p H \\ -\text{grad}_x H \end{pmatrix} - \beta(t) \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{p}{m} \end{pmatrix} - \alpha \begin{pmatrix} 0 \\ \text{grad}_p \text{Log } f_6 \end{pmatrix}$$

avec $f_6 = f_6(x, p, t)$.

L'équation de continuité dans l'espace des phases \mathbb{R}^6 ,

$$\frac{df_6}{dt} = - f_6 \operatorname{div}_{x,p} \left[\begin{pmatrix} \operatorname{grad}_p H \\ -\operatorname{grad}_x H \end{pmatrix} - \beta(t) \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{p}{m} \end{pmatrix} - \alpha \begin{pmatrix} 0 \\ \operatorname{grad}_p \operatorname{Log} f_6 \end{pmatrix} \right],$$

s'écrit alors, en développant la divergence et en introduisant l'expression de $\frac{dx}{dt}$ et de $\frac{dp}{dt}$ provenant de (3),

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_6}{\partial t} + (\operatorname{grad}_p H) \cdot (\operatorname{grad}_x f_6) + (-\operatorname{grad}_x H - \beta \frac{p}{m} - \alpha \operatorname{grad}_p \operatorname{Log} f_6) \cdot \operatorname{grad}_p f_6 \\ = - f_6 \left[(\operatorname{div}_x \operatorname{grad}_p H - \operatorname{div}_p \operatorname{grad}_x H) - \frac{\beta}{m} \operatorname{div}_p p - \alpha \operatorname{div}_p \operatorname{grad}_p \operatorname{Log} f_6 \right] \end{aligned}$$

Du fait des propriétés de l'hamiltonien et des deux mêmes identités qu'en IV, on obtient le résultat suivant, où { , } désigne les crochets de Poisson,

$$\frac{\partial f_6}{\partial t} + \{H, f_6\} = \alpha \Delta_p f_6 + \frac{\beta}{m} \operatorname{div}_p (f_6 p)$$

On reconnaît là l'équation de Fokker-Planck sous sa forme la plus générale, équation dont les difficultés d'intégration - dues à la présence du champ de forces extérieures - sont bien connues (2). Il nous semble cependant intéressant d'avoir obtenu cette équation en quelques lignes de calcul et, surtout, d'en avoir mis les fondements en évidence, sous la forme des trois "champs" qui figurent dans le modèle (3), à savoir le terme hamiltonien, le terme dissipatif et le terme de diffusion. On remarquera enfin que (3) est l'équation de Langevin du mouvement brownien dans laquelle le terme de diffusion aléatoire a été remplacé par un terme de diffusion continue, $\frac{\alpha}{k} \operatorname{grad}_p S^f$. Ainsi, comme nous l'avions laissé prévoir dans les généralités, l'entropie fine joue, hors de l'équilibre, un rôle aussi important que dans la Thermodynamique de l'équilibre.

VI - LA THERMODYNAMIQUE RELATIVISTE.

Contrairement au postulat courant de la dynamique relativiste, qui ne fait intervenir que des quadriforces O^α orthogonales aux quadrivites u^α , la version covariante de notre premier modèle dissipatif de la chaleur, (1), introduit un terme de quadriforce parallèle à la quadrivitesse, $-B u^\alpha = -B \frac{dx^\alpha}{d\tau}$, τ étant le temps propre. Afin de simplifier les choses, restreignons-nous ici au cas purement dissipatif, c'est-à-dire éliminons le terme O^α . Considérons donc le modèle dissipatif covariant suivant, qui est la stricte généralisation de (1).

$\frac{d}{d\tau} (m_0 u^\alpha) = - B(\tau) u^\alpha$,
 et écrivons-le dès maintenant en y faisant apparaître la phase $\begin{pmatrix} x^\alpha \\ p^\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^\alpha \\ m_0 u^\alpha \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^8$

$$\textcircled{4} \quad \boxed{\frac{d}{d\tau} \begin{pmatrix} x^\alpha \\ p^\alpha \end{pmatrix} = \frac{1}{m_0} \begin{pmatrix} p^\alpha \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{B(\tau)}{m_0} \begin{pmatrix} 0 \\ p^\alpha \end{pmatrix}} \quad (\alpha=1,2,3,4)$$

On remarquera tout d'abord que cette mécanique dissipative est une dynamique à masse au repos variable (5)(6). En effet, le modèle ci-dessus, quand on explicite la dérivée et qu'on multiplie par u_α , conduit à l'égalité :

$$m_0 \frac{du^\alpha}{d\tau} u_\alpha + u^\alpha \frac{dm_0}{d\tau} u_\alpha = - B(\tau) u^\alpha u_\alpha .$$

Grâce aux relations classiques, $u^\alpha u_\alpha = c^2$, $u_\alpha \frac{du^\alpha}{d\tau} = 0$, on en déduit l'implication suivante, laquelle est réciproque, le calcul pouvant être fait en sens inverse :

$$\frac{d}{d\tau} (m_0 u^\alpha) = - B(\tau) u^\alpha \iff \frac{dm_0}{d\tau} = - B(\tau) .$$

De même que pour $\textcircled{1}$, déduisons maintenant de $\textcircled{4}$ une relation énergétique et une relation entropique (6)(9). Le premier résulte de l'identité qui apparaît dès qu'on calcule le scalaire $u_\alpha \frac{dp^\alpha}{d\tau}$, à savoir :

$$- B c^2 = - B u^\alpha u_\alpha = - B (u_4)^2 + B u^l u_l \quad , \quad (l=1,2,3)$$

ce qui s'écrit encore, avec $u^l = \gamma v^l$, $u^4 = \gamma c = \frac{c}{\sqrt{1 - \frac{v^l v_l}{c^2}}}$,

$$- B c^2 = - B c^2 \gamma^2 + B \gamma^2 v^l v_l .$$

Après division par γ^2 et utilisation de l'égalité $\gamma \frac{dm_0}{dt} = - B$ provenant de $\frac{dm_0}{d\tau} = - B$, la relation énergétique prend finalement la forme :

$$\frac{1}{\gamma} d(m_0 c^2) = \gamma d(m_0 c^2) - \gamma v^2 dm_0 .$$

Il apparaît ainsi trois termes énergétiques dont le facteur de variation de la masse au repos, dm_0 , rappelle l'origine dissipative. Deux d'entre eux ,

$$\delta Q^{(A)} \stackrel{\text{Déf}}{=} \gamma d(m_0 c^2)$$

$$\delta Q^{(B)} \stackrel{\text{Déf}}{=} \frac{1}{\gamma} d(m_0 c^2) ,$$

sont utilisés dans les théories relativistes macroscopiques de la chaleur. Quant à nous, postulant depuis $\textcircled{1}$ la notion d'apports microscopiques de chaleur, et tenant à conserver à ces apports calorifiques leur caractère purement cinétique, nous ne pouvons les représenter que par le terme qui s'annule lorsque la particule est au repos, à savoir :

$$\delta Q^f = \gamma v^2 dm_0 .$$

On remarquera d'ailleurs que ce δQ^f s'écrit encore $-B v^l v_l \gamma dt = -B v^l v_l dt$, et qu'il s'agit donc, comme en III, de la circulation élémentaire de la force dissipative tridimensionnelle $-B v^l$.

Passons à la relation entropique. A cet effet, écrivons l'équation de continuité dans R^3 , équation qui porte sur la densité $f_3 = f_3(x^\alpha, p^\alpha, \tau)$.

$$\begin{aligned} \frac{df_3}{d\tau} &= -f_3 \operatorname{div}_{x^\alpha p^\alpha} \left[\frac{1}{m_0(\tau)} \begin{pmatrix} p^\alpha \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{B(\tau)}{m_0(\tau)} \begin{pmatrix} 0 \\ p^\alpha \end{pmatrix} \right] \\ &= -f_3 \left[\operatorname{div}_{x^\alpha} \begin{pmatrix} p^\alpha \\ m_0(\tau) \\ 0 \end{pmatrix} - \operatorname{div}_{p^\alpha} \begin{pmatrix} 0 \\ B(\tau) p^\alpha \\ m_0(\tau) \end{pmatrix} \right] \\ &= -f_3 \left[-\frac{1}{m_0} p^\alpha \frac{dm_0(\tau)}{d\tau} \frac{\partial \tau}{\partial x^\alpha} - 4 \frac{B(\tau)}{m_0(\tau)} \right] \end{aligned}$$

Du fait des relations $\frac{\partial \tau}{\partial x^\alpha} \frac{dx^\alpha}{d\tau} = \frac{d\tau}{d\tau} = 1$, et $-B = \frac{dm_0}{d\tau}$, il vient :

$$\frac{df_3}{d\tau} = -3 f_3 \frac{dm_0/d\tau}{m_0}$$

c'est-à-dire, en termes d'entropie fine,

$$\frac{dS}{d\tau} = \frac{f_3}{f_3} \text{ Notre Déf.} - k \frac{d}{d\tau} (\operatorname{Log} f_3) = 3k \frac{dm_0/d\tau}{m_0}$$

Il suffit alors de multiplier numérateur et dénominateur de ce rapport par γv^2 , puis d'introduire la pseudo-énergie cinétique $E_{\text{cin}}^* = \frac{1}{2} m_0 \gamma v^2$ et notre définition de δQ^f , pour qu'apparaisse la forme

$$dS^{f_3} = \frac{3}{2} k \frac{\delta Q^f}{E_{\text{cin}}^*}$$

qui généralise celle établie en III à l'aide du modèle dissipatif non relativiste ①.

Afin de ne pas surcharger l'exposé, nous ne développerons ici ni les notions d'équilibre et de réversibilité qui permettent de passer à la Thermodynamique relativiste macroscopique, ni les conséquences du modèle microscopique précédent sur la formule de transformation relativiste de la chaleur et de la température macroscopiques (6). Disons seulement qu'on parvient au résultat de Planck,

$$T = \frac{T_0}{\gamma}, \quad \delta Q = \frac{\delta Q_0}{\gamma} .$$

VII - LES ÉTATS STATIONNAIRES DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE.

La mécanique quantique est une dynamique dont les fondements hamiltoniens sont profondément modifiés pour tenir compte de trois faits :

a) les phénomènes quantiques ne sont pas "locaux", en ce sens que l'onde "informe" la particule de ce qui se passe hors de la position quantique considérée.

b) ils comportent un aspect aléatoire.

c) ils présentent des propriétés d'interférence.

C'est pourquoi nous postulons le modèle suivant, dans lequel on trouvera les termes hamiltoniens (écrits ici dans le cas simple d'un potentiel scalaire indépendant du temps) et trois traits répondant a priori aux exigences précédentes :

a) le modèle introduit deux vecteurs de position r et x qui, comme on le verra, permettent d'obtenir l'équation de Schrödinger, mais dont l'interprétation précise, il faut le reconnaître, est loin d'être évidente.

b) il comporte un terme de diffusion continue.

c) il compte un facteur imaginaire, dont la présence introduit des densités complexes.

Voici donc notre modèle (10)(11) :

$$\textcircled{5} \quad \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} r \\ x \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{p}{m} \\ \frac{p}{m} \\ -\text{grad}_x \phi \end{pmatrix} + i \frac{\hbar}{m} \begin{pmatrix} \text{grad}_r \text{Log} \sqrt{f_g} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

avec $\phi = \phi(x)$, et $f_g = f_g(r, x, p, t) =$ densité dans \mathbb{R}^9 , ou même dans $\mathbb{C}^3 \times \mathbb{R}^6$.

La présence d'un radical dans le terme de diffusion, qu'il eût été plus simple d'écrire $i \frac{\hbar}{2m} \text{grad}_r \text{Log} f_g$, peut étonner. Cette écriture a été choisie pour souligner le rôle essentiel que jouera par la suite la grandeur $\sqrt{f_g}$. En effet, le présent modèle conçoit la mécanique quantique comme une mécanique statistique construite sur la densité $g = \sqrt{f_g}$. La fonction d'onde d'un état stationnaire est la densité marginale

$$\psi(r) = \iint_{\Gamma_{xp}} g(r, x, p) dx dp,$$

et la somme pondérée de toute fonction $F(r, x, p)$ sur Γ_{xp} définit un opérateur agissant sur ψ , que nous noterons \hat{F} :

$$\iint_{\Gamma_{xp}} F(r, x, p) g(r, x, p) dx dp = \hat{F} \psi(r).$$

Avec ces définitions, la condition nécessaire et suffisante pour que la fonction F admette sur Γ_{xp} une moyenne constante k est que k soit valeur propre de l'opérateur \hat{F} . En effet,

$$\frac{\iint_{\Gamma_{xp}} F g dx dp}{\iint_{\Gamma_{xp}} g dx dp} = k \iff \hat{F} \psi = k \psi$$

Avant de développer les calculs, faisons comme en IV une remarque préliminaire concernant la notion d'équilibre. Disons tout d'abord que, malgré la nécessité d'une description non locale de l'évolution quantique qui se traduit par l'introduction a priori d'un vecteur $\begin{pmatrix} r \\ x \\ p \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^9$ ou $\in \mathbb{C}^3 \times \mathbb{R}^6$, les phases intéressantes seront celles pour lesquelles l'évolution résultant de (5) sera tangente au mouvement hamiltonien, c'est-à-dire les phases définies dans \mathbb{R}^9 par une position $\begin{pmatrix} r \\ x \\ p \end{pmatrix}$ et une vitesse $\begin{pmatrix} 0 \\ dx/dt \\ dp/dt \end{pmatrix}$. Or il est facile de vérifier que ces phases, que nous appellerons "états localement hamiltoniens" sont caractérisées par une certaine distribution d'équilibre -que nous choisirons stationnaire ($\frac{\partial g}{\partial t} = 0$) - et qui sera donc :

$$g = \sqrt{f_g} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \psi(x) e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot (r-x)}$$

En effet, cette densité implique $\frac{dr}{dt} = 0$, d'après (5), et la distribution marginale relative à l'espace Γ_{rx} est un Dirac :

$$\int_{\Gamma_p} g(r,x,p) dp = \psi(x) \delta(r)$$

Ainsi, du fait de la sommation en p , seules interviennent les phases pour lesquelles $x=r$.

Pour les états localement hamiltoniens, les divers opérateurs prennent alors la forme que postule d'ordinaire la mécanique quantique. En effet, grâce à δ et à ses dérivées,

$$\hat{x} \psi(r) \quad \text{Notre Déf.} \quad = \iint_{\Gamma_{xp}} x g dx dp = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\Gamma_x} x \psi(x) \left[\int_{\Gamma_p} e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot (r-x)} dp \right] dx = r \psi(r)$$

$$\hat{p} \psi(r) \quad \text{Notre Déf.} \quad = \iint_{\Gamma_{xp}} p g dx dp = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \left(-\frac{\hbar}{i}\right) \int_{\Gamma_x} \psi(x) \left[\int_{\Gamma_p} \left(-\frac{i}{\hbar} p\right) e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot (r-x)} dp \right] dx = -i\hbar \text{grad}_r \psi(r)$$

$$\widehat{p^2} \psi(r) \stackrel{\text{Notre Déf.}}{=} \iint_{\Gamma_{xp}} p^2 g dx dp = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} (-\hbar^2) \int_{\Gamma_x} \psi(x) \left[\int_{\Gamma_p} \left(-\frac{1}{\hbar^2} p^2\right) e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot (r-x)} dp \right] dx$$

$$= -\hbar^2 \Delta_r \psi(r).$$

On calculerait de même l'opérateur hamiltonien,

$$\widehat{H} \psi \stackrel{\text{Notre Déf.}}{=} \iint_{\Gamma_{xp}} H g dx dp,$$

et les résultats obtenus pour \widehat{x} , \widehat{p} , $\widehat{p^2}$ montrent qu'on trouverait pour \widehat{H} l'expression classique de l'opérateur. En s'imposant alors que la fonction H ait sur Γ_{xp} une moyenne statistique constante E , on obtiendrait évidemment l'équation de Schrödinger des états stationnaires, $\widehat{H} \psi = E \psi$, mais une autre méthode conduit à la même équation et prouve ainsi la cohérence du modèle (5). C'est ce que nous allons exposer pour terminer.

Considérons la relation entropique dans \mathbb{R}^9 , ou dans $\mathbb{C}^3 \times \mathbb{R}^6$,

$$\frac{df_g}{dt} = -f_g \operatorname{div}_{r,x,p} \left[\begin{pmatrix} p/m \\ p/m \\ -\operatorname{grad}_x \phi \end{pmatrix} + i \frac{\hbar}{m} \begin{pmatrix} \operatorname{grad}_r \operatorname{Log} \sqrt{f_g} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right],$$

ou plutôt celle qu'on en déduit pour $g = \sqrt{f_g}$, à savoir :

$$\frac{dg}{dt} = -\frac{1}{2} g \operatorname{div}_{r,x,p} \left[\begin{pmatrix} p/m \\ p/m \\ -\operatorname{grad}_x \phi \end{pmatrix} + i \frac{\hbar}{m} \begin{pmatrix} \operatorname{grad}_r \operatorname{Log} g \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right]$$

d'où, du fait de (5),

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial t} + \left(\frac{p}{m} + i \frac{\hbar}{m} \operatorname{grad}_r \operatorname{Log} g \right) \cdot \operatorname{grad}_r g + \frac{p}{m} \cdot \operatorname{grad}_x g - (\operatorname{grad}_x \phi) \cdot (\operatorname{grad}_p g) \\ = -\frac{i\hbar}{2m} g \operatorname{div}_r \operatorname{grad}_r \operatorname{Log} g. \end{aligned}$$

Grâce à la même identité qu'en IV, on obtient, en introduisant les crochets de Poisson :

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \{H(x,p), g\} = -\frac{i\hbar}{2m} \Delta_r g - \frac{i\hbar}{2m} \frac{1}{g} (\operatorname{grad}_r g)^2 - \frac{1}{m} p \cdot \operatorname{grad}_r g,$$

d'où, de nouveau du fait de ⑤,

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \{H(x,p), g\} = -\frac{i\hbar}{2m} \Delta_r g - \frac{i}{\hbar} g \left[\frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2} m \left(\frac{dr}{dt} \right)^2 \right]$$

Pour les états localement hamiltoniens stationnaires, on a : $\frac{\partial g}{\partial t} = 0$ et $\frac{dr}{dt} = 0$.
En intégrant la relation précédente sur Γ_{xp} , il reste donc seulement :

$$\iint_{\Gamma_{xp}} \{H(x,p), g\} dx dp = -\frac{i\hbar}{2m} \Delta_r \psi(r) - \frac{i}{\hbar} \widehat{\frac{p^2}{2m}} \psi(r).$$

D'autre part, toujours pour les états localement hamiltoniens, on vérifie que l'intégrale du premier membre est identiquement nulle, d'où :

$$-i \frac{\hbar}{2m} \Delta_r \psi(r) = \frac{i}{\hbar} \widehat{\frac{p^2}{2m}} \psi(r).$$

Il reste à remarquer qu'on peut calculer $\widehat{\frac{p^2}{2m}}$ de deux façons différentes. Si l'on utilise l'expression trouvée plus haut, $\widehat{\frac{p^2}{2m}} \psi(r) = -\hbar^2 \Delta_r \psi(r)$, la relation précédente devient une identité, ce qui est une preuve de cohérence, mais l'on peut aussi écrire :

$$\frac{p^2}{2m} = H(x,p) - \phi(x)$$

d'où, en passant aux opérateurs,

$$\widehat{\frac{p^2}{2m}} \psi(r) = \widehat{H(x,p)} \psi(r) - \widehat{\phi(x)} \psi(r).$$

Calculant alors que $\widehat{\phi(x)} \psi(r) = \phi(r) \psi(r)$, on obtient la relation :

$$-i \frac{\hbar}{2m} \Delta_r \psi(r) = \frac{i}{\hbar} \widehat{H} \psi(r) - \frac{i}{\hbar} \phi(r) \psi(r)$$

et, en postulant que la moyenne statistique de la fonction H sur Γ_{xp} est constante et égale à E, on trouve l'équation de Schrödinger sous forme explicite :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r \psi(r) + [\phi(r) - E] \psi(r) = 0.$$

Avant de passer au dernier sujet de cet exposé sur les mécaniques non hamiltoniennes, signalons encore que le modèle quantique précédent a été étendu ⁽¹¹⁾ au cas électromagnétique et que, si l'on y introduit un terme dissipatif, il s'applique aux états quasi-stationnaires.

VIII - LA DESCRIPTION D'UNE INTERACTION.

Tous les modèles précédents, quantiques ou non, décrivent l'évolution d'une particule soumise à un milieu extérieur représenté par un champ hamiltonien et des termes dissipatifs ou diffusifs. Un autre problème se pose : comment décrire l'interaction de deux particules ? J. Salmon a proposé à cet effet le modèle suivant ⁽⁸⁾, qui généralise (3), et dont nous allons d'abord commenter la nature :

$$\textcircled{6} \quad \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x_1 \\ p_1 \\ x_2 \\ p_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{grad}_{p_1} H \\ -\text{grad}_{x_1} H \\ \text{grad}_{p_2} H \\ -\text{grad}_{x_2} H \end{pmatrix} - \beta \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{p_1 - p_2}{m} \\ 0 \\ \frac{p_2 - p_1}{m} \end{pmatrix} - \alpha \begin{pmatrix} 0 \\ (\text{grad}_{p_1} - \text{grad}_{p_2}) \text{Log } f_{12} \\ 0 \\ (\text{grad}_{p_2} - \text{grad}_{p_1}) \text{Log } f_{12} \end{pmatrix}$$

$u = H(x_1, x_2, p_1, p_2)$ est l'hamiltonien d'interaction et $f_{12} = f_{12}(x_1, x_2, p_1, p_2, t)$ la densité[†] dans \mathbb{R}^{12} . J. Salmon, qui se place dans le cas d'un potentiel scalaire $\phi(x_1, x_2)$, fait deux hypothèses supplémentaires, $\beta = \beta(x_1, x_2) = \tau \Delta_{x_1, x_2} \phi$ et α proportionnel à β , qui éliminent les termes non hamiltoniens dans le cas d'une interaction coulombienne. Nous n'insisterons pas sur ce point. Pour nous, l'important est que les termes non hamiltoniens qui figurent dans (6) représentent une dissipation et une diffusion réciproques. Ces termes étant alors de signe opposé, on déduit de (6), par simple addition, les relations hamiltoniennes suivantes :

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} (x_1 + x_2) = \text{grad}_{p_1} H + \text{grad}_{p_2} H \\ \frac{d}{dt} (p_1 + p_2) = -\text{grad}_{x_1} H - \text{grad}_{x_2} H \end{cases}$$

Ainsi, le modèle (6) consiste à ouvrir un système qui, s'il était resté fermé, eût paru purement conservatif.

Ecrivons maintenant la relation entropique dans \mathbb{R}^{12} . Il vient tout d'abord :

[†] Remarquons que l'indice "12" représente à la fois le nombre de dimensions de l'espace des phases considéré et les deux indices des particules 1 et 2, d'où la coïncidence de la notation de J. Salmon et de la nôtre.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f_{12}}{\partial t} + (\text{grad}_{p_1} H) \cdot (\text{grad}_{x_1} f_{12}) + \left[-\text{grad}_{x_1} H - \beta \frac{p_1 - p_2}{m} - \alpha (\text{grad}_{p_1} - \text{grad}_{p_2}) \text{Log } f_{12} \right] \cdot \text{grad}_{p_1} f_{12} \\ & + (\text{grad}_{p_2} H) \cdot (\text{grad}_{x_2} f_{12}) + \left[-\text{grad}_{x_2} H - \beta \frac{p_2 - p_1}{m} - \alpha (\text{grad}_{p_2} - \text{grad}_{p_1}) \text{Log } f_{12} \right] \cdot \text{grad}_{p_2} f_{12} \\ & = -f_{12} \left[-\frac{\beta}{m} \text{div}_{p_1} p_1 - \alpha \text{div}_{p_1} \text{grad}_{p_1} \text{Log } f_{12} + \alpha \text{div}_{p_1} \text{grad}_{p_2} \text{Log } f_{12} \right. \\ & \quad \left. - \frac{\beta}{m} \text{div}_{p_2} p_2 - \alpha \text{div}_{p_2} \text{grad}_{p_2} \text{Log } f_{12} + \alpha \text{div}_{p_2} \text{grad}_{p_1} \text{Log } f_{12} \right]. \end{aligned}$$

Puis, en regroupant convenablement les termes et en utilisant les crochets de Poisson et les trois identités suivantes dont deux ont déjà été employées en IV,

$$\left\{ \begin{aligned} \text{div}_p (fp) &= p \cdot \text{grad}_p f + f \text{div}_p p \\ \Delta_p f &= f \text{div}_p \text{grad}_p \text{Log } f + (\text{grad}_p f) \cdot (\text{grad}_p \text{Log } f) \\ \text{div}_{p_1} \text{grad}_{p_2} f &= f \text{div}_{p_1} \text{grad}_{p_2} \text{Log } f + (\text{grad}_{p_1} f) \cdot (\text{grad}_{p_2} \text{Log } f) \end{aligned} \right. ,$$

on obtient l'équation de J. Salmon (8) :

$$\frac{\partial f_{12}}{\partial t} + \{H, f_{12}\}_{x_1 p_1} + \{H, f_{12}\}_{x_2 p_2} = (\text{div}_{p_1} - \text{div}_{p_2}) \left[\frac{\beta}{m} f_{12} (p_1 - p_2) + \alpha (\text{grad}_{p_1} - \text{grad}_{p_2}) f_{12} \right]$$

Ce résultat relativement simple est très important. Il représente en effet l'évolution profonde d'un système de particules qui, si on avait tenu à ne l'étudier que fermé, eût semblé parfaitement hamiltonien. Sans doute est-ce là l'origine de la réticence de la Physique traditionnelle vis à vis des modèles non hamiltoniens, modèles dont l'utilité ne s'impose pas a priori. Cette remarque, qui reprend un thème que je défends depuis longtemps (3), me servira aujourd'hui de conclusion.

==:==:

REFERENCES

De nombreux travaux sont en rapport, plus ou moins étroit, avec le point de vue exposé dans le présent article. On en trouvera la référence dans mes autres publications, surtout dans (6) et (11).

-
- (1) P. DUHEM, Le système du Monde, tome I, Hermann, Paris.
 - (2) S. CHANDRASEKHAR, Stochastic problems in Physics and Astronomy. Dans "Selected papers on noise and stochastic processes", N.Wax Ed., Dover publications, New-York (1954).
 - (3) J. FRONTEAU, L'entropie et la physique moderne, CERN, MPS/Int. MU/EP 66-5 (1966).
 - (4) " Apports de chaleur et mécanique dissipative, Nuovo Cimento 2 B, 107 (1971) [Addendum 4 B, 347 (1971)].
 - (5) " L'entropie fine, la mécanique dissipative et la notion de masse au repos variable, Ann. Inst. Henri Poincaré 18 A, 99 (1973).
 - (6) " Vers une description non conservative de l'Evolution en physique, Monographie de 100 pages, Université d'Orléans (1974).
 - (7) " Une dynamique associée à l'équation cinétique Frey-Salmon, Comptes-Rendus 280 A, 1405 (1975).
 - (8) J. SALMON, Une nouvelle hypothèse d'irréversibilité, Comptes-Rendus 280 A, 1559 (1975).
 - (9) J. FRONTEAU, Et si la chaleur était d'essence non covariante ? Ann. Inst. Henri Poincaré 22 A, 63 (1975).
 - (10) " L'équation de Schrödinger déduite d'un modèle de diffusion continu, Comptes-Rendus 281 A, 123 (1975).
 - (11) J. FRONTEAU, A. TELLEZ-ARENAS, A new interpretation of the Schrödinger equation, and its extension to dissipative phenomena, A paraître dans le Nuovo Cimento.