Théorie géométrique de Souriau de l'information quantique

Frédéric BARBARESCO[1]

[1] THALES Land & Air Systems, 19/21 Avenue Morane Saulnier, 78140 Velizy-Villacoublay, France

Résumé – Nous exposons ici le modèle géométrique de l'Information Quantique, tel qu'introduit par Jean-Marie Souriau. Ce dernier a élaboré le concept de quantification géométrique en introduisant la notion de variété quantique fibrée en cercle au-dessus d'une variété symplectique, laquelle est une orbite coadjointe. Il devient ainsi possible d'étendre la définition de la fonction hamiltonienne, permettant de caractériser les « états quantiques » comme des fonctions complexes définies sur le groupe G, et satisfaisant à deux inégalités précises. Pour ce faire, la construction de Gelfand-Naimark-Segal est utilisée pour établir un lien entre l'état quantique, la représentation unitaire du groupe, et le vecteur unitaire dans l'espace de Hilbert. Ces axiomes garantissent l'interprétation probabiliste de la mécanique quantique, où l'état m associe une loi de probabilité à toute « observable » du groupe G. Cela permet, dans le cadre linéaire, de garantir les relations d'incertitude énoncées par Heisenberg. La convexité de l'espace des états produit des états quantiques dits « mixtes », dont l'existence s'avère indispensable pour la thermodynamique quantique, notamment en ce qui concerne les états de Gibbs.

Abstract – We present here the geometric model of Quantum Information, as introduced by Jean-Marie Souriau. He developed the concept of geometric quantisation by introducing the notion of a quantum fibre bundle over a symplectic manifold, which is a coadjoint orbit. This allows for the extension of the definition of the Hamiltonian function, enabling the characterisation of "quantum states" as complex functions defined on the group G, satisfying two specific inequalities. To achieve this, the Gelfand-Naimark-Segal construction is employed to establish a connection between the quantum state, the unitary representation of the group, and the unit vector in the Hilbert space. These axioms ensure the probabilistic interpretation of quantum mechanics, where the state m associates a probability measure with each "observable" of the group G. In the linear case, this guarantees the Heisenberg uncertainty relations. The convexity of the state space produces so-called "mixed" quantum states, whose existence is essential for quantum thermodynamics, particularly concerning Gibbs states.

1 Préambule

Les travaux de Souriau sur la « Structure des systèmes dynamiques » et son modèle symplectique de la mécanique et de la mécanique statistique ont été élaborés en préambule de son modèle géométrique de la mécanique quantique, comme le révèle son interview : « *En 1958, je suis rentré en France, à Marseille. Et là, je me suis retrouvé confronté à des physiciens théoriciens et aux problèmes de la mécanique quantique qui m'avaient perturbé pendant mes études, comme tous les étudiants, je crois. J'ai réalisé que la géométrie symplectique était un outil indispensable à la mécanique quantique. Et qu'en fait, elle était même plus appropriée à la mécanique quantique qu'à la mécanique classique. Lorsque j'ai écrit mon livre sur le sujet, je voulais écrire un livre sur la mécanique quantique et j'ai réalisé que je devais présenter en détail toute la mécanique classique, ainsi que la mécanique statistique. Ce n'étaient pas des théories étrangères puisqu'elles étaient reliées par la structure symplectique et par les symétries. On prend deux particules qui tournent l'une autour de l'autre selon les lois de Newton, puis on prend un atome d'hydrogène dont on ne voit que le spectre. Ce sont deux objets qui n'ont a priori rien à voir l'un avec l'autre ; mais ils ont des symétries symplectiques en commun. Une porte est entrouverte.* ». ; Ces travaux peu connus ont été publiés par Souriau dans l'ouvrage édité par Yvonne Choquet-Bruhat « Physique quantique et géométrie » en 1986 en l'honneur d'André Lichnerowicz [1] et dans les actes du colloque du Collège de France « La Mécanique analytique de Lagrange et son héritage » en 1988 [2].

2 Mécanique quantique

Jean-Marie Souriau proposa un algorithme de « quantification » pour un système dynamique, dont l'espace des mouvements X est doté d'une préquantification Ξ et d'un groupe générateur S. La mécanique classique permet d'en déduire la structure symplectique de X, qui est toujours une orbite coadjointe. Toutefois, tous les systèmes dynamiques réels ne possèdent pas un groupe générateur. Il devient alors nécessaire de ne plus se limiter à l'imposition d'un groupe de Lie, mais d'adopter une approche plus générale, celle des « groupes difféologiques », lesquels génèrent des groupes pour toutes les variétés symplectiques connexes. Souriau réinterprète les états en mécanique statistique à travers une axiomatique des états quantiques, fondée sur des fonctions complexes sur le groupe G, définies sur l'extension quantique de l'espace des mouvements et sur les solutions d'un ensemble d'inéquations. Cette axiomatique permet de redéfinir de manière mathématiquement rigoureuse les concepts fondamentaux de la mécanique quantique, tels que l'interprétation probabiliste, les relations d'incertitude, les espaces de Hilbert, les opérateurs, les représentations unitaires, les états mixtes, etc.

2.1 Eléments d'analyse harmonique

Soient G un groupe et m une fonction $G \to \mathbb{C}$. Une autre fonction n est dit subordonnée de m s'il existe une famille finie de constantes complexes C_j et d'élément $g_j \in G$ tels que $\forall g \in G$:

$$n(g) = \sum_{j,k} \bar{C}_j C_k m\left(g_j^{-1} g g_k\right) \qquad (1)$$

La subordination est réflexive et transitive. m est de « *type positif* » si toutes les subordonnées de m prennent une valeur ≥ 0 en l'élément neutre e du groupe G. m est de « *type positif* » si seulement si $\forall g_j \in G$, la matrice $\left[m\left(g_j^{-1} g g_k\right)\right]_{j,k}$ est hermitienne positive. m est de « type positif » si seulement si il existe un espace de Hilbert $\mathbf{H}$, une représentation u de G dans le groupe unitaire $U(\mathbf{H})$ et un vecteur $\psi \in \mathbf{H}$ tels que pour $\forall g \in G$:

$$m(g) = \langle \psi, u(g)\psi \rangle \qquad (2)$$

A une équivalence unitaire près, le triplet $(\mathbf{H}, u, \psi)$ est caractérisé par la fonction m. Toute fonction m de type positif pour $\forall g \in G$:

$$m(e) \geq 0 \ , \ |m(g)| \leq m(e) \ , \ m\left(g^{-1}\right) = \bar{m}(g) \qquad (3)$$

Le produit de deux fonctions de type positif est de type positif. Une fonction n, complexe sur G, est dite conditionnellement de type positif si et seulement si :

$$n\left(g^{-1}\right) = \bar{n}(g) \text{ et } \sum_k C_k = 0 \Rightarrow \sum_{j,k} \bar{C}_j C_k n\left(g_j^{-1} g_k\right) \geq 0$$

équivalente à $\forall a \geq 0$, $m(g) = \exp(an(g))$ est de type positif.

Par exemple, soit $G = X \times \mathbb{R}$ avec X un espace de Hilbert complexe, la fonction hermitienne se décompose $\langle x, y \rangle = g(x,y) + i\sigma(x,y)$ avec la loi de groupe $(x,s)(x',s') = (x + x', s + s' + \sigma(x,x'))$. Si $\sum_k C_k = 0$, on en déduit que la fonction $n(x,s) = is - \lambda \langle x, x \rangle$ est de type positive si et seulement si $\lambda \geq \frac{1}{2}$ car elle vérifie :

$$\sum_{j,k} \bar{C}_j C_k n\left(\left(x_j, s_j\right)^{-1}\left(x_k, s_k\right)\right) = \left(\lambda - \frac{1}{2}\right)\left\|\sum_k C_k x_k\right\|^2 + \left(\lambda + \frac{1}{2}\right)\left\|\sum_k \bar{C}_k x_k\right\|$$

$m(x,s) = \exp(is - \langle x, x \rangle)$ est de type positif sur G.

On appel **« états » d'un groupe** G, les fonctions de type positif sur , les fonctions de type positif sur G qui sont normalisées par $m(e) = 1$, en vérifiant $g, g' \in G$:

$$\begin{aligned} &|m(gg') - m(g)m(g')| \leq \sqrt{1 - |m(g)|^2}\sqrt{1 - |m(g')|^2} \\ &|m(g) - m(g')| \leq \sqrt{2\,\mathrm{Re}\left(1 - m\left(g^{-1}g'\right)\right)} \end{aligned} \qquad (4)$$

Soit m un état d'un groupe G, alors les deux propriétés suivantes sont équivalentes :

- m est un point extrémal du convexe K des états
- La représentation u associée à m est irréductible

Un « espace statistique » (X, G) est tout ensemble X muni d'un groupe G de fonctions sur le Tore T, groupe $U(1)$ des nombres complexes de module 1 : $g : X \to T \in U(1)$. Le groupe G s'appelle **« groupe statistique » de** X**.** On peut associer une C*-algèbre commutative par l'ensemble des **fonctions d'essai sur** X (les limites uniformes de combinaisons linéaires complexes d'éléments de G). Soit (X, G) un espace statistique, **un « état statistique » de** X est toute fonction $G \to \mathbb{C}$ qui vérifie, pour toute famille finie C_k de complexes et d'éléments $g_k \in G$ **:**

$$0 \leq \sum_{j,k} \bar{C}_j C_k m\left(g_j^{-1} g_k\right) \leq \underset{x \in X}{Sup}\left|\sum_k C_k g_k(x)\right|^2 \text{ et } m(e) = 1$$

avec e élément neutre de G, fonction constante prenant la valeur 1.

Théorème de Souriau : *L'ensemble des états statistiques de* X *est une face faiblement compacte de convexe des états de* G.

Pour qu'une fonction complexe m définie sur G soit un **état statistique**, il faut et il suffit qu'il existe une fonction μ telle que

- μ prolonge m à l'ensemble des fonctions d'essai f
- μ est C-linéaire,
- μ est positive : $\mu(f) \geq 0 \ \ \forall f \geq 0$
- μ bornée, norme 1: $|\mu(f)| \leq \sup_x |f(x)|$ et $\mu(e) = 1$

Ce prolongement est unique.

On peut définir une **« catégorie des états statistiques »** par l'image A d'un état statistique m de X, $A(m)(g') = m(g' \circ A)$, en définissant **le morphisme statistique** A, toute application $X \to X'$ telle que : $g' \in G' \Rightarrow g' \circ A \in G$. Les états statistiques sont contravariants : $[B \circ A](m) = B(A(m))$.

Soit X un espace topologique localement compact et le groupe statistique G des applications continues $X \to T$, si μ est une loi de probabilité sur X (mesure positive de masse 1), $m(g) = \int_X g(x) d\mu(x)$ est un état statistique, caractérisant la mesure μ.

Dans le cas $X = \mathbb{R}^n$, le groupe X s'identifie topologiquement avec G, car pour tout $x \in \mathbb{R}^n$ $\omega(x) = e^{i\langle \omega, x\rangle}$. La fonction m est **la fonction caractéristique** de la loi μ : $m(\omega) = \int e^{i\langle \omega, x\rangle} d\mu(x)$.

A partir de $\int_{\mathbb{R}^n} e^{\left(i\langle \omega, x\rangle - \frac{1}{2}\|x\|^2\right)} dx = (2\pi)^{n/2} e^{-\frac{1}{2}\|\omega\|^2}$, on observe que $e^{-\frac{1}{2}\|\omega\|^2}$ est un état statistique avec :

$$0 \le \sum_{j,k} \bar{C}_j C_k e^{-\frac{1}{2}\|\omega_k - \omega_j\|^2} \le \underset{x}{Sup} \left| \sum_k C_k \, \mathrm{e}^{i\langle \omega_k, x\rangle} \right|^2 \tag{5}$$

2.2 Quantification et état quantique

Soit Θ un **espace quantique**, G un groupe dynamique de Θ, un état m de G, est une fonction complexe sur G qui vérifie $\forall C_k \in \mathbb{C}, \forall g_k \in G$:

$$m(e) = 1 \;,\; 0 \le \sum_{j,k} \bar{C}_j C_k m\left(g_j^{-1} g_k\right) \tag{6}$$

Un **état quantique** est tout état m de G vérifiant :

Si F_k est une famille finie de rayons de G qui commutent deux à deux, $\forall C_k \in \mathbb{C}, \forall g_k \in G$:

$$\sum_{j,k} \bar{C}_j C_k m\left(F_j(-1) F_k(1)\right) \le \underset{\xi \in \Theta}{Sup} \left| \sum_k C_k e^{iH_k(\xi)} \right|^2 \tag{7}$$

les H_k désignant les Hamiltoniens des F_k. Si m est un état quantique et si $g \in G$, $m \circ Ad\left(g^{-1}\right)$ est encore un état quantique parce que l'Hamiltonien de $Ad\left(g^{-1}\right) \circ F_k$ est égal à $H_k \circ \rho(g)$.

Soit m un état quantique:

a) Il existe un espace de Hilbert $\mathbf{H}$, une représentation unitaire ρ de G sur $\mathbf{H}$, un vecteur unitaire Ω dans $\mathbf{H}$, cyclique pour la représentation, tel que :
$$m(g) = \left\langle \Omega, \rho(g) \Omega \right\rangle \quad \forall g \in G \tag{8}$$
b) Cette formule définit $\mathbf{H}$, ρ et Ω à une équivalence unitaire près.

c) Quel que soit le vecteur unitaire $\Psi \in \mathbf{H}$, « vecteur d'état », la fonction m' :
$$m'(g) = \left\langle \Psi, \rho(g) \Psi \right\rangle \tag{9}$$
est un état quantique. Les représentations unitaires de G sont les représentations quantiques.

d) Pour que la représentation quantique associée à un état m soit irréductible, il faut et il suffit que m soit extrémale dans le convexe M des états quantiques.

e) Soit ρ une représentation quantique et D un « opérateur densité » positif, de trace 1 alors
$$m(g) = Trace\left(D\rho(g)\right) \tag{10}$$
définit un état « mixte » quantique. Si E est un « opérateur de Gibbs » auto-adjoint tel qu'il existe $\beta_0 \in \mathbb{R}$ satisfaisant $Trace\left(e^{-\beta_0 E}\right) < \infty$ alors
$$\forall \beta \ge \beta_0, \quad D_\beta = \frac{e^{-\beta E}}{Trace\left(e^{-\beta E}\right)} \tag{11}$$
est un opérateur densité (voir Balian [10][11]) définissant un état quantique m_β (la limite de m_β lorsque β tend vers $+\infty$ est l'état quantique m_∞ associé à l'opérateur densité $\frac{\Pi}{r}$ avec Π le projecteur propre associé à la plus petite valeur propre de E, et r son rang). Les états mixtes ainsi définis ont évidemment les propriétés rencontrées en statistique quantique et en chimie quantique, en particulier les états de Gibbs et de Hartree-Fock.

f) Pour que la représentation quantique associée à un état quantique m soit continue au sens de la topologie forte du groupe unitaire de H, il faut et il suffit que la fonction m soit continue en e ; ainsi est associé un opérateur auto-adjoint $\hat{H}$ de l'espace de Hilbert à tout hamiltonien:
$$\rho\left(\exp(tZ)\right) = e^{it\hat{H}} \quad \forall t \in \mathbb{R} \tag{12}$$
Si le groupe G est compact, ces opérateurs sont bornés, vérifiant les relations de commutation de Dirac. Cela permet d'établir le lien avec les formules usuelles de la mécanique quantique en utilisant la décomposition spectrale des opérateurs auto-adjoints.

3 Exemple pour un système linéaire et équation d'Heisenberg

Considérons un système dynamique linéaire dont la variété des mouvements X est un espace vectoriel et dont la forme symplectique est invariante par translation. Le groupe des translations S est génératif ; les hamiltoniens sont les fonctions affines sur X, qui s'écrivent sous la forme symplectique σ :

$$H(x) = \sigma(a, x) + b \quad \left(a \in X, b \in \mathbb{R}\right) \tag{13}$$

Théorème : Étant donné m un état quantique :

- Si m a un développement d'ordre 2 au voisinage de l'élément neutre de G, le spectre de tout hamiltonien est une distribution de probabilité classique, possédant un écart type fini Δ.

- quels que soient les hamiltoniens H et H' :
  $H(x)=\sigma(a,x)+b$, $H'(x)=\sigma(a',x)+b'$
  Les écarts types Δ et Δ' de leurs spectres satisfont l'inégalité : $\Delta\Delta' \geq \hbar|\sigma(a,a')|$

Ce sont les relations d'incertitude de Heisenberg. L'extension quantique G est triviale, ce qui permet de poser : $g=(x,z)$ $x \in X, z \in \mathbf{T}$. Le calcul donne :

$$(x,z)(x',z')=\left(x+x', zz' e^{-i\sigma(x,x')/2}\right) \tag{14}$$

G est le groupe de Heisenberg-Weyl. L'état quantique est obtenu en dotant l'espace vectoriel X d'une structure hermitienne complexe. $\langle , \rangle$ dont la forme symplectique est la partie imaginaire :

$$\sigma(x,y)=\mathrm{Im}(\langle x,y\rangle) \tag{15}$$

alors la fonction $m(x,z)=ze^{-\langle x,x\rangle/2}$ est un état quantique de G. Dans cet état m, le spectre d'un hamiltonien $H(x)=\sigma(a,x)+b$ est la mesure gaussienne du centre b et l'écart type $\Delta=\|a\|$ avec $\|a\|$ la norme hermitienne $\|a\|^2=\langle a,a\rangle$. Souriau remarque « *Un calcul simple montre que l'inégalité d'incertitude de Heissenberg peut être réalisée strictement, par un choix approprié de a et a'; m est donc ce qu'on appelle un état cohérent. La représentation associée à m ne dépend pas du choix de la structure hermitienne ; elle est irréductible, c'est la « représentation de Schrödinger des relations de commutation ». Mais il existe aussi des états discontinus, qui n'appartiennent donc pas à la représentation de Schrödinger.* »

4 Conclusion

Nous résumons les éléments essentiels du modèle de Souriau des états d'un groupe. Pour chaque groupe G un état est une fonction définie sur G, à valeurs complexes, prenant la valeur 1 au point neutre, telle que les $\left[m\left(g_j^{-1}gg_k\right)\right]_{j,k}$ soient les éléments d'une matrice hermitienne positive. Les propriétés sont :

- Le conjugué d'un état, le produit de deux états sont des états.
- Les états de G constituent un convexe compact engendré par les états purs : ceux qui ne sont pas le milieu de deux autres.
- Chaque état définit une représentation unitaire du groupe sur un espace de Hilbert
- Réciproquement, tout espace de Hilbert, toute représentation unitaire d'un groupe peuvent se reconstruire à partir d'un état.

Les représentations irréductibles" sont celles qui sont associées à un état pur.

« *La mécanique quantique, qui s'est constituée empiriquement au fil des ans, se présente aujourd'hui, tout au moins dans les manuels, comme une discipline cohérente. Mais la lecture des traités produit souvent un certain malaise qu'il s'agisse de livres inspirés comme ceux de DIRAC ou de FEYNMAN, ou de manuels plus scolaires, les concepts proposés au lecteur ont une apparence de rigueur, les déductions ressemblent à des théorèmes, mais des théorèmes dont les hypothèses seraient toujours implicites… Ce malentendu qui dure depuis plus de soixante ans, faut-il s'y résigner? Il n'est pas nécessaire d'espérer découvrir une théorie définitive pour entreprendre l'analyse conceptuelle des pratiques.* »

5 Bibliographie

[1] Souriau, J.M., Quantification géométrique. In: Daniel Bernard and Yvonne Choquet-Bruhat (eds.) Physique quantique et géométrie (1986)

[2] Souriau, J.M., Des principes géométriques pour la mécanique quantique. Act. Acad. Sc. Taurin, 124:296–306, conférence Collège de France: "La Mécanique Analytique de Lagrange et son héritage" (1990)

[3] Souriau, J.M., Des particules aux ondes: quantification géométrique. Huygens'principle 1690–1990: theory and applications. Studies in Mathematical Physics, vol. 3, pp. 299–341. North-Holland (1992)

[4] Souriau, J.M., Interprétation géométrique des états quantiques. In: Bleuler, K., Reetz, A. (eds) Differential Geometrical Methods in Mathematical Physics. Lecture Notes in Mathematics, vol 570. Springer (1977)

[5] Souriau, J.M., Structure des systèmes dynamiques. Dunod, Paris (1970)

[6] Souriau, J.M., Quantification géométrique, Commun. math. Phys. 1, pp. 374-398 (1966)

[7] Souriau, JM., Groupes différentiels et physique mathématique. Group Theoretical Methods in Physics. Lecture Notes in Physics, vol 201. Springer (1984)

[8] Souriau, J.M., C'est quantique ? Donc c'est géométrique ; https://hal.science/medihal-01471022/

[9] Souriau, J.M., Les Groupes comme universaux, Géométrie au XXe siècle : Histoire et horizons, Hermann, Paris (2005)

[10] Balian, R., A Metric for Quantum States Issued from von Neumann's Entropy. GSI 2013. Lecture Notes in Computer Science, vol 8085. Springer (2013)

[11] Balian, R. The Entropy-Based Quantum Metric. Entropy, 16, 3878-3888, MaxEnt'14 Clos Lucé (2014)