



Mécanique analytique

Gerald R. Kneller

Université d'Orléans
et
Centre de Biophysique Moléculaire, CNRS
Rue Charles Sadron
45071 Orléans

Table des matières

1	Introduction	2
2	Mécanique de Lagrange	2
2.1	Le principe de D'Alembert	2
2.2	Fonction et équations de Lagrange	6
2.3	Particule chargée dans un champ électromagnétique	9
2.4	Lois de conservation	12
2.4.1	Energie	12
2.4.2	Variables cycliques	13
2.4.3	Quantité de mouvement totale	14
2.4.4	Moment cinétique	15
2.5	Lois d'échelle et similitude mécanique [1]	16
2.6	Forces de friction	18
2.7	Viriel [1]	20
3	Mécanique de Hamilton	21
3.1	Principe de variation	21
3.2	Equations de Hamilton et espace de phases	22
3.3	Crochets de Poisson	24
3.4	Invariance du volume de l'espace de phases	25
4	Mécanique de Gauß	28
4.1	Le concept	28
4.2	Exemples	30
5	Vibrations	33
5.1	Oscillateur harmonique forcé, résonance	33
5.2	Oscillateurs couplés, modes normaux	35
5.2.1	Equilibre, potentiel quadratique	35
5.2.2	Equations du mouvement, modes normaux	36
5.3	Chaîne linéaire	40

1 Introduction

Dans ce cours seront développés les bases de la mécanique analytique et des applications focalisées sur la dynamique d'un système autour de sa configuration de repos. La mécanique analytique peut être considérée comme une formulation élégante de la mécanique classique de Newton qui permet de travailler en coordonnées adaptées à la symétrie du problème considéré et de réduire le nombre de degrés de liberté sans introduire des forces de contraintes. Il s'agit d'une d'une part d'une formulation très mathématisée et adaptée au calcul analytique – d'où le nom qui a déjà été utilisé par Joseph-Louis Lagrange [2] – et d'autre part d'une formulation sous l'angle de différents "principes". On nomme ici le principe des déplacements virtuels [3] (D'Alembert), de la moindre action (Lagrange, Hamilton), de la moindre contrainte [4] (Gauß). Aujourd'hui, la mécanique analytique est plutôt associée avec la formulation de Lagrange et de Hamilton de la mécanique [5–7]. L'idée principale de la formulation de Hamilton est de voir la trajectoire d'une particule, ou d'un système de particules, comme résultat d'un problème d'optimisation selon un critère qui est connue comme principe de la moindre action. Du point de vue mathématique il s'agit d'un problème de variation, où l'on cherche une trajectoire qui minimise une fonctionnelle d'action du système, fixant le point de et le point d'arrivée. Utilisant des coordonnées adaptées au problème des contraintes éventuelles sont simplement traitées en fixant des coordonnées en question, sans nécessité de construire des forces de contraintes explicites. Un autre avantage de la formulation de la mécanique classique par Lagrange et Hamilton est la possibilité de faire sortir des lois de conservation et leur relations avec la les symétries du problème étudiés. On note également la possibilité de traiter des systèmes mécaniques à plusieurs degrés de liberté couplés d'une manière élégante, en composant les énergies cinétiques et potentielles terme par terme. Cette propriété sera illustrée dans des applications où l'on considère des systèmes dynamiques à plusieurs degrés de liberté dont les mouvements restent proche d'une configuration d'équilibre.

2 Mécanique de Lagrange

2.1 Le principe de D'Alembert

La formulation de D'Alembert de la mécanique classique était la première approche systématique pour la modélisation de la dynamique d'un système mécanique, permettant de prendre en compte des interdépendances éventuelles entre les mouvements des différentes composantes du système. Dans ce cours on considéra des systèmes constitués de points matériels. Sans contraintes supplémentaires la dynamique d'un système de N points matériels

est décrite par les équations de Newton,

$$m_\alpha \ddot{\mathbf{r}}_\alpha = \mathbf{F}_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N. \quad (1)$$

Ici m_α est la masse du point matériel, \mathbf{r}_α sa position à l'instant t et \mathbf{F}_α la force externe agissant sur lui. Le point $\dot{\mathbf{r}}_\alpha$ dénotent une dérivée par rapport au temps et $\ddot{\mathbf{r}}_\alpha$ est donc l'accélération du point α . Pour les vecteurs on utilisera une notation matricielle, où $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z)^T$ dénote une matrice colonne qui contient les composantes a_x, a_y, a_z d'un vecteur $\vec{a} = a_x \vec{e}_x + a_y \vec{e}_y + a_z \vec{e}_z$ par rapport aux vecteurs de base $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$ d'un référentiel euclidien fixe. Le symbole T dénote une transposition. Sans contraintes, le système décrit par les équations de Newton (1) a $f = 3N$ degrés de liberté. Supposons maintenant que le système dynamique est soumis à n_h contraintes holonomes de la forme,

$$\sigma_j(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \equiv 0, \quad j = 1, \dots, n_h \quad (2)$$

Dans ce cas on aura alors $f = 3N - n_h$ degrés de liberté. Dans les équations du mouvement les contraintes imposées sont reflétées par la présence de forces de contrainte. Si \mathbf{Z}_α est la force de contrainte sur la particule α , les équations de Newton deviennent

$$m_\alpha \ddot{\mathbf{r}}_\alpha = \mathbf{F}_\alpha + \mathbf{Z}_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (3)$$

D'après D'Alembert ces forces de contrainte satisfont la condition

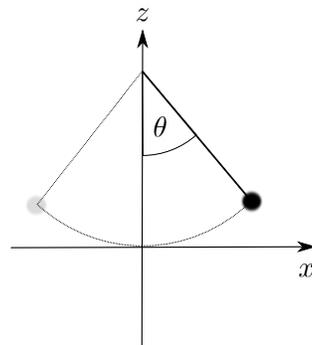
$$\sum_{\alpha=1}^N \mathbf{Z}_\alpha^T \cdot \delta \mathbf{r}_\alpha = 0, \quad (4)$$

où $\delta \mathbf{r}_\alpha$ sont des déplacements virtuels qui sont compatibles avec les contraintes imposées. On note que $\mathbf{a}^T \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b}^T \cdot \mathbf{a} = (\vec{a}, \vec{b})$ est le produit scalaire des vecteurs \vec{a} et \vec{b} , utilisant la convention du calcul matriciel, où "T" dénote une transposition. Le principe (4) exprime que le "travail virtuel" effectué par ces forces est nul. En utilisant (3) on peut alors écrire

$$\sum_{\alpha=1}^N (m_\alpha \ddot{\mathbf{r}}_\alpha - \mathbf{F}_\alpha)^T \cdot \delta \mathbf{r}_\alpha = 0 \quad (5)$$

On note que dans le cas de la statique, où les accélérations sont nulles, $\ddot{\mathbf{r}}_\alpha \equiv \mathbf{0}$, le principe (5) donne la relation bien connue $\sum_{\alpha=1}^N \mathbf{F}_\alpha \cdot \delta \mathbf{r}_\alpha = 0$.

Si $\{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N\}$ est un jeu de coordonnées qui est compatible avec les contraintes (2), les dernières seront aussi vérifiées pour le nouveau



jeu de coordonnées $\{\mathbf{r}_1 + \delta\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N + \delta\mathbf{r}_N\}$, car les déplacements virtuels doivent respecter les contraintes. On peut alors écrire

$$\sigma_j(\mathbf{r}_1 + \delta\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N + \delta\mathbf{r}_N) - \sigma_j(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \equiv 0,$$

pour $j = 1, \dots, n_h$. Si les déplacements virtuels sont infinitésimaux, ceci mène aux équations équivalentes

$$\boxed{\sum_{\alpha=1}^N \delta\mathbf{r}_\alpha^T \cdot \frac{\partial \sigma_j(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\partial \mathbf{r}_\alpha} = 0, \quad j = 1, \dots, n_h} \quad (6)$$

Partant du principe (5) on voit que les forces de contrainte doivent avoir la forme générale

$$\boxed{\mathbf{Z}_\alpha = \sum_{j=1}^{n_h} \lambda_j \frac{\partial \sigma_j(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\partial \mathbf{r}_\alpha}} \quad (7)$$

où $\lambda_j \in \mathbb{R}$ sont des paramètres encore inconnus. Le principe de D'Alembert implique alors que les forces des contraintes sont proportionnelles au gradients des surfaces décrites par les équations (2). Les paramètres λ_k peuvent être déterminés par différentiation des ces équations par rapport au temps. Comme $\sigma_j \equiv 0$ ceci est aussi vrai pour toute dérivée totale par rapport au temps, ce qui mène à

$$\dot{\sigma}_j = \sum_{\alpha=1}^N \dot{\mathbf{r}}_\alpha^T \cdot \frac{\partial \sigma_j}{\partial \mathbf{r}_\alpha} = 0, \quad (8)$$

$$\ddot{\sigma}_j = \sum_{\alpha=1}^N \ddot{\mathbf{r}}_\alpha^T \cdot \frac{\partial \sigma_j}{\partial \mathbf{r}_\alpha} + \sum_{\alpha, \beta=1}^N \dot{\mathbf{r}}_\beta^T \cdot \frac{\partial^2 \sigma_j}{\partial \mathbf{r}_\alpha \partial \mathbf{r}_\beta} \cdot \dot{\mathbf{r}}_\alpha = 0, \quad (9)$$

où $j = 1, \dots, n_h$. Ici on peut utiliser que $\ddot{\mathbf{r}}_\alpha = (\mathbf{F}_\alpha + \mathbf{Z}_\alpha)/m_{\alpha}$, où les forces de contraintes sont données par l'expression (7). L'équation (9) donne donc un système de n_h équations linéaires pour les n_h paramètres λ_j ($j = 1, \dots, n_h$). Si les contraintes (2) sont *indépendantes*, une solution unique existe et on obtient donc une forme explicite pour les forces de contraintes. La solution des équations du mouvement (3) avec ces forces de contraintes mène à une solution qui vérifie les contraintes imposées, à condition que les conditions initiales soient respectées. Il faut comprendre que les forces de contraintes ne garantissent que le *maintien* des conditions imposées. Elles n'ont aucune fonction de régulation si le système dévie de ces conditions. Ceci joue un rôle important pour la solution numérique des équation de mouvement avec contraintes.

Exemple 1. Pendule en coordonnées cartésiennes:

Afin d'illustrer l'application du principe de D'Alembert on considère le pendule montré dans la figure 1, qui effectue des mouvements dans le plan $\{x, z\}$ sous l'influence de la force de gravitation $\mathbf{F} = -mge_z$. Ici on impose deux contraintes,

$$\begin{aligned}\sigma_1(\mathbf{r}) &= x^2 + y^2 + (z - l)^2 - l^2 \equiv 0, \\ \sigma_2(\mathbf{r}) &= y \equiv 0,\end{aligned}$$

qui fixent, respectivement, la distance l de la masse m du point de fixation et le plan du mouvement. Ceci laisse donc $f = 3 - 2 = 1$ degrés de liberté et la force de contrainte a la forme

$$\mathbf{Z} = \lambda_1 \frac{\partial \sigma_1(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} + \lambda_2 \frac{\partial \sigma_2(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} = \lambda_1 \begin{pmatrix} 2x \\ 2y \\ 2(z - l) \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

et les équations du mouvement sont par conséquent

$$\begin{pmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{y} \\ \ddot{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -g \end{pmatrix} + 2\frac{\lambda_1}{m} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z - l \end{pmatrix} + \frac{\lambda_2}{m} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Afin de déterminer les paramètres de Lagrange on différentie les contraintes holonomes deux fois par rapport au temps. La première différentiation donne des contraintes pour les vitesses,

$$\begin{aligned}2x\dot{x} + 2y\dot{y} + 2(z - l)\dot{z} &= 0, \\ \dot{y} &= 0,\end{aligned}$$

et la deuxième une contrainte pour les accélérations,

$$\begin{aligned}\ddot{x}x + \ddot{y}y + \ddot{z}(z - l) + \dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2 &= 0, \\ \ddot{y} &= 0.\end{aligned}$$

Ici on insert les composantes de la forme générale des accélérations, ce qui donne un système d'équations linéaires pour les paramètres, λ_j , dont la solution est

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= -\frac{m(g(l - z) + \dot{x}^2 + \dot{z}^2)}{2l^2}, \\ \lambda_2 &= 0.\end{aligned}$$

où l'on tient compte des contraintes imposées et des contraintes résultantes pour les vitesses. Avec ceci, l'équation du mouvement finale devient

$$\begin{aligned}\ddot{x} &= -\frac{x(g(l-z) + \dot{x}^2 + \dot{z}^2)}{l^2}, \\ \ddot{y} &= 0, \\ \ddot{z} &= -g + \frac{(l-z)(g(l-z) + \dot{x}^2 + \dot{z}^2)}{l^2}.\end{aligned}$$

Afin de respecter les contraintes imposées, ces équations différentielles doivent être résolues avec des conditions initiales qui respectent ces contraintes, y compris leur dérivées par rapport à t . On note que la force de contrainte compense la force centrifuge qui accélère la masse en direction de $\mathbf{e}_r = \mathbf{r}/|\mathbf{r}|$. Pour les mouvements de petite amplitude, où $|x|/l \ll 1$ et $|z|/l \ll 1$, on obtient l'équation de mouvement d'un oscillateur harmonique pour la coordonnée x ,

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = 0, \quad \text{où} \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{g}{l}},$$

si l'on néglige l'accélération centrifuge en direction de x .

2.2 Fonction et équations de Lagrange

L'exemple simple du pendule montre déjà que la description d'un système mécanique sous contraintes en coordonnées cartésiennes n'est pas pratique pour le calcul analytique. Au lieu de décrire un système mécanique en coordonnées cartésiennes et des contraintes du type (2), on exprime maintenant les positions \mathbf{r}_α tout simplement par f coordonnées généralisées et *indépendantes*,

$$\mathbf{r}_\alpha \equiv \mathbf{r}_\alpha(q_1, \dots, q_f). \quad (10)$$

Dans ce les déplacements virtuelles $\delta \mathbf{r}_\alpha$ peuvent être exprimées par les les variations virtuelles des coordonnées généralisées,

$$\delta \mathbf{r}_\alpha = \sum_{k=1}^f \frac{\partial \mathbf{r}_\alpha}{\partial q_k} \delta q_k. \quad (11)$$

On utilise maintenant que

$$\frac{d}{dt} \delta \mathbf{r}_\alpha = \sum_{k,l=1}^f \frac{\partial^2 \mathbf{r}_\alpha}{\partial q_k \partial q_l} \dot{q}_l \delta q_k = \sum_{k=1}^f \frac{\partial}{\partial q_k} \underbrace{\left(\sum_{l=1}^f \frac{\partial \mathbf{r}_\alpha}{\partial q_l} \dot{q}_l \right)}_{\dot{\mathbf{r}}_\alpha} \delta q_k = \delta \dot{\mathbf{r}}_\alpha$$

Avec ceci

$$\begin{aligned}
\sum_{\alpha=1}^N m_{\alpha} \ddot{\mathbf{r}}_{\alpha}^T \cdot \delta \mathbf{r}_{\alpha} &= \sum_{\alpha=1}^N \frac{d}{dt} \left(m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^T \cdot \delta \mathbf{r}_{\alpha} \right) - \sum_{\alpha=1}^N m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^T \cdot \delta \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \\
&= \sum_{k,l=1}^f \left\{ \frac{d}{dt} \sum_{\alpha=1}^N m_{\alpha} \left(\frac{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}{\partial q_k} \right)^T \cdot \frac{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}{\partial q_l} \dot{q}_l \right\} \delta q_k \\
&\quad - \sum_{k,l,m=1}^f \left\{ \sum_{\alpha=1}^N m_{\alpha} \left(\frac{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}{\partial q_l} \dot{q}_l \right)^T \cdot \frac{\partial}{\partial q_k} \left(\frac{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}{\partial q_m} \dot{q}_m \right) \right\} \delta q_k.
\end{aligned}$$

Si l'on utilise l'expression de l'énergie cinétique en coordonnées et vitesses généralisées,

$$T(q, \dot{q}) := \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^T \cdot \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} = \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^f a_{kl}(q) \dot{q}_k \dot{q}_l \quad (12)$$

où les coefficients $a_{kl}(q)$ ont les coefficients du *tenseur métrique* pondéré par les masses

$$a_{kl}(q) = \sum_{\alpha=1}^N m_{\alpha} \left(\frac{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}{\partial q_k} \right)^T \cdot \frac{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}{\partial q_l} \quad (13)$$

on peut alors écrire

$$\sum_{\alpha=1}^N m_{\alpha} \ddot{\mathbf{r}}_{\alpha}^T \cdot \delta \mathbf{r}_{\alpha} = \sum_{l=k}^f \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial T}{\partial q_k} \right) \delta q_k.$$

On suppose que $\mathbf{a} = (a_{kl})$ dans le terme pour l'énergie cinétique est une matrice définie positive. En introduisant les forces généralisées

$$Q_k = \sum_{\alpha=1}^n \mathbf{F}_{\alpha}^T \cdot \frac{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}{\partial q_k} \quad (14)$$

l'éq. (5) prend la forme

$$\sum_{\alpha=1}^N (m_{\alpha} \ddot{\mathbf{r}}_{\alpha} - \mathbf{F}_{\alpha})^T \cdot \delta \mathbf{r}_{\alpha} = \sum_{l=k}^f \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial T}{\partial q_k} - Q_k \right) \delta q_k = 0.$$

Comme les coordonnées q_k sont indépendantes, les f variations δq_k sont arbitraires et cette équation ne peut être vérifiée si le terme dans la parenthèse (...) est nul. Les équations de mouvement de Lagrange sont alors

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial T}{\partial q_k} = Q_k, \quad k = 1, \dots, f \quad (15)$$

Souvent les forces dérivent d'un potentiel, tel que

$$F_\alpha = -\frac{\partial V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)}{\partial \mathbf{r}_\alpha}. \quad (16)$$

Si l'on définit $U(q_1, \dots, q_f, t) \equiv V(\mathbf{r}_1(q), \dots, \mathbf{r}_N(q), t)$, les forces généralisées prennent la forme simple

$$Q_k = -\frac{\partial U}{\partial q_k}. \quad (17)$$

Dans ce cas il convient d'introduire la fonction de Lagrange

$$\boxed{\mathcal{L}(q, \dot{q}, t) = T(q, \dot{q}) - U(q, t)} \quad (18)$$

qui permet d'écrire les équations (15) dans la forme compacte

$$\boxed{\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} = 0, \quad k = 1, \dots, f} \quad (19)$$

Exemple 2. Point matériel en coordonnées cartésiennes:

On vérifie d'abord que le formalisme de Lagrange redonne les équations de Newton si l'on considère un système sans contraintes. La trajectoire d'un point matériel ("particule") sans contraintes peut être décrite par ses coordonnées cartésiennes qui sont indépendantes dans ce cas. Si la force sur la particule dérive d'un potentiel, la fonction de Lagrange correspondante a la forme

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - V(x, y, z), \quad (20)$$

et les équations de Lagrange sont effectivement les équations de Newton

$$\begin{aligned} m\ddot{x}(t) &= -\frac{\partial V}{\partial x}, \\ m\ddot{y}(t) &= -\frac{\partial V}{\partial y}, \\ m\ddot{z}(t) &= -\frac{\partial V}{\partial z}. \end{aligned}$$

La généralisation sur un système de N particules est évidente.

Dans le prochain exemple on revient au système simple du pendule qui a été déjà traité en coordonnées cartésienne en utilisant la méthode de D'Alembert.

Exemple 3. Pendule en coordonnées généralisées:

On considère le pendule montré dans la figure 1. Comme il a déjà été mentionné, ce système a un degré de liberté et le choix évident pour la coordonnée généralisée spécifiant sa position est l'angle θ . Choisisant $z = 0$ pour $\theta = 0$, ses coordonnées cartésiennes sont spécifiées par

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} l \sin \theta \\ 0 \\ l(1 - \cos \theta) \end{pmatrix}$$

et l'énergie cinétique et potentielle ont la forme

$$T = \frac{m}{2} \dot{\mathbf{r}}^T \cdot \dot{\mathbf{r}} = \frac{m}{2} l^2 \dot{\theta}^2,$$
$$U(\theta) = V(\mathbf{r}(\theta)) = mgz(\theta) = mgl(1 - \cos \theta),$$

respectivement. Avec $L = T - U$ on trouve pour l'équation de Lagrange

$$\frac{d}{dt} \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}}}_{mr^2 \dot{\theta}} - \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \theta}}_{-mgr \sin \theta} = 0.$$

Introduisant la pulsation $\Omega = \sqrt{g/l}$ ceci devient

$$\ddot{\theta}(t) + \Omega^2 \sin \theta(t) = 0.$$

Une solution analytique existe si $\theta \ll 1$, tel que $\sin \theta \approx \theta$. Dans ce cas

$$\theta(t) \approx \theta(0) \cos \Omega t + \frac{\dot{\theta}(0)}{\Omega} \sin \Omega t.$$

La figure 2 illustre la différence entre les trajectoires à forte et faible amplitude. Les trajectoires à forte amplitude ont été obtenues par intégration numérique des équations du mouvement.

2.3 Particule chargée dans un champ électromagnétique

Un point matériel portant une charge Q qui effectue un mouvement dans un champ électromagnétique est soumis à la force de Lorentz,

$$\boxed{m\ddot{\mathbf{r}} = Q(\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \dot{\mathbf{r}} \wedge \mathbf{B}(\mathbf{r}, t))} \quad (21)$$

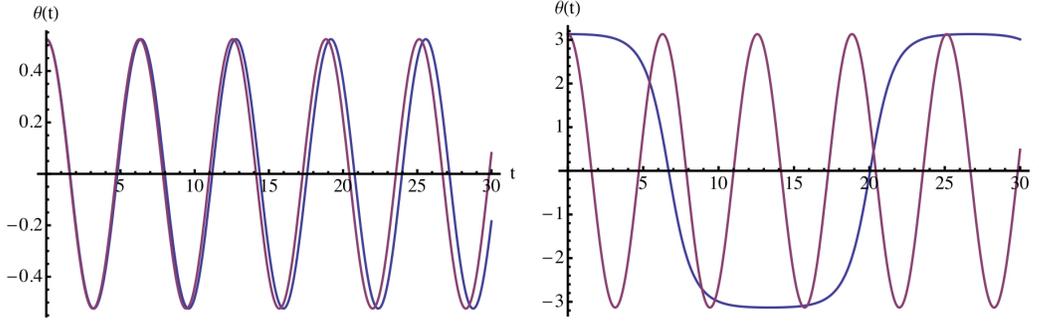


FIGURE 2 – **A gauche** : Trajectoires de l'oscillateur linéaire (lignes mauves) et non linéaire (lignes bleues) à faible amplitude. **A droite** : Trajectoires correspondantes à forte amplitude. Dans les deux cas $\Omega = 1$ et $\dot{\theta}(0) = 0$.

où \mathbf{E} et \mathbf{B} sont, respectivement, le champ électrique et le champ magnétique. L'analyse des équations de Maxwell du champ électromagnétique montre que les deux champs dérivent d'un potentiel scalaire ϕ et d'un potentiel vectoriel \mathbf{A} ,

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla\phi(\mathbf{r}, t) - \partial_t\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad (22)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \wedge \mathbf{A}(\mathbf{r}, t). \quad (23)$$

On vérifie que la fonction de Lagrange qui mène à l'équation du mouvement (21) a la forme

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{r}}^T \cdot \dot{\mathbf{r}} - Q(\phi(\mathbf{r}, t) - \dot{\mathbf{r}}^T \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)) \quad (24)$$

Voici la preuve : On a d'abord

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} + QA_x(x, y, z, t),$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{y}} = m\dot{y} + QA_y(x, y, z, t),$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{z}} = m\dot{z} + QA_z(x, y, z, t),$$

tel que

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \right) = m\ddot{x} + Q \{ \dot{x}\partial_x A_x + \dot{y}\partial_y A_x + \dot{z}\partial_z A_x + \partial_t A_x \},$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{y}} \right) = m\ddot{y} + Q \{ \dot{x}\partial_x A_y + \dot{y}\partial_y A_y + \dot{z}\partial_z A_y + \partial_t A_y \},$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{z}} \right) = m\ddot{z} + Q \{ \dot{x}\partial_x A_z + \dot{y}\partial_y A_z + \dot{z}\partial_z A_z + \partial_t A_z \},$$

D'autre part

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} &= -Q \{ \partial_x \phi - \dot{x} \partial_x A_x - \dot{y} \partial_x A_y - \dot{z} \partial_x A_z \}, \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} &= -Q \{ \partial_y \phi - \dot{x} \partial_y A_x - \dot{y} \partial_y A_y - \dot{z} \partial_y A_z \}, \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z} &= -Q \{ \partial_z \phi - \dot{x} \partial_z A_x - \dot{y} \partial_z A_y - \dot{z} \partial_z A_z \}.\end{aligned}$$

Les équations du mouvement sont donc

$$\begin{aligned}m\ddot{x} &= -Q\partial_x\phi - Q\partial_t A_x + Q \left\{ \underbrace{\dot{y}(\partial_x A_y - \partial_y A_x)}_{B_z} - \underbrace{\dot{z}(\partial_z A_x - \partial_x A_z)}_{B_y} \right\}, \\ m\ddot{y} &= -Q\partial_y\phi - Q\partial_t A_y + Q \left\{ \underbrace{\dot{z}(\partial_y A_z - \partial_z A_y)}_{B_x} - \underbrace{\dot{x}(\partial_x A_y - \partial_y A_x)}_{B_z} \right\}, \\ m\ddot{z} &= -Q\partial_z\phi - Q\partial_t A_z + Q \left\{ \underbrace{\dot{x}(\partial_z A_x - \partial_x A_z)}_{B_y} - \underbrace{\dot{y}(\partial_y A_z - \partial_z A_y)}_{B_x} \right\}.\end{aligned}$$

En notation matricielle elles ont la forme

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -Q\nabla\phi(\mathbf{r}, t) - Q\partial_t\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + Q\dot{\mathbf{r}} \wedge (\nabla \wedge \mathbf{A}(\mathbf{r}, t))$$

et confirment donc (21). La forme (24) de la fonction de Lagrange montre que l'énergie potentielle du système dépend en général explicitement du temps et de la vitesse,

$$\boxed{V(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = Q\left(\phi(\mathbf{r}, t) - \dot{\mathbf{r}}^T \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)\right)} \quad (25)$$

Exemple 4. Oscillateur de Landau:

On considère une particule chargée de masse m et charge Q qui est placée dans un champ magnétique statique. On vérifie que le potentiel vectoriel correspondant a la forme

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \wedge \mathbf{r}). \quad (26)$$

Si \mathbf{B} pointe en direction de l'axe z d'un repère euclidien, $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$, la fonction de Lagrange prend la forme

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + \frac{QB}{2}(xy - yx), \quad (27)$$

et les équations du mouvement deviennent

$$\begin{aligned}\ddot{x}(t) &= \Omega \dot{y}(t), \\ \ddot{y}(t) &= -\Omega \dot{x}(t), \\ \ddot{z}(t) &= 0,\end{aligned}$$

où Ω est la fréquence (pulsation) cyclotron,

$$\boxed{\Omega = \frac{QB}{m}} \quad (28)$$

Avec les conditions initiales $\mathbf{r}(0) = \mathbf{0}$ la solution des équations du mouvement devient

$$\begin{aligned}x(t) &= \frac{v_x(0) \sin(\Omega t) - v_y(0) \cos(\Omega t) + v_y(0)}{\Omega}, \\ y(t) &= \frac{v_x(0) \cos(\Omega t) + v_y(0) \sin(\Omega t) - v_x(0)}{\Omega}, \\ z(t) &= v_z(0)t.\end{aligned}$$

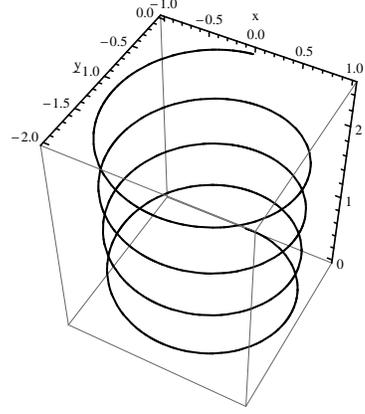


FIGURE 3 – Trajectoire d'une particule chargée dans un champ magnétique statique.

On reconnaît que les trajectoires ont une forme hélicoïdale. Une réalisation particulière pour une telle trajectoire est montrée dans la figure 3. Ici $x(0) = y(0) = z(0) = 0$, $\dot{x}(0) = 1$, $\dot{y}(0) = 0$, $\dot{z}(0) = 0.1$ et $\Omega = 1$.

2.4 Lois de conservation

Dans cette section sera montré que chaque invariance de la fonction de Lagrange par rapport à une opération de symétrie induit une loi de conservation (théorème de Noether¹).

2.4.1 Energie

Partant d'une fonction de Lagrange de la forme générale (18) on trouve d'abord

$$\begin{aligned}\frac{d\mathcal{L}}{dt} &= \sum_{k=1}^f \left\{ \dot{q}_k \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} + \ddot{q}_k \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \right\} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \\ &= \sum_{k=1}^f \dot{q}_k \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} + \sum_{k=1}^f \left\{ \frac{d}{dt} \left(\dot{q}_k \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \right) - \dot{q}_k \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \right) \right\} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \\ &= \sum_{k=1}^f \dot{q}_k \underbrace{\left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \right) \right\}}_{=0} + \sum_{k=1}^f \frac{d}{dt} \left(\dot{q}_k \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}.\end{aligned}$$

1. Emmy Noether, mathématicienne allemande, 1882 - 1935.

Définissant la *fonction de Hamilton* par

$$\mathcal{H} = \sum_{k=1}^f \left\{ \dot{q}_k \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} - \mathcal{L} \right\} \quad (29)$$

on peut donc conclure que

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}. \quad (30)$$

\mathcal{H} est donc une quantité conservée si L ne dépend pas explicitement du temps, i.e. si $U \equiv U(q)$. Souvent l'énergie cinétique est une fonction quadratique des vitesses généralisées, tel que

$$\sum_{k=1}^f \dot{q}_k \frac{\partial T(q, \dot{q})}{\partial \dot{q}_k} = 2T(q, \dot{q}).$$

Dans ce cas la fonction de Hamilton devient l'énergie totale, définie par

$$\mathcal{H} = T(q, \dot{q}) + U(q, t) \quad (31)$$

2.4.2 Variables cycliques

La forme générale des équations du mouvement lagrangiennes (19) montre d'une manière évidente que le choix des coordonnées $\{q_k\}$ adaptées à la symétrie du problème considéré fait sortir d'une manière naturelle des lois de conservation. Si la fonction de Lagrange dépend de la vitesse \dot{q}_k d'une coordonnée mais pas de la coordonnée q_k même, on aura avec (19)

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} = 0 \quad (32)$$

ou bien

$$p_k \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} = \text{const.} \quad (33)$$

On appelle p_k le *moment conjugué* à q_k .

Exemple 5. Oscillateur harmonique en deux dimensions:

On considère par exemple le problème d'un oscillateur harmonique en deux dimensions. Si on décrit le mouvement en coordonnées cartésiennes, (x, y) , qui décrivent la position de l'oscillateur par rapport à sa position d'équilibre en $x = 0$ et $y = 0$, l'énergie potentielle a la forme

$$U(x, y) = \frac{m\Omega^2}{2}(x^2 + y^2), \quad (34)$$

où Ω est la fréquence angulaire de l'oscillateur. La fonction de Lagrange devient

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - \frac{m\Omega^2}{2}(x^2 + y^2). \quad (35)$$

et les équations du mouvement ont la forme

$$\ddot{x}(t) + \Omega^2 x(t) = 0, \quad (36)$$

$$\ddot{y}(t) + \Omega^2 y(t) = 0. \quad (37)$$

Comme le potentiel U ne dépend pas du temps et comme l'énergie cinétique est quadratique en \dot{x}, \dot{y} , la fonction de Hamilton représente l'énergie et est conservée,

$$\mathcal{H} = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) + \frac{m\Omega^2}{2}(x^2 + y^2) = E. \quad (38)$$

Une deuxième quantité conservée est obtenue en utilisant la symétrie du problème. Visiblement U est invariante sous une rotation $(x, y) \rightarrow (x', y')$ et si l'on utilise des coordonnées polaires

$$x = r \cos(\phi), \quad (39)$$

$$y = r \sin(\phi), \quad (40)$$

la fonction de Lagrange prend la forme

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) - \frac{m\Omega^2}{2}r^2 \quad (41)$$

qui montre que \mathcal{L} ne dépend pas de ϕ . Par conséquent la quantité

$$p_\phi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = mr^2 \dot{\phi} \quad (42)$$

est conservée qui représente le moment cinétique de l'oscillateur. Fixant cette constante du mouvement, $\phi(t)$ peut-être déterminée par intégration directe de $\dot{\phi} = p_\phi / (mr(t)^2)$, où $r(t)$ est la solution de l'équation de Lagrange

$$\ddot{r}(t) + \Omega^2 r(t) = 0. \quad (43)$$

2.4.3 Quantité de mouvement totale

Le résultat du paragraphe précédent montrent que la symétrie d'un problème mécanique est intimement liée avec une loi de conservation correspondante. Au lieu de parler de la symétrie d'un problème on peut parler de l'invariance de la fonction de Lagrange par rapport à un déplacement

virtuel δq_k d'une variable cyclique. Visiblement $\delta L = (\partial L/\partial q_k)\delta q_k = 0$ est équivalent à $\partial L/\partial q_k = 0$ si la variation δq_k est arbitraire. Le raisonnement en termes d'invariances est utile car il permet de faire sortir des quantités conservées sans résoudre explicitement les équations du mouvement. Considérons par exemple une fonction de Lagrange en coordonnées cartésiennes de la forme (20), où le potentiel est invariant par rapport à une translation globale $\boldsymbol{\tau}$ de toutes les positions,

$$\boxed{V(\mathbf{r}_1 + \boldsymbol{\tau}, \dots, \mathbf{r}_N + \boldsymbol{\tau}) = V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)} \quad (44)$$

Dans un tel cas

$$\delta \mathcal{L} = \sum_{\alpha=1}^N \delta \mathbf{r}_\alpha^T \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{r}_\alpha} = \delta \boldsymbol{\tau}^T \cdot \left(\sum_{\alpha=1}^N \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{r}_\alpha} \right) = 0$$

pour un déplacement $\delta \boldsymbol{\tau}$ infinitésimal quelconque. Notons que ce déplacement est "virtuel", dans le sens qu'il ne correspond pas au déplacements réels des particules dans le système. En utilisant les équations de Lagrange on peut donc conclure que

$$\sum_{\alpha=1}^N \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}_\alpha} \right) = 0. \quad (45)$$

Comme $\partial \mathcal{L}/\partial \dot{\mathbf{r}}_\alpha = m_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha$, il suit que

$$\boxed{\mathbf{P} = \sum_{\alpha=1}^N m \dot{\mathbf{r}}_\alpha = \text{const.}} \quad (46)$$

L'invariance du potentiel par rapport à une translation globale de toutes les positions implique donc la conservation de la quantité du mouvement totale.

2.4.4 Moment cinétique

Nous considérons maintenant un potentiel qui est invariant sous une rotation globale de toutes les positions,

$$\boxed{V(\mathbf{D} \cdot \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{D} \cdot \mathbf{r}_N) = V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)} \quad (47)$$

où \mathbf{D} est une matrice de rotation qui vérifie $\mathbf{D}^T \cdot \mathbf{D} = \mathbf{1}$. Une rotation infinitésimale quelconque des positions peut être écrite sous la forme

$$\delta \mathbf{r}_\alpha = \delta t \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}_\alpha, \quad (48)$$

où $\boldsymbol{\omega}$ est la vitesse angulaire de cette rotation "virtuelle" dans repère fixe du laboratoire et δt est un incrément infinitésimal du temps. A cause de l'invariance (47) on obtient

$$\delta \mathcal{L} = \sum_{\alpha=1}^N \delta \mathbf{r}_{\alpha}^T \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{r}_{\alpha}} = \sum_{\alpha=1}^N (\delta t \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}_{\alpha})^T \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{r}_{\alpha}} = 0,$$

et avec les équations de Lagrange

$$\sum_{\alpha=1}^N (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}_{\alpha})^T \cdot \left\{ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}} \right) \right\} = \boldsymbol{\omega}^T \cdot \left\{ \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{r}_{\alpha} \times \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}} \right) \right\} = 0. \quad (49)$$

Ici on utilise que $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \mathbf{b} \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{a})$. Si on demande que le potentiel soit invariant par rapport à une rotation quelconque, $\boldsymbol{\omega}$ est un vecteur arbitraire et il suit que

$$\frac{d}{dt} \left\{ \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{r}_{\alpha} \times m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \right\} = 0, \quad (50)$$

utilisant que $\partial \mathcal{L} / \partial \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} = m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}$ et que $\dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \times m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} = \mathbf{0}$. L'invariance de l'énergie potentielle sous une rotation globale a donc pour conséquence que le moment cinétique est conservé,

$$\mathbf{L} = \left\{ \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{r}_{\alpha} \times m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \right\} = \text{const.} \quad (51)$$

Si le potentiel n'est invariant que sous une rotation autour d'un axe *fixe* en direction d'un vecteur \mathbf{n} , la vitesse angulaire de la rotation virtuelle exprimée par la matrice de rotation \mathbf{D} a la forme $\boldsymbol{\omega} = \omega \mathbf{n}$. Il suit donc de l'expression auxiliaire (49) que la projection du moment cinétique sur \mathbf{n} est conservée,

$$\mathbf{n}^T \cdot \mathbf{L} = \mathbf{n}^T \cdot \left\{ \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{r}_{\alpha} \times m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \right\} = \text{const.} \quad (52)$$

2.5 Lois d'échelle et similitude mécanique [1]

Certaines propriétés physiques d'un système dynamique peuvent être dévoilées sans solution explicite des équations du mouvement. On remarque que la multiplication de la fonction de Lagrange avec un facteur global ne change pas la forme des équations du mouvement. Tout changement d'échelle des coordonnées et du temps menant à un facteur globale pour L conduit donc

à des trajectoires géométriquement similaires. Une condition pour cela est que l'énergie potentielle est une fonction homogène dans les positions, tel que

$$\boxed{V(\lambda \mathbf{r}_1, \dots, \lambda \mathbf{r}_N) = \lambda^h V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)} \quad (53)$$

Ici $\lambda > 0$ est un facteur d'échelle et $h \in \mathbb{R}$ et le degré de l'homogénéité. Avec les transformations

$$\boxed{\mathbf{r}_\alpha \rightarrow \lambda \mathbf{r}_\alpha \equiv \mathbf{r}'_\alpha,} \quad (54)$$

$$\boxed{t \rightarrow \mu t \equiv t',} \quad (55)$$

l'énergie cinétique est multipliée par un facteur $(\lambda/\mu)^2$ et l'énergie potentielle par un facteur λ^h . On voit que le choix $(\lambda/\mu)^2 = \lambda^h$, ou bien

$$\mu = \lambda^{1-h/2} \quad (56)$$

mène à $\mathcal{L} \rightarrow \lambda^h \mathcal{L}$ et donc à des équations du mouvement *géométriquement similaires*. Si τ est le temps pour un mouvement caractéristique et L l'amplitude spatiale correspondante, on aura alors

$$\boxed{\left(\frac{\tau'}{\tau}\right) = \left(\frac{L'}{L}\right)^{1-h/2}} \quad (57)$$

où τ' et L' sont les quantités correspondantes du système décrit par les variables t' et \mathbf{r}'_α .

Afin d'illustrer l'utilité des lois d'échelle dérivées par les équations de Langevin on considère quelques applications.

1. Pour un potentiel quadratique on a $h = 2$ et par conséquent

$$\frac{\tau'}{\tau} = 1, \quad (58)$$

ce qui exprime que le temps caractéristique pour un mouvement ne dépend pas de son amplitude. Considérons une oscillation en une dimension, tel que $U(x) = kx^2/2$, avec $k > 0$. Dans ce cas, l'équation du mouvement est $\ddot{x}(t) + \Omega^2 x(t) = 0$, avec $\Omega = \sqrt{k/m}$. La solution est périodique, $x(t) = x(0) \cos \Omega t + (\dot{x}(0)/\Omega) \sin \Omega t$, et la période de l'oscillation, $\tau = 2\pi/\Omega$, ne dépend effectivement pas de son amplitude.

2. Si le potentiel est une fonction linéaire des positions, on a $h = 1$ et

$$\frac{\tau'}{\tau} = \sqrt{\frac{L'}{L}}. \quad (59)$$

Considérons comme application la chute libre près de la surface de la terre. Dans ce cas $U(z) = -mgz$, où g est l'accélération gravitationnelle,

et l'équation du mouvement est $\ddot{z}(t) = -g$, avec la solution $z(t) = z(0) + \dot{z}(0)t - gt^2/2$. Posant $\dot{z}(0) = 0$, le temps pour une chute $z(0) = L \rightarrow z(\tau) = 0$ est donné par $\tau = \sqrt{2L/g}$, et si on compare les temps τ et τ' pour une chute à partir des hauteurs L et L' , respectivement, on obtient effectivement (59).

3. Regardons finalement le mouvement d'une planète de masse M dans un potentiel gravitationnel d'une étoile positionnée à $\mathbf{r} = \mathbf{0}$, dont la masse est supposé infinie. Si \mathbf{r} est la position de la planète, son énergie potentielle a la forme $U(\mathbf{r}) = \gamma m |\mathbf{r}|^{-1}$, où γ est la constante de gravitation. On voit que U est une fonction homogène de degré $h = -1$ et par conséquent

$$\frac{\tau'}{\tau} = \left(\frac{L'}{L} \right)^{3/2}. \quad (60)$$

L'astronome Kepler a observé que orbites des planètes du système solaire une une forme elliptique, et si τ est le temps pour un tour complète (période sidérale), la relation (60) exprime la fameuse troisième loi de Kepler : Le carré de la période sidérale d'une planète est directement proportionnelle au cube du demi-grand axe a de sa trajectoire elliptique autour du soleil.

2.6 Forces de friction

Afin de modéliser un système dynamique d'une manière réaliste, on est souvent amené à considérer des effets de friction qui dépendent des *vitesse*s des composantes. Ces effets conduisent à une perte d'énergie et sur le plan formel ils brisent la symétrie des équations de Langevin sous la transformation $t \rightarrow -t$. Ceci indique la présence de *phénomènes irréversibles*. Considérant le mouvement d'un point matériel, on peut introduire une force de friction, $\mathbf{F}_r(\dot{\mathbf{r}})$, dont l'amplitude croit avec la vitesse. Dans le cas le plus simple on suppose que l'amplitude croit d'un manière linéaire avec la vitesse,

$$\boxed{\mathbf{F}_r(\dot{\mathbf{r}}) = -m\eta\dot{\mathbf{r}}} \quad (61)$$

où η a la dimension temps⁻¹. Considérons la dynamique d'une particule représentée par un point matériel sous l'influence d'une force qui dérive d'un potentiel et d'une force de friction de la forme (61). Dans ce cas, l'équation du mouvement devient

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -\frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} - m\eta\dot{\mathbf{r}}. \quad (62)$$

En multipliant cette équation avec $\dot{\mathbf{r}}$ on voit que

$$\left(m\ddot{\mathbf{r}} + \frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \right)^T \cdot \dot{\mathbf{r}} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^T \cdot \dot{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r}) \right) = -m\eta \dot{\mathbf{r}}^T \cdot \dot{\mathbf{r}},$$

ou bien

$$\boxed{\frac{d}{dt}(T + V) = -2\eta T < 0} \quad (63)$$

ce qui montre bien une décroissance permanente de l'énergie totale, $E = T + V$. On note également que l'équation du mouvement (62) n'est pas invariante par la transformation $t \rightarrow -t$.

D'une manière plus générale on peut introduire une force généralisée de friction. En utilisant la définition (14) des forces généralisées, on définit

$$Q_k^{(r)} = -\eta \sum_{\alpha=1}^n m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^T \cdot \frac{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}{\partial q_k} \quad (64)$$

et les équations de Lagrange (19) deviennent

$$\boxed{\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} = Q_k^{(r)}, \quad k = 1, \dots, f} \quad (65)$$

On note ici que

$$\begin{aligned} Q_k^{(r)} &= -\eta \sum_{\alpha=1}^n m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^T \cdot \frac{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}{\partial q_k} = -\eta \sum_{\alpha=1}^n m_{\alpha} \left(\sum_{l=1}^f \dot{q}_l \frac{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}{\partial q_l} \right)^T \cdot \frac{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}{\partial q_k} \\ &= -\eta \sum_{l=1}^f \dot{q}_l \sum_{\alpha=1}^n m_{\alpha} \left(\frac{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}{\partial q_l} \right)^T \cdot \frac{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}{\partial q_k}. \end{aligned}$$

Avec (12) et (13) on trouve alors que

$$\boxed{Q_k^{(r)} = -\eta \frac{\partial T(q, \dot{q})}{\partial \dot{q}_k}} \quad (66)$$

L'énergie cinétique joue alors le rôle d'un "potentiel" pour les forces de friction linéaires. Si l'on reprend la dérivation de la loi de conservation de l'énergie (30) la présence de forces de friction mène à

$$\boxed{\frac{d\mathcal{H}}{dt} = -2\eta T(q, \dot{q}) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}} \quad (67)$$

Ici on utilise que l'énergie cinétique est une fonction homogène de degré 2 des vitesses généralisées (voir eq. (12)), tel que $\sum_{k=1}^f \dot{q}_k (\partial T(q, \dot{q}) / \partial \dot{q}_k) = 2T(q, \dot{q})$.

Exemple 6. Pendule avec friction:

Le lagrangien du pendule sans friction a la forme

$$L = \frac{m}{2} l^2 \dot{\theta}^2 - mgl(1 - \cos \theta)$$

et mène à l'équation du mouvement

$$ml^2\ddot{\theta}(t) = -mgl \sin \theta(t).$$

La force de friction en coordonnées généralisées est

$$Q_{\theta}^{(r)} = -\eta \frac{\partial T}{\partial \dot{\theta}} = -ml^2\eta\dot{\theta}$$

et mène à l'équation du mouvement modifiée

$$ml^2\ddot{\theta}(t) = -mgl \sin \theta(t) - Q_{\theta}^{(r)}.$$

Avec $\Omega = \sqrt{g/l}$ on obtient la forme canonique

$$\boxed{\ddot{\theta}(t) + \eta\dot{\theta} + \Omega^2 \sin \theta(t) = 0}$$

2.7 Viriel [1]

En coordonnées cartésiennes l'énergie cinétique est une fonction quadratique des positions,

$$T = \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^T \cdot \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}, \quad (68)$$

et la fonction de Lagrange a la forme

$$L = \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^T \cdot \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} - V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N). \quad (69)$$

Comme les quantités du mouvement sont $\mathbf{p}_{\alpha} = \partial L / \partial \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} = m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}$, on a

$$\sum_{\alpha=1}^N \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^T \cdot \frac{\partial T}{\partial \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}} = 2T = \frac{d}{dt} \left\{ \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{p}_{\alpha}^T \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \right\} - \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{r}_{\alpha}^T \cdot \dot{\mathbf{p}}_{\alpha}.$$

En utilisant les équations de Lagrange,

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}, \quad (70)$$

on voit que $\dot{\mathbf{p}}_{\alpha} = -\partial V / \partial \mathbf{r}_{\alpha}$, tel que

$$2T = \frac{d}{dt} \left\{ \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{p}_{\alpha}^T \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \right\} + \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{r}_{\alpha}^T \cdot \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}.$$

On prend maintenant la moyenne temporelle de cette expression sur une période infinie. Pour une fonction $f(t)$ quelconque la moyenne temporelle est donnée par

$$\bar{f} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt f(t), \quad (71)$$

et on voit que $\overline{df/dt} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} (\int_0^\tau dt df(t)/dt)/\tau = \lim_{\tau \rightarrow \infty} (f(\tau) - f(0))/\tau = 0$ si les variations de f sont limitées. Partant des forces "raisonnables" qui agissent sur le système considéré on aura alors

$$2\bar{T} = \sum_{\alpha=1}^N \overline{\mathbf{r}_\alpha^T \cdot \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_\alpha}}. \quad (72)$$

Si le potentiel est une fonction homogène de degré h (voir eq. (53)), elle vérifie la relation

$$\sum_{\alpha=1}^N \mathbf{r}_\alpha^T \cdot \frac{\partial V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\partial \mathbf{r}_\alpha} = hV(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (73)$$

et avec (72) nous pouvons écrire

$$2\bar{T} = h\bar{V}. \quad (74)$$

Comme l'énergie est conservée pour notre système, $T + V = E = \text{const.}$, on peut conclure que

$$\boxed{\bar{T} = \frac{h}{h+2}E, \quad \bar{V} = \frac{2}{h+2}E} \quad (75)$$

Pour un potentiel quadratique ($h = 2$) on aura alors $\bar{V} = \bar{T}$ et pour un potentiel de Coulomb ou un potentiel de gravitation ($h = -1$) on trouve $\bar{V} = -2\bar{T}$.

3 Mécanique de Hamilton

3.1 Principe de variation

On montrera maintenant que les équations de Lagrange peuvent aussi être dérivées en solvant un problème de variation, en considérant la minimisation la fonctionnelle

$$\boxed{S = \int_{t_0}^{t_1} dt \mathcal{L}(q(t), \dot{q}(t), t) = \text{Min}(q(t))} \quad (76)$$

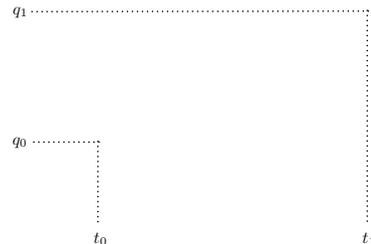


FIGURE 4 – Trajectoire optimale, (ligne continue) et variations (traits interrompus)

où $q(t_0) = q_0$ et $q(t_1) = q_1$ sont des points fixes (voir Fig. 4) et \mathcal{L} est la fonction de Lagrange donnée par l'éq. (18). La fonctionnelle S associée à chaque trajectoire passant par les points (t_0, q_0) et (t_1, q_1) a une valeur $S[q(t)]$. Une condition nécessaire pour que S soit minimale est

$$\delta S = \int_0^t dt \delta L = 0. \quad (77)$$

On a donc

$$\delta S = \int_0^t dt \sum_{k=1}^f \left\{ \delta q_k \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} + \delta \dot{q}_k \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \right\} = 0.$$

Utilisant que $\delta \dot{q}_k = \frac{d}{dt} \delta q_k$ on trouve par intégration par partie du deuxième terme

$$\delta S = \left[\sum_{k=1}^f \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \delta q_k \right]_{t_0}^{t_1} + \int_{t_0}^{t_1} dt \sum_k \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \right\} \delta q_k = 0.$$

Les variations δq_k sont arbitraires, sauf pour $t = t_0$ et pour $t = t_1$, où $\delta q_k(t_0) = \delta q_k(t_1) = 0$. Comme condition nécessaire pour $\delta S = 0$ on retrouve donc les équations de Lagrange (19),

$$\boxed{\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} \quad (k = 1, \dots, f)} \quad (19)$$

3.2 Equations de Hamilton et espace de phases

On définit la quantité de mouvement associée à la coordonnée q_k par

$$\boxed{p_k = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k}} \quad (78)$$

et $p = \{p_1, \dots, p_f\}$ comme notation compacte pour l'ensemble des quantités de mouvement. Avec cette définition et avec l'utilisation des équations d'Euler-Lagrange le différentiel de la fonction de Lagrange peut être écrite sous la forme

$$d\mathcal{L} = \sum_{i=1}^f \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} d\dot{q}_k + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} dq_k + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \right\} = \sum_{i=1}^f \left\{ p_k d\dot{q}_k + \dot{p}_k dq_k + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \right\}.$$

On peut également écrire

$$d\mathcal{L} = \sum_{i=1}^f \left\{ d(p_k \dot{q}_k) - \dot{q}_k dp_k + \dot{p}_k dq_k + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \right\},$$

ou bien

$$d \left(\sum_{i=1}^f \dot{q}_i p_i - \mathcal{L} \right) = \sum_{i=1}^f \left\{ \dot{q}_i dp_i - \dot{p}_i dq_i - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \right\}. \quad (79)$$

Cette relation définit la fonction de Hamilton

$$\boxed{\mathcal{H}(p, q, t) = \sum_{i=1}^f \dot{q}_i p_i - \mathcal{L}(q, \dot{q}, t)} \quad (80)$$

où les vitesses \dot{q} sont exprimées comme fonctions de p, q et t , grâce à (78), et on voit que

$$\boxed{\dot{q}_k = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_k}} \quad (81)$$

$$\boxed{\dot{p}_k = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_k}} \quad (82)$$

Ceci sont les équations de Hamilton qui décrivent la dynamique du système en considération dans l'espace *d phases*, qui est engendré par les variables dynamiques indépendantes p et q . L'équation (79) montre également que

$$\boxed{\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}} \quad (83)$$

Partant de la fonction de la forme générique

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}, t) = \sum_{k,l} \frac{1}{2} a_{kl}(q) \dot{q}_k \dot{q}_l - U(q, t), \quad (84)$$

pour la fonction de Lagrange on trouve que la fonction de Hamilton correspondante a la forme

$$\mathcal{H}(p, q, t) = \sum_{k,l} \frac{1}{2} (\mathbf{a}^{-1})_{kl}(q) p_k p_l + U(q, t), \quad (85)$$

où $(\mathbf{a}^{-1})_{kl}$ sont les coefficients de la matrice inverse de $\mathbf{a} = (a_{kl})$. \mathcal{H} est donc la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle et donc l'énergie totale du système.

Exemple 7. Hamiltonien d'une charge dans un champ magnétique:

Partant de la fonction de Lagrange

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^T \cdot \dot{\mathbf{r}} - Q(\phi(\mathbf{r}, t) - \dot{\mathbf{r}}^T \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t))$$

on trouve pour la quantité du mouvement associée à $\dot{\mathbf{r}}$

$$\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{r}} + Q\mathbf{A}.$$

L'hamiltonien est construit par

$$\mathcal{H} = \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{r}} - \mathcal{L}$$

où $\dot{\mathbf{r}}$ doit être exprimée par \mathbf{r} et $\dot{\mathbf{r}}$. Ceci donne

$$\mathcal{H} = \frac{(\mathbf{p} - Q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2}{2m} + Q\phi(\mathbf{r}, t)$$

3.3 Crochets de Poisson

On regarde une variable dynamique $a(p, q, t)$ quelconque. La dérivée totale par rapport au temps est

$$\frac{da}{dt} = \frac{\partial a}{\partial t} + \sum_{i=1}^f \left\{ \dot{q}_k \frac{\partial a}{\partial q_k} + \dot{p}_k \frac{\partial a}{\partial p_k} \right\}.$$

Avec les équations de Hamilton ceci devient

$$\frac{da}{dt} = \frac{\partial a}{\partial t} + \sum_{i=1}^f \left\{ \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_k} \frac{\partial a}{\partial q_k} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_k} \frac{\partial a}{\partial p_k} \right\}. \quad (86)$$

Introduisant le crochet de Poisson de deux variables dynamiques $u(p, q)$ et $v(p, q)$ par

$$\{u, v\} = \sum_{i=1}^f \left\{ \frac{\partial u}{\partial p_k} \frac{\partial v}{\partial q_k} - \frac{\partial v}{\partial p_k} \frac{\partial u}{\partial q_k} \right\}, \quad (87)$$

on peut écrire

$$\frac{da}{dt} = \frac{\partial a}{\partial t} + \{\mathcal{H}, a\} \quad (88)$$

Comme $\{\mathcal{H}, \mathcal{H}\} = 0$, on voit en particulier que

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t}. \quad (89)$$

Ceci montre que \mathcal{H} est conservé si $\partial_t \mathcal{H} = 0$. Une variable quelconque est une constante du mouvement si $\partial_t a = 0$ et $\{\mathcal{H}, a\} = 0$.

3.4 Invariance du volume de l'espace de phases

On considère un système dynamique qui est décrit par un ensemble de coordonnées q et les quantités de mouvement p associées. L'évolution de p et q dans le temps peut être vu comme transformation de coordonnées

$$q_t = q(p_0, q_0; t) \quad (90)$$

$$p_t = p(p_0, q_0; t) \quad (91)$$

où $p_t = p(t)$ et $q_t = q(t)$ sont les nouvelles coordonnées, $p_0 = p(0)$ et $q_0 = q(0)$ les coordonnées de départ et t un paramètre de la transformation. Pour les considérations suivantes il convient d'introduire une notation pour toutes les variables p et q de l'espace des phases. On définit

$$X = \{q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f\} \quad (92)$$

comme notation pour l'ensemble des coordonnées dans l'espace de phase et

$$\mathbf{X} = (p_1, \dots, p_f, q_1, \dots, q_f)^T \quad (93)$$

pour la patrice de colonne contenant les éléments de X . La dernière sera utilisée dans les opérations matricielles. Avec ceci

$$\mathbf{X}_t = \mathbf{X}(X_0; t) \quad (94)$$

décrit la transformation de coordonnées $\mathbf{X}_0 \rightarrow \mathbf{X}_t$ qui est générée par les équations du mouvement

$$\dot{\mathbf{X}} = \mathbf{V}(X), \quad (95)$$

où $V_k = -\partial\mathcal{H}/\partial q_k$ pour $k = 1, \dots, f$ et $V_k = \partial\mathcal{H}/\partial p_k$ pour $k = f + 1, \dots, 2f$. Considérons maintenant une évolution infinitésimale dans le temps,

$$\mathbf{X}_{dt} \approx \mathbf{X}_0 + dt \mathbf{V}(X_0). \quad (96)$$

Les éléments de volume pour $t = dt$ et $t = 0$ sont liés par

$$d^{2f} X_{dt} = \det(\mathbf{J}(dt)) d^{2f} X_0, \quad (97)$$

où $\det(\mathbf{J})$ est le déterminant de la matrice de Jacobi, dont les éléments sont donnés par

$$J_{kl}(dt) = \frac{\partial X_k^{dt}}{\partial X_l^0}. \quad (98)$$

Avec (96) on obtient alors

$$J_{kl}(dt) = \delta_{kl} + dt \left. \frac{\partial V_k}{\partial X_l} \right|_{X=X_0}. \quad (99)$$

On peut maintenant utiliser l'identité $\det(\mathbf{1} + \epsilon \mathbf{A}) \approx 1 + \text{tr} \mathbf{A}$ qui est valable si $\epsilon \ll 1$. Ici "tr" dénote la trace d'une matrice. Avec (99) on obtient donc

$$\det(\mathbf{J}(dt)) \approx 1 + dt \sum_{k=1}^{2f} \left. \frac{\partial V_k}{\partial X_k} \right|_{X=X_0} \equiv 1 + dt \nabla \cdot \mathbf{V}|_{X=X_0}. \quad (100)$$

Ici V est considéré comme un champ vectoriel et $\vec{\nabla} \cdot \vec{V}$ est sa divergence. Toutes ces considérations sont *a priori* valables pour un système dynamique quelconque et pour la cas spécifique de la dynamique Hamiltonienne on a

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = \sum_{k=1}^{2f} \left\{ \frac{\partial \dot{p}_k}{\partial q_k} + \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial p_k} \right\} = \sum_{k=1}^{2f} \left\{ -\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_k \partial q_k} + \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_k \partial p_k} \right\} = 0, \quad (101)$$

et par conséquent

$$\boxed{\det(\mathbf{J}(dt)) = 1}$$

Pour un temps t fini on peut décomposer l'intervalle $[0, t]$ en sous-intervalles $[0, dt]$, $[dt, 2dt]$, etc., tel que $t = ndt$. Si l'on introduit pour chaque point $t = jdt$ des coordonnées X_{jdt} , on obtient pour le déterminant de la matrice de Jacobi résultante

$$\left(\frac{\partial X_t}{\partial X_0} \right) = \left(\frac{\partial X_t}{\partial X_{t-dt}} \right) \left(\frac{\partial X_{t-dt}}{\partial X_{t-2dt}} \right) \cdots \left(\frac{\partial X_{dt}}{\partial X_0} \right).$$

En prenant $n \rightarrow \infty$, où $dt \rightarrow 0$, on montre donc que

$$\boxed{\det(\mathbf{J}(t)) = 1} \quad (102)$$

Par conséquent, le élément de volume de l'espace de phases est conservé,

$$\boxed{d^{2f} X_t = d^{2f} X_0} \quad (103)$$

ainsi que le volume total. Ceci est une conséquence de l'incompressibilité du champs de vitesse dans l'espace de phase qui est exprimée par la relation $\vec{\nabla} \cdot \vec{V} = 0$.

Exemple 8. Pendule - Oscillateur non-linéaire:

Le pendule montré dans la figure 1 est un système physique simple afin d'illustrer les idées de formulation hamiltonienne de la mécanique analytique. Partant de la fonction de Lagrange

$$L = \frac{m}{2} l^2 \dot{\theta}^2 - mgl(1 - \cos \theta),$$

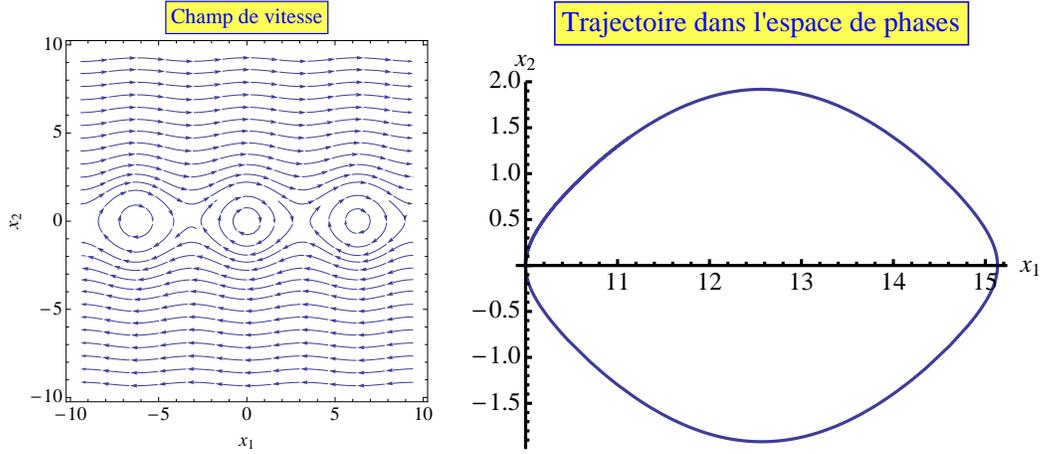


FIGURE 5 – **A gauche** : Champ de vitesse \mathbf{V} pour les équations du mouvement (104) et (105). **A droite** : Trajectoire correspondante dans l'espace de phases pour $\Omega = 1$ et les conditions initiales $x_1(0) = 10, x_2(0) = 0$.

on trouve pour la quantité du mouvement associées à θ

$$p_\theta = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}} = ml^2 \dot{\theta}.$$

Par la construction $\mathcal{H} = p_\theta \dot{\theta} - \mathcal{L}$ on trouve

$$\mathcal{H} = \frac{p_\theta^2}{2ml^2} + mgl(1 - \cos \theta).$$

et les équations de Hamilton deviennent

$$\begin{aligned} \dot{\theta} &= \frac{p_\theta}{ml^2}, \\ \dot{p}_\theta &= -mgl \sin \theta. \end{aligned}$$

Si nous définissons $\Omega = \sqrt{g/l}$, $x_1 = \theta$ et $x_2 = p_\theta/(ml^2\Omega)$ ces équations différentielles prennent la forme simple

$$\dot{x}_1(t) = \Omega x_2(t), \quad (104)$$

$$\dot{x}_2(t) = -\Omega \sin(x_1(t)). \quad (105)$$

La figure 5 montre le champ de vitesse pour l'oscillateur non-linéaire (à gauche) et un portrait de phases pour une trajectoire particulière. Si $|x_1| \ll 1$ les équations différentielles (104) et (105) peuvent être linéarisées, utilisant que $\sin x_1 \approx x_1$. La figure 6 montre l'influence de la linéarisation sur le champ de vitesse et le portrait de phase.

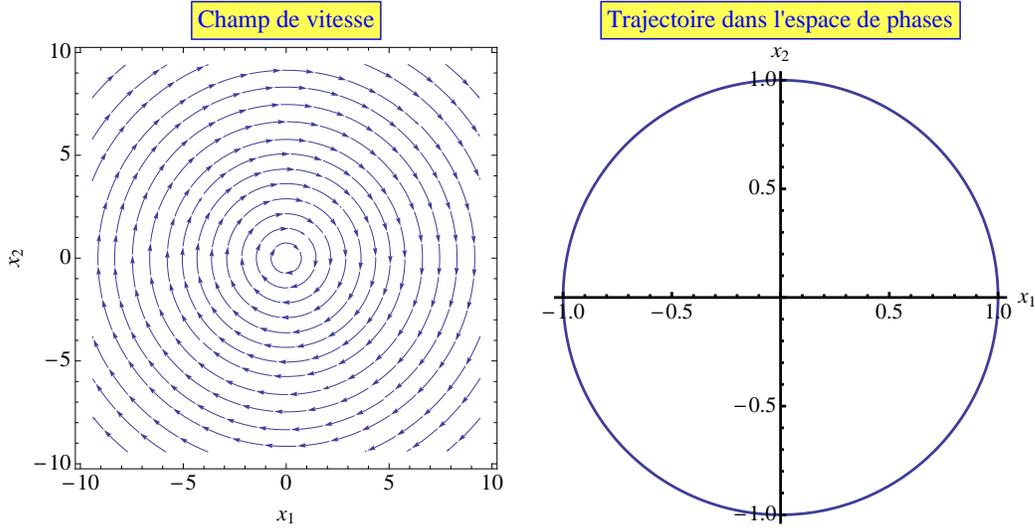


FIGURE 6 – Comme dans la figure 5, mais pour les conditions initiales $x_1(0) = 1, x_2(0) = 0$.

4 Mécanique de Gauß

4.1 Le concept

En 1829 Carl Friedrich Gauß publia un article très succinct [4] dans lequel il reformule le principe des déplacements virtuels de D'Alembert [3] pour la dérivation des équations de mouvement d'un système dynamique sous contraintes comme problème de minimisation des forces de contraintes (principe de la moindre contrainte). L'avantage de cette formulation est de pouvoir prendre en compte d'une manière très élégante aussi des contraintes dites non-holonomes qui impliquent les vitesses de particules et qui ne peuvent pas être exprimées sous forme de fonctions des positions des particules. L'idée est d'exprimer les déplacements virtuels $\delta \mathbf{r}_\alpha$ dans le principe de D'Alembert,

$$\sum_{\alpha=1}^N (m_\alpha \ddot{\mathbf{r}}_\alpha - \mathbf{F}_\alpha)^T \cdot \delta \mathbf{r}_\alpha = 0, \quad (\text{voir Eq. (5)})$$

par la variation des accélérations. A un instant t , on a

$$\delta \mathbf{r}_\alpha(t + dt) = \delta \left\{ \mathbf{r}_\alpha(t) + dt \dot{\mathbf{r}}_\alpha(t) + \frac{dt^2}{2} \ddot{\mathbf{r}}_\alpha(t) \right\} \propto \delta \ddot{\mathbf{r}}_\alpha(t), \quad (106)$$

car les positions et les vitesses des particules doivent être considérées comme invariables. Afin de connaître les positions et vitesses d'un système à un instant $t + dt$, on résout, en fait, formellement les équations de mouvement de

Newton, $m_\alpha \ddot{\mathbf{r}}_\alpha(t) = \mathbf{F}_\alpha(t) + \mathbf{Z}_\alpha(t)$, avec les positions et vitesses *données* à l'instant t . Avec cette réflexion, le principe de D'Alembert devient un problème de minimisation d'une fonction par rapport aux accélérations encore inconnues,

$$dQ(\ddot{\mathbf{r}}_1, \dots, \ddot{\mathbf{r}}_N) = \sum_{\alpha=1}^N (m_\alpha \ddot{\mathbf{r}}_\alpha - \mathbf{F}_\alpha)^T \cdot \delta \ddot{\mathbf{r}}_\alpha = 0, \quad (107)$$

où la fonction à minimiser est

$$Q(\ddot{\mathbf{r}}_1, \dots, \ddot{\mathbf{r}}_N) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha (\ddot{\mathbf{r}}_\alpha - \mathbf{F}_\alpha/m_\alpha)^2. \quad (108)$$

Le principe de moindre contrainte vient du fait que l'expression (108) peut être écrit sous la forme

$$Q = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha^{-1} \mathbf{Z}_\alpha^2 = \min. \quad (109)$$

Il est important de comprendre que la fonction $Q(\ddot{\mathbf{r}}_1, \dots, \ddot{\mathbf{r}}_N)$ donnée par l'Eq. (108) est à minimiser en présence des contraintes imposées. Il est, en fait, évident que la minimisation de $Q(\ddot{\mathbf{r}}_1, \dots, \ddot{\mathbf{r}}_N)$ sans contraintes mène aux équations de Newton, $m_\alpha \ddot{\mathbf{r}}_\alpha = \mathbf{F}_\alpha$. Les contraintes imposées peuvent être de la forme holonome (2),

$$\sigma_j(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \equiv 0, \quad j = 1, \dots, n_h, \quad (\text{voir Eq. (2)})$$

mais, comme déjà indiqué, on peut également traiter des contraintes non-holonomes de la forme

$$\rho_j(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \dot{\mathbf{r}}_1, \dots, \dot{\mathbf{r}}_N) \equiv 0, \quad j = 1, \dots, n_{nh}. \quad (110)$$

En différentiant les contraintes deux fois par rapport à t et les contraintes non-holonomes une fois, on obtient $n_c = n_h + n_{nh}$ contraintes pour les accélérations,

$$g_j(\ddot{\mathbf{r}}_1, \dots, \ddot{\mathbf{r}}_N) = 0, \quad j = 1, \dots, n_c, \quad (111)$$

et la fonction $Q(\ddot{\mathbf{r}}_1, \dots, \ddot{\mathbf{r}}_N)$ doit être minimisée en présence de ces contraintes. Cette tâche peut être accomplie par la méthode des paramètres de Lagrange, en minimisant la fonction étendue,

$$\begin{aligned} \tilde{Q}(\ddot{\mathbf{r}}_1, \dots, \ddot{\mathbf{r}}_N, \mu_1, \dots, \mu_{n_c}) &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha (\ddot{\mathbf{r}}_\alpha - \mathbf{F}_\alpha/m_\alpha)^2 \\ &\quad + \sum_{j=1}^{n_c} \mu_j g_j(\ddot{\mathbf{r}}_1, \dots, \ddot{\mathbf{r}}_N), \end{aligned} \quad (112)$$

par rapport à $\ddot{\mathbf{r}}_1, \dots, \ddot{\mathbf{r}}_N$ et μ_1, \dots, μ_{n_c} . La minimisation par rapport $\ddot{\mathbf{r}}_1, \dots, \ddot{\mathbf{r}}_N$ donne

$$m_\beta \ddot{\mathbf{r}}_\beta = \mathbf{F}_\beta + \sum_{j=1}^{n_c} \mu_j \frac{\partial g_j(\ddot{\mathbf{r}}_1, \dots, \ddot{\mathbf{r}}_N)}{\partial \ddot{\mathbf{r}}_\beta}, \quad \beta = 1, \dots, N, \quad (113)$$

et celle par rapport aux paramètres de Lagrange donne les contraintes imposées. L'insertion de la forme générale (113) des accélérations dans les équations (111) mènent à un système d'équation linéaires pour les paramètres de Lagrange, μ_1, \dots, μ_{n_c} .

Dans les considérations précédentes on est parti de l'hypothèse que les masses remplissent toutes la condition $m_\alpha > 0$, sachant qu'il y a des situations où le concept de "centres de forces" sans masse a un sens physique pour des systèmes dynamiques sous contraintes géométriques. De tels centres de force apparaissent par exemple dans le modèle de Rahman et Stillinger pour une molécule d'eau qui a été conçu pour la simulation de l'eau par la méthode de dynamique moléculaire (*Molecular Dynamics*) [8]. Dans ce modèle "rigide", chaque atome d'oxygène est entouré par une construction tétraédrique de deux atomes d'hydrogène portant une charge positive et deux centres de force sans masse portant ma même charge de signe opposé. Dans la référence [11] le problème des centres de force sans masse est discuté et il est montré dans quelles conditions ils peuvent être traités.

4.2 Exemples

Le principe de Gauß sera maintenant illustré pour deux exemples, commençant par l'exemple du pendule qui a été déjà traité.

Exemple 9. Pendule en coordonnées cartésiennes par le principe de Gauß:

Cet exemple a été déjà traité pour illustrer le principe des déplacements virtuels de D'Alembert et on le considère de nouveau afin d'illustrer le principe de Gauß. Partant des contraintes

$$\begin{aligned} \sigma_1(\mathbf{r}) &= x^2 + y^2 + (z - l)^2 - l^2 \equiv 0, \\ \sigma_2(\mathbf{r}) &= y \equiv 0, \end{aligned}$$

qui fixent, respectivement, la distance l de la masse m du point de fixation et le plan du mouvement on obtient par différentiation simple les contraintes

$$\begin{aligned} 2(z - l)\dot{z} + 2x\dot{x} &= 0, \\ \dot{y} &= 0, \end{aligned}$$

pour les vitesses et la différentiation double donne les contraintes

$$\begin{aligned} g_1(\ddot{\mathbf{r}}) &\equiv \ddot{x}x + \ddot{y}y + \ddot{z}(z - l) + \dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2 = 0, \\ g_2(\ddot{\mathbf{r}}) &\equiv \ddot{y} = 0, \end{aligned}$$

pour les accélérations. La fonction Q étendue à minimiser par rapport $\{\ddot{\mathbf{r}}, \mu_1, \mu_2\}$ est alors

$$\tilde{Q}(\ddot{\mathbf{r}}, \mu_1, \mu_2) = \frac{1}{2}m(\ddot{\mathbf{r}} - \mathbf{F}/m)^2 + \sum_{j=1}^2 \mu_j g_j(\ddot{\mathbf{r}}),$$

où $\mathbf{F} = -mge_z$ est la force de gravitation. La minimisation par rapport aux composantes du vecteur $\ddot{\mathbf{r}}$ mène aux équations du mouvement

$$\begin{pmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{y} \\ \ddot{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -g \end{pmatrix} - \frac{\mu_1}{m} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z - l \end{pmatrix} - \frac{\mu_2}{m} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

qui contiennent les paramètres de Lagrange μ_j encore inconnus. Pour les déterminer on insert cette expression pour les accélérations dans les equations $g_1(\ddot{\mathbf{r}}) = 0$ et $g_2(\ddot{\mathbf{r}}) = 0$. Ceci donne deux équations linéaires pour μ_1 et μ_2 dont la solution est

$$\mu_1 = \frac{m(g(l-z) + \dot{x}^2 + \dot{z}^2)}{2l^2},$$

$$\mu_2 = 0.$$

Avec ceci on obtient finalement les équations de mouvement explicites

$$\ddot{x} = -\frac{x(g(l-z) + \dot{x}^2 + \dot{z}^2)}{l^2},$$

$$\ddot{y} = 0,$$

$$\ddot{z} = -g + \frac{(l-z)(g(l-z) + \dot{x}^2 + \dot{z}^2)}{l^2}.$$

Ces équations différentielles sont à résoudre avec des conditions initiales pour \mathbf{r} et $\dot{\mathbf{r}}$ qui vérifient les contraintes imposées.

Le deuxième exemple concerne une application du principe de Gauß pour établir les équations de mouvement d'un système mécanique qui est soumis à une contrainte non-holonome.

Exemple 10. Oscillateur harmonique à température constante:

On considère un oscillateur qui se meut dans un potentiel harmonique de la forme $V(\mathbf{r}) = K|\mathbf{r}|^2/2$ et qui est soumis à la contrainte

$$\frac{m}{2}|\dot{\mathbf{r}}|^2 = \frac{3}{2}k_B T.$$

On impose alors que l'énergie cinétique soit constante, où k_B est la constante Boltzmann ($k_B = 1.380649 \times 10^{-23} \text{J/K}$) et T la température en Kelvin. Cette contrainte représente un thermostat simple pour maintenir une température constante pour un système mécanique dont l'énergie totale (énergie cinétique plus énergie potentielle) serait constante sans cette contrainte. La méthode a été proposée par W.G. Hoover pour la simulation de systèmes à N corps (par ex. un liquide) par la méthode de dynamique moléculaire (*Molecular Dynamics simulation*) (voir par ex. la référence [9]). La différentiation de la contrainte imposée par rapport donne une contrainte pour les composantes du vecteur de l'accélération de l'oscillateur,

$$g(\ddot{\mathbf{r}}) \equiv m(\dot{x}\ddot{x} + \dot{y}\ddot{y} + \dot{z}\ddot{z}) = 0.$$

La fonction Q étendue à minimiser est ici

$$\tilde{Q}(\ddot{\mathbf{r}}, \mu) = \frac{1}{2}m(\ddot{\mathbf{r}} - \mathbf{F}/m)^2 + \mu g(\ddot{\mathbf{r}}),$$

où $\mathbf{F} = -\partial V(\mathbf{r})/\partial \mathbf{r} = -K\mathbf{r}$ est la force de rappel (force de Hooke). La minimisation par rapport aux composantes du vecteur $\ddot{\mathbf{r}}$ mène ici aux équations du mouvement

$$\begin{pmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{y} \\ \ddot{z} \end{pmatrix} = -\frac{K}{m} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} - \mu \begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \\ \dot{z} \end{pmatrix}.$$

Le thermostat mène à une "accélération de friction" et le paramètre μ apparaît comme une "constante friction", mais il faut comprendre qu'il ne s'agit juste pas d'une constante, car μ est déterminée la position et la vitesse de l'oscillateur. En insérant l'expression générale pour l'accélération dans la contrainte linéaire $g(\ddot{\mathbf{r}}) = 0$, on obtient une équation pour μ dont la solution est

$$\mu = -\frac{K(x\dot{x} + y\dot{y} + z\dot{z})}{3k_B T}.$$

On voit bien que μ peut être positif et négatif. Le thermostat va "freiner" le système si $\mu > 0$ et l'accélérer si $\mu < 0$. C'est ainsi que l'énergie cinétique est maintenue à la valeur constante imposée.

On note ici que la contrainte d'une énergie cinétique strictement constante décrite dans l'exemple précédent ne correspond pas à un thermostat pour un système mécanique qui est en contact avec un réservoir de chaleur. Cette dernière situation est décrite par le thermostat de Nosé-Hoover [10] et correspond du point de vue thermodynamique à un ensemble canonique, où l'énergie du système est maintenue *en moyenne* et non constante, comme dans l'ensemble microcanonique. La contrainte non-holonome qui correspond au thermostat de Nosé-Hoover est décrite dans la Ref. [11].

5 Vibrations

5.1 Oscillateur harmonique forcé, résonance

On considère une particule de masse m qui effectue un mouvement unidimensionnel sous l'influence d'une force externe, d'une force de rappel et d'une force de friction. Si x est la position de la particule et x_0 sa position d'équilibre, la force de rappel est donnée par $F_h = -K(x - x_0)$, où $K > 0$ est la constante élastique. La force de friction est une fonction de la vitesse de la particule et l'équation de Newton est une équation différentielle linéaire si la force de friction a la forme $F_r = -m\gamma\dot{x}$ (voir Eq. (61)),

$$m\ddot{x} = -K(x - x_0) - m\gamma\dot{x} + F_{\text{ext}}(t). \quad (114)$$

En introduisant la nouvelle coordonnée $u = x - x_0$ et la fréquence angulaire (pulsation) $\omega_0 = \sqrt{K/m}$ cette équation prend la forme canonique

$$\boxed{\ddot{u} + \gamma\dot{u} + \omega_0^2 u = \frac{F_{\text{ext}}(t)}{m}} \quad (115)$$

Avec la fonction de Lagrange

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2}\dot{u}^2 - \frac{K}{2}u^2 + uF_{\text{ext}}(t) \quad (116)$$

l'équation (114) suit également du formalisme de Lagrange par

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} = Q_r, \quad (117)$$

où $Q_r = -m\gamma\dot{u}$.

Supposons que la force externe a la forme

$$\boxed{F_{\text{ext}}(t) = \Re\{F_0 \exp(i\omega t)\}} \quad (118)$$

où $F_0 \in \mathbb{C}$ est l'amplitude complexe de la force et $\omega > 0$. Pour trouver une solution particulière pour $u(t)$ on fait l'hypothèse que

$$u_p(t) = \Re\{u_0(\omega) \exp(i\omega t)\}, \quad (119)$$

où $u_0 \in \mathbb{C}$ est l'amplitude complexe de la solution $u(t)$. On suppose alors que le mouvement forcé de l'oscillateur a la même fréquence (pulsation) que la force externe. L'insertion de (118) et (119) dans l'équation du mouvement (115) montre que

$$u_0(\omega) = \frac{F_0/m}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\gamma\omega}. \quad (120)$$

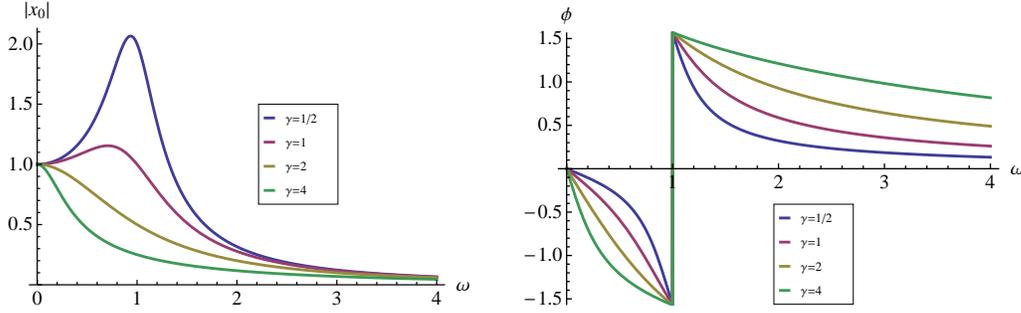


FIGURE 7 – Amplitude $|u_0|$ (à gauche) et différence de phases ϕ (à droite) comme fonction de ω . Ici $\omega_0 = 1$, $|F_0|/m = 1$ et $\gamma = 1/2, 1, 2, 4$.

L'amplitude de la solution particulière a donc la forme

$$|u_0(\omega)| = \frac{|F_0|/m}{\sqrt{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2\omega^2}} \quad (121)$$

qui montre qu'elle prend un maximum si $\sqrt{\dots}$ prend un minimum. Comme \sqrt{x} croit d'une manière strictement monotone avec x , $\sqrt{f(x)}$ prend un minimum où $f(x)$ prend un minimum. Comme $\omega > 0$, on trouve comme seule solution

$$\omega_{\text{res}} = \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2/4} \quad (122)$$

si $\gamma < 2\omega_0$. Pour $\gamma \geq 2\omega_0$ il n'y a pas de phénomène de résonance et pour un oscillateur non-amorti l'amplitude diverge à $\omega = \omega_0$. La partie gauche de la figure 7 montre l'évolution de l'amplitude en fonction de ω pour différentes valeurs de γ , posant $\omega_0 = 1$, $|F_0|/m = 1$. Si $F_0 = |F_0| \exp(i\alpha)$, la phase de $u_0(\omega)$ est donnée par $\arg(u_0(\omega)) = \alpha + \phi(\omega)$, où

$$\phi(\omega) = \arctan\left(\frac{\gamma\omega}{\omega^2 - \omega_0^2}\right) \quad (123)$$

est la différence de phase entre $F_{\text{ext}}(t)$ et $u(t)$. Une force externe $F_{\text{ext}}(t) = |F_0| \cos(\omega t + \alpha)$ produit donc une solution particulière

$$u_p(t) = |u_0(\omega)| \cos(\omega t + \alpha + \phi(\omega)). \quad (124)$$

La solution (124) n'est qu'une solution particulière de l'équation du mouvement (115) à laquelle on peut ajouter une solution de l'équation homogène,

$$\ddot{u} + \gamma\dot{u} + \omega_0^2 u = 0. \quad (125)$$

Posant $u(t) = \exp(\lambda t)$, on trouve que

$$(\lambda^2 + \gamma\lambda + \omega_0^2) \exp(\lambda t) = 0.$$

Comme $\exp(\lambda t) \neq 0$, cette équation a des solutions si λ vérifie $p(\lambda) = 0$, où $p(\lambda) = \lambda^2 + \gamma\lambda + \omega_0^2$ est le polynôme caractéristique de l'équation homogène (125). Ce polynôme a deux racines,

$$\lambda_{1,2} = -\frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{\frac{\gamma^2}{4} - \omega_0^2}, \quad (126)$$

et supposant que ces deux racines sont différentes, on obtient alors deux solutions de base $u_k(t) = \exp(\lambda_k t)$ ($k = 1, 2$). Comme (114) est une équation différentielle linéaire, la solution est donnée par une superposition quelconque des solutions de base,

$$u_h(t; C_1, C_2) = C_1 \exp(\lambda_1 t) + C_2 \exp(\lambda_2 t), \quad (127)$$

où $C_{1,2}$ sont des constantes. Si $\lambda_1 = \lambda_2$ les deux solutions de base sont $u_1(t) = \exp(\lambda_1 t)$ et $u_2(t) = t \exp(\lambda_1 t)$, tel que

$$u_h(t; C_1, C_2) = C_1 \exp(\lambda_1 t) + C_2 t \exp(\lambda_1 t). \quad (128)$$

La solution complète de l'équation du mouvement (114) a donc la forme

$$\boxed{u(t) = u_p(t) + u_h(t; C_1, C_2)} \quad (129)$$

où les constantes peuvent être fixées par les conditions initiales pour $u(t)$ et $\dot{u}(t)$. Comme $\gamma > 0$, il suit avec (126) et les formes générales (127) ou (128) pour $u_h(t)$ que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} u_h(t; C_1, C_2) = 0, \quad (130)$$

quelques soient les valeurs de C_1 et C_2 , ou bien quelques soient les valeurs de $u(0)$ et de $\dot{u}(0)$. Pour $t \gg 1/\gamma$ la solution $u(t)$ se comporte donc toujours comme la solution particulière

$$\boxed{u(t) \sim u_p(t)} \quad (131)$$

qui définit le régime *stationnaire*.

5.2 Oscillateurs couplés, modes normaux

5.2.1 Equilibre, potentiel quadratique

Un point d'équilibre d'un système de N points matériels est déterminé par la condition que les forces en ce point sont nulles. Si $V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ est l'énergie potentielle du système, ces points sont caractérisés par la condition $\partial V / \partial \mathbf{r}_\alpha =$

$\mathbf{0}$, où $\alpha = 1, \dots, N$. Pour la discussion suivante il est commode d'introduire l'ensemble $X = \{x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N\}$, ainsi que la notation matricielle \mathbf{X} pour le vecteur de colonne contenant les coordonnées X . Si l'on développe V autour d'un point d'équilibre $X^{(0)}$, on obtient

$$V(X) = V(X^{(0)}) + \sum_{i=1}^{3N} \left. \frac{\partial V}{\partial X_i} \right|_{X=X^{(0)}} (X_i - X_i^{(0)}) + \sum_{i,j=1}^{3N} \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 V}{\partial X_i \partial X_j} \right|_{X=X^{(0)}} (X_i - X_i^{(0)})(X_j - X_j^{(0)}) + \dots \quad (132)$$

Le premier terme est une constante qui est arbitraire, le deuxième est zéro et le premier terme non-nul est le terme quadratique dans les déviations des positions par rapport aux valeurs d'équilibre. Si l'on introduit les déviations $u_k = X_k - X_k^{(0)}$ et le vecteur \mathbf{u} correspondant comme coordonnées dynamiques, on peut faire l'approximation

$$V \approx \frac{1}{2} \mathbf{u}^T \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{u}, \quad (133)$$

pour les mouvements autour de l'équilibre, où \mathbf{K} est une matrice de dimension $3N \times 3N$ dont les éléments sont donnés par

$$K_{ij} = \left. \frac{\partial^2 V}{\partial X_i \partial X_j} \right|_{X=X^{(0)}}. \quad (134)$$

On suppose que \mathbf{K} est positive semi-définite, tel que toutes ses valeurs propres sont positives ou zéro.

5.2.2 Equations du mouvement, modes normaux

La fonction de Lagrange du système dynamique peut être écrite dans une forme compacte en introduisant la matrice diagonale

$$\mathbf{M} = \text{diag}(m_1, m_1, m_1, \dots, m_N, m_N, m_N) \quad (135)$$

de dimensions $3N \times 3N$. La forme résultante

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{u}}^T \cdot \mathbf{M} \cdot \dot{\mathbf{u}} - \frac{1}{2} \mathbf{u}^T \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{u}, \quad (136)$$

mène aux équations du mouvement

$$\mathbf{M} \cdot \ddot{\mathbf{u}} + \mathbf{K} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (137)$$

et montre que \mathcal{L} décrit un système de $3N$ oscillateurs qui sont couplés via la matrice symétrique \mathbf{K} .

Afin de découpler les équations (137) on introduit d'abord les coordonnées pondérées et la matrice des constantes de forces pondérée

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{M}^{1/2} \cdot \mathbf{u}, \quad (138)$$

$$\tilde{\mathbf{K}} = \mathbf{M}^{-1/2} \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{M}^{-1/2}, \quad (139)$$

ce qui mène à la forme

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \dot{\tilde{\mathbf{u}}}^T \cdot \dot{\tilde{\mathbf{u}}} - \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{u}}^T \cdot \tilde{\mathbf{K}} \cdot \tilde{\mathbf{u}} \quad (140)$$

pour la fonction de Lagrange. La matrice pondérée $\tilde{\mathbf{K}}$ est positive semi-définie comme la matrice non-pondérée, \mathbf{K} , et pour cette raison elle peut être diagonalisée par une matrice orthogonale, $\tilde{\mathbf{D}}$, tel que

$$\tilde{\mathbf{K}} = \tilde{\mathbf{D}} \cdot \Omega^2 \cdot \tilde{\mathbf{D}}^T, \quad (141)$$

où Ω^2 est une matrice diagonale

$$\Omega^2 = \text{diag}(\Omega_1^2, \dots, \Omega_{3N}^2). \quad (142)$$

La i -ème colonne de $\tilde{\mathbf{D}} = (\tilde{\mathbf{d}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{d}}_{3N})$ est le vecteur propre associé avec la valeur propre Ω_i^2 ,

$$\tilde{\mathbf{K}} \cdot \tilde{\mathbf{d}}_i = \Omega_i^2 \tilde{\mathbf{d}}_i. \quad (143)$$

On appelle les vecteurs $\{\tilde{\mathbf{d}}_i\}$ les *modes normaux* du système et $\{\Omega_i \geq 0\}$ les *fréquences normales* associées. Dans les coordonnées généralisées q_i définies par

$$\mathbf{q} = \tilde{\mathbf{D}}^T \cdot \tilde{\mathbf{u}} \quad (144)$$

la fonction de Lagrange prend la forme

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{q}}^T \cdot \dot{\mathbf{q}} - \frac{1}{2} \mathbf{q}^T \cdot \Omega^2 \cdot \mathbf{q}. \quad (145)$$

Comme Ω^2 est diagonale, \mathcal{L} devient une somme de $3N$ contributions

$$\mathcal{L} = \sum_{k=1}^{3N} \left\{ \frac{1}{2} \dot{q}_k^2 - \frac{1}{2} \Omega_k^2 q_k^2 \right\} \quad (146)$$

qui mène à $3N$ équations du mouvement indépendantes

$$\ddot{q}_k + \Omega_k^2 q_k = 0, \quad k = 1, \dots, 3N \quad (147)$$

On appelle les coordonnées $\{q_k\}$ les *coordonnées normales* du système. Ils s'agit de coordonnées généralisées qui simplifient au maximum la forme des

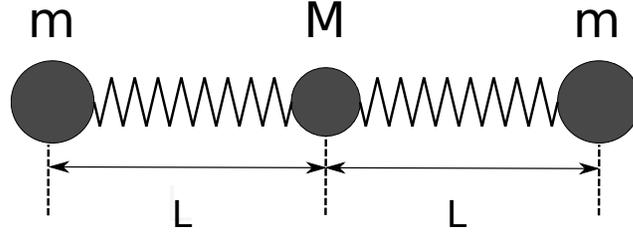


FIGURE 8 – Molécule linéaire CO_2 . Ici $m = m_O$, $M = m_C$ et $L = 0.116$ nm.

équations du mouvement. Les équations (147) décrivent la dynamique de $3N$ oscillateurs harmoniques non-couplés et les solutions sont bien connues

$$q_k(t) = \begin{cases} q_k(0) \cos \Omega_k t + \frac{\dot{q}_k(0)}{\Omega_k} \sin \Omega_k t & \text{si } \Omega_k > 0, \\ q_k(0) + \dot{q}_k(0)t & \text{si } \Omega_k = 0. \end{cases} \quad (148)$$

Avec les relations (138) et (144) on a

$$\mathbf{q}(t) = \tilde{\mathbf{D}}^T \cdot \mathbf{M}^{1/2} \cdot \mathbf{u}(t) \quad (149)$$

ce qui permet de construire des conditions initiales des coordonnées normales q_k à partir des celles pour les déplacements u_k et l'inversion de (149),

$$\mathbf{u}(t) = \mathbf{M}^{-1/2} \cdot \tilde{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{q}(t), \quad (150)$$

permet de construire ensuite la solution complète des équations du mouvement 137.

Il est illustratif de regarder les directions dans l'espace qui sont définies par (150), posant successivement $\mathbf{q} = \mathbf{e}_k$ ($k = 1, \dots, 3N$). Comme $\tilde{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{e}_k = \tilde{\mathbf{d}}_k$ on a

$$\mathbf{u}_k = \mathbf{M}^{-1/2} \cdot \tilde{\mathbf{d}}_k. \quad (151)$$

Ces directions correspondent, respectivement, aux directions des modes normaux dans l'espace physique.

Exemple 11. Molécule linéaire:

On considère la molécule linéaire CO_2 comme exemple pour le calcul de modes normaux (voir figure 8). Pour simplifier, on ne considère que des mouvements le long de l'axe de la molécule. Par symétrie, les distances d'équilibre $\overline{O-C}$ et $\overline{C-O}$ sont identiques, $L = 0.116$ nm, et l'énergie potentielle a la forme

$$V(x_1, x_2, x_3) = \frac{\kappa}{2}(x_2 - x_1 - L)^2 + \frac{\kappa}{2}(x_3 - x_2 - L)^2, \quad (152)$$

où $\kappa > 0$ est la constante élastique et les particules sont numérotées de gauche à droite. Définissant $\mathbf{X} = (x_1, x_2, x_3)^T$ comme position d'équilibre est ici $\mathbf{X}^{(0)} =$

$(0, L, 2L)^T$ si l'on positionne la particule 1 à $x = 0$. Avec $\mathbf{u} = \mathbf{X} - \mathbf{X}^{(0)}$ le potentiel V est donné par la forme quadratique

$$V = \frac{1}{2} \mathbf{u}^T \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{u}, \quad (153)$$

où la matrice \mathbf{K} a la forme

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} \kappa & -\kappa & 0 \\ -\kappa & 2\kappa & -\kappa \\ 0 & -\kappa & \kappa \end{pmatrix}. \quad (154)$$

Avec la matrice des masses

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & M & 0 \\ 0 & 0 & m \end{pmatrix} \quad (155)$$

on obtient pour la matrice des constantes de force pondérée

$$\tilde{\mathbf{K}} = \begin{pmatrix} \frac{\kappa}{m} & -\frac{\kappa}{\sqrt{mM}} & 0 \\ -\frac{\kappa}{\sqrt{mM}} & \frac{2\kappa}{M} & -\frac{\kappa}{\sqrt{mM}} \\ 0 & -\frac{\kappa}{\sqrt{mM}} & \frac{\kappa}{m} \end{pmatrix}. \quad (156)$$

Les valeurs propres de cette matrice sont les fréquences normales du système,

$$\Omega_1 = 0, \quad \Omega_2 = \sqrt{\frac{\kappa}{m}}, \quad \Omega_3 = \sqrt{\kappa \left(\frac{1}{m} + \frac{2}{M} \right)}. \quad (157)$$

Posant $m = \alpha M$ on trouve avec avec (151) pour les modes normaux dans l'espace physique

$$\mathbf{u}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_2 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{4\alpha^2+2}} \\ -\frac{\sqrt{2}\alpha}{\sqrt{2\alpha^2+1}} \\ \frac{1}{\sqrt{4\alpha^2+2}} \end{pmatrix}. \quad (158)$$

L'interprétation de ces modes est la suivante :

Mode 1 $\boxed{\rightarrow \rightarrow \rightarrow}$: Tous les atomes font les mêmes déplacements, ce qui ne change pas l'énergie potentielle du système. Ceci est reflété par $\Omega_1 = 0$.

Mode 2 $\boxed{\leftarrow \mid \rightarrow}$: Les atomes 1 et 3 font des déplacements opposées, atome 2 au milieu restant au repos.

Mode 3 $\boxed{\rightarrow \leftarrow \rightarrow}$: L'atome au milieu fait des déplacements opposés au déplacements identiques des atomes 1 et 3.



FIGURE 9 – Chaîne linéaire d'oscillateurs identiques.

5.3 Chaîne linéaire

Reprenant l'exemple de la molécule linéaire on peut construire un système modèle de N oscillateurs identiques de masse m qui sont couplés à leurs voisins par la même constante de force, κ , ayant une distance d'équilibre Δx (voir fig. 9). Si les bouts de cette chaîne linéaire ne sont pas fixés, le potentiel prend la forme

$$V(X) = \frac{\kappa}{2} \sum_{k=1}^{N-1} (x_{k+1} - x_k - \Delta x)^2 \quad (159)$$

où $X = \{x_1, \dots, x_N\}$. Comme pour la molécule linéaire on définit le vecteur de position $\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_N)^T$ et la position d'équilibre est donnée par $\mathbf{X}^{(0)} = (0, L, \dots, (N-1)L)^T$ si le premier oscillateur est positionné à $x = 0$. Comme pour la molécule linéaire, l'approximation (133) devient exacte, avec $\mathbf{u} = \mathbf{X} - \mathbf{X}^{(0)}$. Il est utile de regarder la structure générale des équations du mouvement,

$$\ddot{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{K}} \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (160)$$

en prenant un exemple concret. Pour $N = 10$ la matrice $\tilde{\mathbf{K}}$ prend la forme

$$\tilde{\mathbf{K}} = \Omega^2 \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (161)$$

où $\Omega = \sqrt{\kappa/m}$. Si l'on change la notation, tel que l'indice i des composantes u_i du vecteur \mathbf{u} devient une position discrète, les équations du mouvement peuvent être mises dans la forme

$$\frac{\partial^2 u(i, t)}{\partial t^2} - \Omega^2 (u(i+1, t) - 2u(i, t) + u(i-1, t)) = 0, \quad i = 2, \dots, N-2. \quad (162)$$

Ici on s'aperçoit que

$$\frac{u(i+1, t) - 2u(i, t) + u(i-1, t)}{\Delta x^2} \rightarrow \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (163)$$

si $\Delta x \rightarrow 0$. Définissant la vitesse de propagation

$$\boxed{c = \Omega \Delta x} \quad (164)$$

l'équation (162) devient une équation d'onde si $\Delta x \rightarrow 0$ et $N \rightarrow \infty$, tel que c reste constante.

$$\boxed{\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = 0} \quad (165)$$

Cette équation d'onde décrit la propagation de compressions longitudinales dans la chaîne linéaire.

Références

- [1] L.D. Landau and E.M. Lifshitz. *Mechanics*. Course of Theoretical Physics. Butterworth-Heinemann, 3rd edition, 1976.
- [2] Joseph-Louis Lagrange. *Mécanique analytique*. Editions Jacques Gabay, Paris, 1989 (Reproduction en fac-similé de l'édition de Paris : Veuve Desaint, 1788).
- [3] Jean D'Alembert. *Traité de dynamique* (réimpression de l'édition originale de 1758). Editions Jacques Gabay, Paris, 1990.
- [4] C.F. Gauß. Über ein neues allgemeines Grundgesetz der Mechanik. *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, 1829(4) :232–235, 1829.
- [5] L.A. Pars. *A treatise on analytical dynamics*. Heinemann, London, 1965.
- [6] H. Goldstein. *Classical Mechanics*. Addison-Wesley, 1971.
- [7] Cornelius Lanczos. *The variational principles of mechanics*. University of Toronto Press, Toronto, 4th edition, 1974.
- [8] Aneesur Rahman and Frank H. Stillinger. Molecular Dynamics Study of Liquid Water. *The Journal of Chemical Physics*, 55(7) :3336–3359, October 1971.
- [9] W.G. Hoover. *Molecular Dynamics*. Lecture Notes in Physics. Springer, Berlin, New York, 1986.
- [10] William G Hoover. Canonical dynamics : Equilibrium phase-space distributions. *Physical Review A*, 31(3) :1695, 1985.
- [11] Gerald R. Kneller. General framework for constraints in molecular dynamics simulations. *Molecular Physics*, 115(9-12) :1352–1361, June 2017.