



# Systemes dynamiques

**Gerald R. Kneller**

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

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction et concepts de bases</b>	<b>2</b>
1.1	Equations de mouvement . . . . .	2
1.2	Systèmes linéaires et stabilité . . . . .	3
1.3	Systèmes non-linéaires et stabilité locale . . . . .	5
1.4	Volume de l'espace de phases . . . . .	7
<b>2</b>	<b>Systèmes hamiltoniens</b>	<b>9</b>
2.1	Principe de variation . . . . .	9
2.2	Equations de Hamilton et espace de phases . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Modèles de croissance</b>	<b>15</b>
3.1	Modèle logistique . . . . .	15
3.2	Modèle de Lotka-Volterra . . . . .	16
<b>4</b>	<b>Systèmes dynamiques sous contraintes</b>	<b>19</b>
4.1	Systèmes mécaniques . . . . .	19
4.1.1	Les principes classiques de la mécanique sous contraintes	19
4.1.2	Dynamique sous contraintes comme problème de Bott & Duffin . . . . .	20
4.1.3	Détermination des forces de contrainte . . . . .	22
4.2	Relation avec les principes classiques . . . . .	24
4.3	Modèles de croissance . . . . .	26
4.3.1	Equations du mouvement et traitement de contraintes .	26
4.3.2	Réactions autocatalytiques avec contraintes . . . . .	28
<b>A</b>	<b>Appendix</b>	<b>31</b>
A.1	Matrices inverses généralisées . . . . .	31

# 1 Introduction et concepts de bases

Ce cours donne une introduction à la théorie des systèmes dynamiques, tel quelle est traitée dans les présentations classiques de la mécanique analytique [1, 2, 3, 4] et des systèmes dynamiques en général [5, 6].

## 1.1 Equations de mouvement

Soient  $\{x_1, \dots, x_f\}$  les variables qui spécifient l'état d'un système dynamique quelconque à  $f$  degrés de liberté. La signification physique de ces variables n'est pas limitée à un type de système particulier. Elles peuvent représenter les coordonnées spécifiant la position d'une étoile, les populations des espèces dans un écosystème, les nombres des différents types de molécules dans une réaction chimique etc. La notation

$$\mathbf{X} := \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_f \end{pmatrix}. \quad (1)$$

sera utilisée comme abréviation pour l'ensemble ( $f$ -uplet) des variables et pour une matrice de colonne dans le calcul matriciel.

Avec ceci la forme la plus générale des équations du mouvement est

$$\boxed{\dot{\mathbf{X}}(t) = \mathbf{V}(\mathbf{X}(t), t)} \quad (2)$$

Afin visualiser les trajectoires du système dynamique considéré, on introduit l'espace de phases qui représente l'ensemble des valeurs possibles pour  $\mathbf{X}$ . On interprète  $\mathbf{V}$  comme champ de vitesse qui associe à chaque point  $\mathbf{X}$  et chaque instant  $t$  une vitesse dans l'espace de phases,

$$\mathbf{V} := \begin{pmatrix} v_1(\mathbf{X}(t), t) \\ \vdots \\ v_f(\mathbf{X}(t), t) \end{pmatrix}. \quad (3)$$

On note que la forme (2) peut toujours être obtenue en introduisant des variables dynamiques auxiliaires. Regardons l'équation du mouvement d'un oscillateur harmonique,

$$\ddot{x}(t) + \Omega^2 x^2(t) = 0. \quad (4)$$

En introduisant  $x_1 \equiv \Omega x$ ,  $x_2 = \dot{x}$  on obtient la forme "canonique"

$$\dot{x}_1(t) = \Omega x_2(t), \quad (5)$$

$$\dot{x}_2(t) = -\Omega x_1(t). \quad (6)$$

## 1.2 Systèmes linéaires et stabilité

Une solution analytique des équations différentielles (2) est rarement possible, sauf dans le cas où elles sont linéaires,

$$\dot{\mathbf{X}} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{X}. \quad (7)$$

Ici la solution est simplement

$$\mathbf{X}(t) = \exp(\mathbf{A}t) \cdot \mathbf{X}(0), \quad (8)$$

où  $\exp(\mathbf{A}t)$  est définie par la série

$$\exp(\mathbf{A}t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \mathbf{A}^n. \quad (9)$$

En appliquant la *réduction de Jordan* toute matrice  $\mathbf{A}$  peut être représentée sous la forme

$$\mathbf{A} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{T}^{-1}, \quad (10)$$

où  $\mathbf{J}$  est une matrice block-diagonale, Ici  $\mathbf{A}$  est une matrice diagonale de dimensions  $f \times f$

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{J}_1 & & & \\ & \mathbf{J}_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \mathbf{J}_p \end{pmatrix}, \quad (11)$$

et  $p \leq f$  est le nombre de valeurs propres différentes de  $\mathbf{A}$ . A chaque de ces valeurs propres  $\lambda_k$  est associée un block de Jordan de la forme

$$\mathbf{J}_k = \begin{pmatrix} \lambda_k & 1 & & \\ & \lambda_k & 1 & \\ & & \ddots & \ddots \\ & & & \ddots & 1 \\ & & & & \lambda_k \end{pmatrix}, \quad (12)$$

dont les dimensions sont  $m_k \times m_k$ , où  $m_k$  est la multiplicité de  $\lambda_k$ . Si  $m_k = 1$ , la matrice  $\mathbf{J}_k$  devient un scalaire,  $\mathbf{J}_k = \lambda_k$ . On voit facilement que  $\mathbf{A}^n = \mathbf{T} \cdot \mathbf{J}^n \cdot \mathbf{T}^{-1}$ , et par conséquent

$$\exp(\mathbf{A}t) = \mathbf{T} \cdot \begin{pmatrix} \exp(\mathbf{J}_1 t) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp(\mathbf{J}_2 t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(\mathbf{J}_p t) \end{pmatrix} \cdot \mathbf{T}^{-1}. \quad (13)$$

La décomposition de Jordan donne une information évidente sur la *stabilité* du système mécanique considéré. Le système est stable si

$$\boxed{\Re\{\lambda_k\} \leq 0, \quad k = 1, \dots, f}. \quad (14)$$

---

**Exemple 1. Oscillateur harmonique:**

Prenant comme exemple les équations du mouvement (5) et (6) qui peuvent être écrites sous la forme

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1(t) \\ \dot{x}_2(t) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \Omega \\ -\Omega & 0 \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \cdot \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Les valeurs propres de  $\mathbf{A}$  sont

$$\lambda_{1,2} = \mp i\Omega \quad (16)$$

et la décomposition de Jordan de  $\mathbf{A}$  donne

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} -i\Omega & 0 \\ 0 & i\Omega \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T} = \begin{pmatrix} i & -i \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (17)$$

Avec ceci on trouve que

$$\exp(\mathbf{A}t) = \mathbf{T} \cdot \begin{pmatrix} e^{-i\Omega t} & 0 \\ 0 & e^{i\Omega t} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{T}^{-1} = \begin{pmatrix} \cos(\Omega t) & \sin(\Omega t) \\ -\sin(\Omega t) & \cos(\Omega t) \end{pmatrix}, \quad (18)$$

ce qui mène à des trajectoires circulaires dans l'espace de phases (voir fig. 1),

$$\begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\Omega t) & \sin(\Omega t) \\ -\sin(\Omega t) & \cos(\Omega t) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1(0) \\ x_2(0) \end{pmatrix}. \quad (19)$$

---

**Exemple 2. Oscillateur harmonique avec friction:**

Au lieu des équations du mouvement (5) et (6) on considère les équations modifiées

$$\dot{x}_1(t) = \Omega x_2(t), \quad (20)$$

$$\dot{x}_2(t) = -\Omega x_1(t) - \boxed{\eta x_2(t)}, \quad (21)$$

dont la forme matricielle est

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1(t) \\ \dot{x}_2(t) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \Omega \\ -\Omega & -\eta \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \cdot \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Les valeurs propres de  $\mathbf{A}$  sont

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left( -\eta \mp \sqrt{\eta^2 - 4\Omega^2} \right), \quad (23)$$

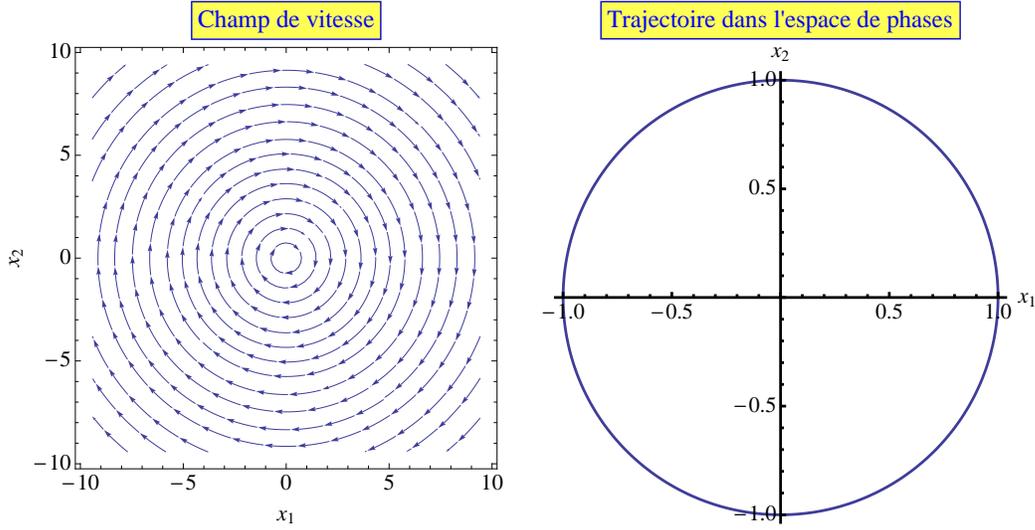


FIGURE 1 – **A gauche** : Champ de vitesse  $\mathbf{V}$  pour les équations du mouvement (15). **A droite** : Trajectoire (19) dans l'espace de phases pour  $\Omega = 1$  et les conditions initiales  $x_1(0) = 1, x_2(0) = 0$ .

et la décomposition de Jordan de  $\mathbf{A}$  donne

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} -\frac{a+\eta}{2} & 0 \\ 0 & \frac{a-\eta}{2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T} = \begin{pmatrix} \frac{a-\eta}{2\Omega} & -\frac{a+\eta}{2\Omega} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (24)$$

où  $a = \sqrt{\eta^2 - 4\Omega^2}$ . Calculant le propagateur de la solution par  $\exp(\mathbf{A}t) = \mathbf{T} \cdot \exp(\mathbf{J}t) \cdot \mathbf{T}^{-1}$  on obtient ici la trajectoire (voir fig. 2)

$$\begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{e^{-\frac{t\eta}{2}} (a \cosh(\frac{at}{2}) + \eta \sinh(\frac{at}{2}))}{2e^{-\frac{t\eta}{2}} \Omega \sinh(\frac{at}{2})} & \frac{e^{-\frac{t\eta}{2}} (\eta - a)(a + \eta) \sinh(\frac{at}{2})}{2a\Omega} \\ -\frac{a}{2e^{-\frac{t\eta}{2}} \Omega \sinh(\frac{at}{2})} & \frac{e^{-\frac{t\eta}{2}} (a \cosh(\frac{at}{2}) - \eta \sinh(\frac{at}{2}))}{a} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1(0) \\ x_2(0) \end{pmatrix}. \quad (25)$$

Dans cet exemple on doit distinguer entre le régime où  $a$  est imaginaire (régime oscillatoire) et le régime où  $a$  est réel (régime non-oscillatoire). On note que  $a$  est imaginaire pour les paramètres donnés dans la légende de la fig. 2.

### 1.3 Systèmes non-linéaires et stabilité locale

Dans le cas général d'un système dynamique non-linéaire les considérations de section 1.2 mènent à la quantification de la stabilité *locale*. Si  $X(t)$  est une solution des équations du mouvement (2) et  $Y(t)$  une

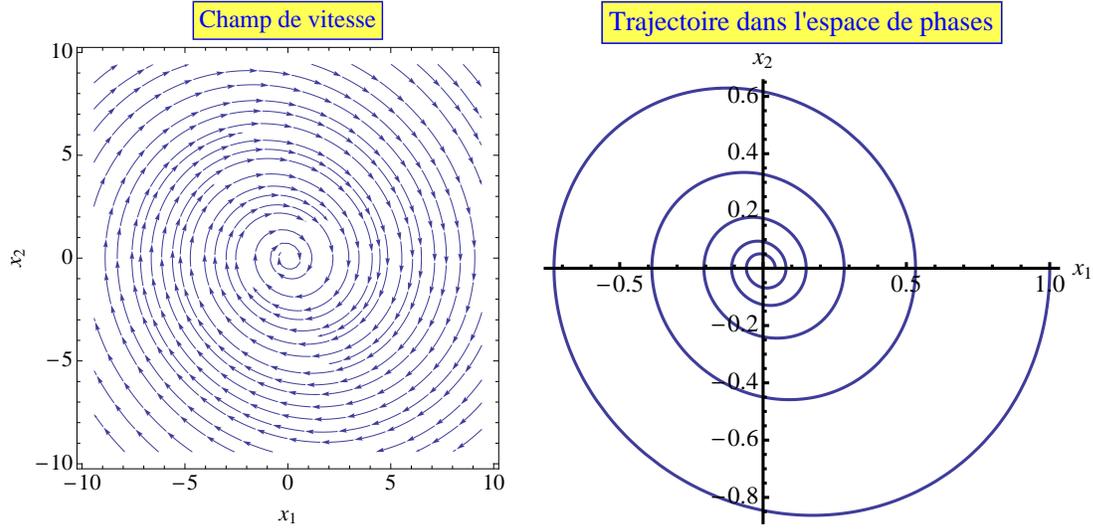


FIGURE 2 – **A gauche** : Champ de vitesse  $\mathbf{V}$  pour les équations du mouvement (22). **A droite** : Trajectoire (25) dans l'espace de phases pour  $\Omega = 1, \eta = 0.2$  et les conditions initiales  $x_1(0) = 1, x_2(0) = 0$ .

autre solution qui est proche de la solution  $X(t)$  à un instant  $t = t_0$ . La proximité est exprimée par

$$\mathbf{Y}(t) = \mathbf{X}(t) + \mathbf{u}(t), \quad \text{où } |\mathbf{u}| \rightarrow 0. \quad (26)$$

Dans ce cas on peut se poser la question si le système dynamique a la tendance de préserver cette proximité des trajectoire ou, au contraire, si les deux trajectoires ont la tendance de diverger. Comme  $Y(t)$  est une solution des équations (2) il suit que

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{Y}}(t_0) &= \dot{\mathbf{X}}(t_0) + \dot{\mathbf{u}}(t_0) = \mathbf{V}(\mathbf{X}(t_0), t_0) + \dot{\mathbf{u}}(t_0) \\ &\approx \mathbf{V}(\mathbf{X}(t_0), t_0) + \mathbf{A}(\mathbf{X}(t_0), t_0) \cdot \mathbf{u}(t_0), \end{aligned}$$

où  $\mathbf{A}(\mathbf{X}, t)$  est une matrice de dimensions  $f \times f$  dont les éléments sont donnés par

$$A_{kl}(\mathbf{X}, t) := \frac{\partial v_k(\mathbf{X}, t)}{\partial x_l} \quad (27)$$

Utilisant  $\dot{\mathbf{X}}(t_0) = \mathbf{V}(\mathbf{X}(t_0), t_0)$  et définissant la matrice on obtient une équation du mouvement *linéarisée* pour  $\mathbf{u}(t)$  qui est valable dans le voisinage de  $\mathbf{u}(t_0)$ , i.e. si  $t$  est proche de  $t_0$

$$\dot{\mathbf{u}}(t) \approx \mathbf{A}(\mathbf{X}(t_0), t_0) \cdot \mathbf{u}(t) \quad (28)$$

L'étude des valeurs propres de  $\mathbf{A}(\cdot)$  donne une information de la stabilité de la solution  $X(t)$  autour de  $X(t_0)$  et une solution locale pour  $\mathbf{u}(t)$  peut-être trouvée suivant la méthode présentée dans la section 1.2.

Les points particuliers dans l'espace de phases sont les point stationnaires (point critiques),  $\mathbf{X}_s$ , qui sont définis par

$$\boxed{\mathbf{V}(\mathbf{X}_s, t) = \mathbf{0}} \quad (29)$$

L'étude de stabilité autour de ces points donne des informations importantes sur le système dynamique considéré.

## 1.4 Volume de l'espace de phases

La solution des équations du mouvement peut être écrite sous la forme

$$\mathbf{X}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{X}_0; t) \quad (30)$$

afin d'exprimer que chaque élément  $x_k(t)$  est une fonction des coordonnées initiales,  $x_1(0), \dots, x_f(0)$ , et du temps,  $x_k(t) = f_k(\mathbf{X}_0; t)$ . Ceci peut être interprétée comme une transformation de coordonnées

$$\boxed{\mathbf{X}_0 \equiv \mathbf{X}(0) \rightarrow \mathbf{X}_t \equiv \mathbf{X}(t)} \quad (31)$$

Considérons maintenant une évolution infinitésimale dans le temps,

$$\mathbf{X}_{dt} = \mathbf{X}_0 + dt \mathbf{V}(\mathbf{X}_0, 0). \quad (32)$$

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

$$d^f x_{dt} = \det(\mathcal{J}(0)) d^f x_0, \quad (33)$$

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

$$\mathcal{J}_{kl}(dt) = \frac{\partial x_k^{dt}}{\partial x_l^0}. \quad (34)$$

Avec (116) et la définition (91) on obtient alors

$$\boxed{\mathcal{J}_{kl}(dt) = \delta_{kl} + dt \mathbf{A}(\mathbf{X}_0, 0)} \quad (35)$$

On peut maintenant utiliser l'identité  $\det(\mathbf{1} + \epsilon \mathbf{A}) \approx 1 + \epsilon \text{tr}\{\mathbf{A}\}$  qui est valable si  $\epsilon \ll 1$ . Ici "tr" dénote la trace d'une matrice. Avec (35) on obtient donc

$$\det(\mathcal{J}(dt)) \approx 1 + dt \sum_{k=1}^f A_{kk}(\mathbf{X}_0, 0) \equiv 1 + dt \nabla \cdot \mathbf{V}(\mathbf{X}, t)|_{\mathbf{X}=\mathbf{X}_0, t=0}, \quad (36)$$

où  $\nabla \cdot \mathbf{V}$  est la divergence du champ vectoriel  $\mathbf{V}$ ,

$$\nabla \cdot \mathbf{V}(\mathbf{X}, t) = \sum_{k=1}^f \frac{\partial v_k(\mathbf{X}, t)}{\partial x_k}. \quad (37)$$

Si  $\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$ , le volume de l'espace de phase est donc conservé par la transformation (31).

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

$$\boxed{\det(\mathcal{J}(t)) = 1 \quad \text{si} \quad \nabla \cdot \mathbf{V} = 0} \quad (38)$$

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

$$\boxed{d^f x_t = d^f x_0} \quad (39)$$

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  $\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$ .

On voit facilement que les équations du mouvement (15) du premier exemple pour un système dynamique mènent à  $\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$ . Dans ce cas le volume de l'espace de phases est donc conservé. Le terme de friction ajouté dans les équations (22) mène, en revanche, à  $\nabla \cdot \mathbf{V} = -\gamma$ , montrant que le volume de l'espace de phase se contracte.

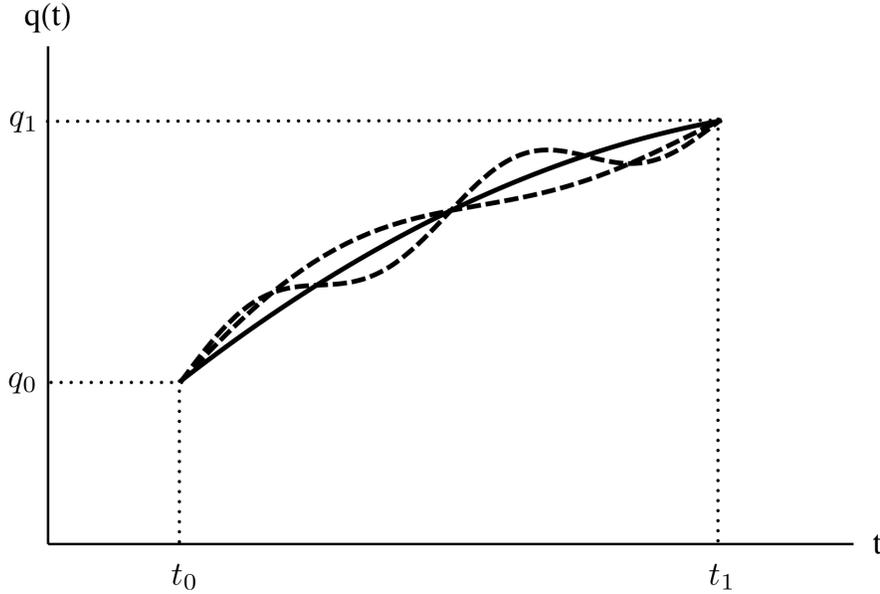


FIGURE 3 – Trajectoire optimale, (ligne continue) et variations (traits interrompus).

## 2 Systèmes hamiltoniens

### 2.1 Principe de variation

En mécanique analytique les équations de mouvement d'un système de points matériels qui est décrit par  $f$  coordonnées généralisées *indépendantes*,  $q_1, \dots, q_f$ , peuvent être dérivées en solvant un principe de variation. On utilisera la notation

$$\mathbf{q} = \begin{pmatrix} q_1 \\ \vdots \\ q_f \end{pmatrix} \quad (40)$$

pour l'ensemble des coordonnées généralisées. Définissant la fonction de Lagrange,

$$\mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) = T(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) - U(\mathbf{q}, t) \quad (41)$$

où  $T(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$  est l'énergie cinétique du système et  $U(\mathbf{q}, t)$  l'énergie potentielle, la trajectoire du système est minimisée l'intégrale d'action,

$$S = \int_{t_0}^{t_1} dt \mathcal{L}(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t), t) = \text{Min}(\mathbf{q}(t)) \quad (42)$$

Ici  $\mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0$  et  $\mathbf{q}(t_1) = \mathbf{q}_1$  sont des points fixes (voir Fig. 3) et  $\mathcal{L}$  est la fonction de Lagrange donnée par l'éq. (41). La fonctionnelle  $S$  associée à chaque trajec-

toire passant par les points  $(t_0, \mathbf{q}_0)$  et  $(t_1, \mathbf{q}_1)$  une valeur  $S[\mathbf{q}(t)]$ . Une condition nécessaire pour que  $S$  soit minimale est

$$\delta S = \int_0^t dt \delta \mathcal{L} = 0. \quad (43)$$

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

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

Les variations  $\delta q_k$  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 obtient les *équations de Lagrange*

$$\boxed{\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} \quad (k = 1, \dots, f)} \quad (44)$$

## 2.2 Equations de Hamilton et espace de phases

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

$$\boxed{p_k = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k}} \quad (45)$$

qui sont regroupées dans le vecteur de colonne

$$\mathbf{p} = \begin{pmatrix} p_1 \\ \vdots \\ p_f \end{pmatrix}. \quad (46)$$

Avec cette définition et en utilisant les 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

$$d \left( \sum_{i=1}^f \dot{q}_i p_i - \mathcal{L} \right) = \sum_{i=1}^f \left\{ \dot{q}_i dp_i - \dot{p}_i dq_i - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \right\}. \quad (47)$$

Cette relation définit la fonction de Hamilton

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \sum_{i=1}^f \dot{q}_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}) p_i - \mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}(\mathbf{q}, \mathbf{p}), t) \quad (48)$$

où les vitesses  $\dot{q}$  sont exprimées comme fonctions de  $p$ ,  $q$  et  $t$ , utilisant la relation (45). La relation (47) montre que

$$\dot{q}_k = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_k}, \quad (49)$$

$$\dot{p}_k = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_k}. \quad (50)$$

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 (47) montre également que

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \quad (51)$$

Définissant

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{V} = \begin{pmatrix} \dot{\mathbf{q}} \\ \dot{\mathbf{p}} \end{pmatrix}, \quad (52)$$

on voit que

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = \sum_{k=1}^{2f} \left\{ \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial q_k} + \frac{\partial \dot{p}_k}{\partial p_k} \right\} = \sum_{k=1}^{2f} \left\{ \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_k \partial p_k} - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_k \partial q_k} \right\} = 0 \quad (53)$$

La forme spécifique des équations de Hamilton a donc pour conséquence que le flux dans l'espace de phase est à divergence nulle, Par conséquent (voir section 1.4) le volume de l'espace de phases d'un système hamiltonien est conservé.

Pour la plupart des systèmes mécaniques l'énergie est une fonction homogène d'ordre deux des vitesses généralisées, tel que

$$\sum_{k=1}^f \dot{q}_k \frac{\partial T(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})}{\partial \dot{q}_k} = 2T(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}). \quad (54)$$

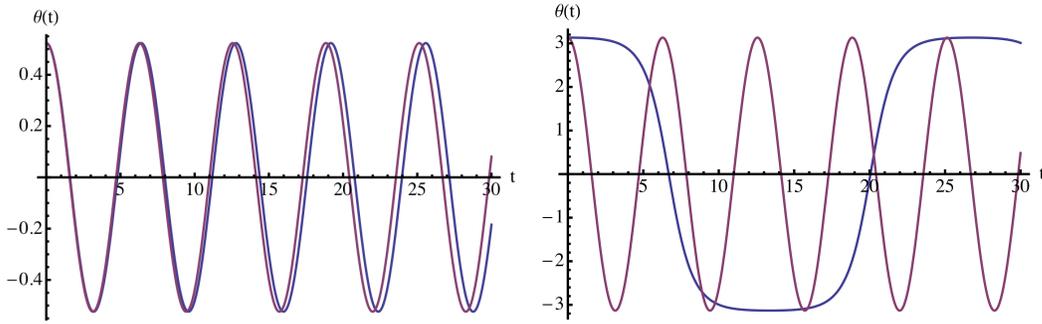


FIGURE 5 – **A gauche** : Trajectoires de l'oscillateur linéaire (lignes mauves) et non linéaire (lignes bleues) à faible amplitude. **A droite** : Trajectoires correspondantes à forte amplitude. Dans les deux cas  $\Omega = 1$  et  $\dot{\theta}(0) = 0$ .

Si le potentiel  $U$  ne dépend pas des vitesses généralisées, la fonction de Hamilton prend la forme

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = T(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}(\mathbf{q}, \mathbf{p})) + U(\mathbf{q}, t) \quad (55)$$

où les vitesses  $\dot{q}$  sont éliminées en faveur de  $p$  et  $q$ , utilisant la définition (45) des quantités du mouvement généralisées.

---

### Exemple 3. Pendule - un modèle simple pour un oscillateur non-linéaire :

Le pendule montré dans la fig. 4 est un modèle simple pour un oscillateur non-linéaire. Ses équations du mouvement sont facilement dérivées par la méthode de Lagrange. On exprime d'abord les coordonnées cartésiennes du point matériel par

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

Avec  $T = m\dot{\mathbf{r}}^2/2 = ml^2\dot{\theta}^2/2$  pour l'énergie cinétique et  $U(\theta) = mgz(\theta) = mgl(1 - \cos \theta)$  pour l'énergie potentielle, on trouve

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2}l^2\dot{\theta}^2 - \frac{m}{2}l^2\dot{\theta}^2.$$

Introduisant la pulsation  $\Omega = \sqrt{g/l}$ , l'équation de Lagrange,

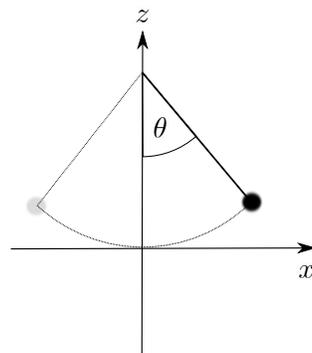


FIGURE 4 – Pendule.

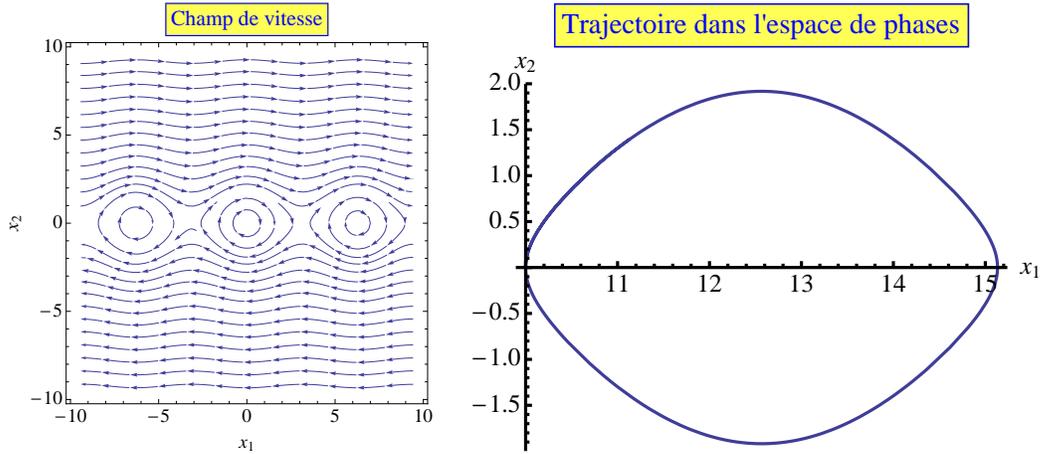


FIGURE 6 – **A gauche** : Champ de vitesse  $\mathbf{V}$  pour les équations du mouvement (56) et (57). **A droite** : Trajectoire correspondante dans l'espace de phases pour  $\Omega = 1$  et les conditions initiales  $x_1(0) = 10, x_2(0) = 0$ .

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta} = 0,$$

donnent l'équation différentielle suivante pour  $\theta(t)$ ,

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

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 5 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.

Construisons maintenant l'Hamiltonien du système. Avec

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

et  $\mathcal{H} = p_\theta \dot{\theta} - \mathcal{L}$  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  $x_1 = \theta, x_2 = p_\theta/(ml^2\Omega)$  ces équations différentielles prennent la forme simple

$$\dot{x}_1(t) = \Omega x_2(t), \quad (56)$$

$$\dot{x}_2(t) = -\Omega \sin(x_1(t)). \quad (57)$$

Si  $|x_1| \ll 1$  ces équations peuvent être linéarisées, utilisant que  $\sin x_1 \approx x_1$  dans ce cas, et on retrouve les équations du mouvement (5) et (6). La figure 6 montre le champ de vitesse pour l'oscillateur non-linéaire (à gauche) et un portrait de phases pour une trajectoire particulière à grande amplitude, où l'approximation  $\sin x_1 \approx x_1$  n'est pas valable. Pour les mouvements à petite amplitude on retrouve le champ de vitesse et le portrait de phases montrés dans la figure 1.

L'analyse du système non-linéaire procède par une étude de stabilité des points stationnaires qui sont donnés par

$$\mathbf{X}_s = \begin{pmatrix} k\pi \\ 0 \end{pmatrix}, \quad k \in \mathbb{Z}. \quad (58)$$

Ici la matrice  $\mathbf{A}$  a la forme

$$\mathbf{A}(\mathbf{X}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} & \frac{\partial v_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial v_2}{\partial x_1} & \frac{\partial v_2}{\partial x_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \Omega \\ -\Omega \cos x_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (59)$$

tel que

$$\mathbf{A}(\mathbf{X}_s) = \begin{pmatrix} 0 & \Omega \\ (-1)^{k+1}\Omega & 0 \end{pmatrix}. \quad (60)$$

Le polynôme caractéristique de cette matrice est  $\lambda^2 + (-1)^k \Omega^2 = 0$ , avec les solutions

$$\lambda_{1,2} = \begin{cases} \pm i\Omega & \text{si } k = 0, 2, 4, \dots, \\ \pm \Omega & \text{si } k = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad (61)$$

Il y a donc une alternance de points stables et instables (voir partie gauche de la figure 6). Pour les points stables on a en particulier  $\Re\{\lambda_k\} = 0$  ce qui indique que les points critiques sont des foyers autour desquels le système fait des oscillations si l'on regarde des mouvements de faible amplitude. Dans cette situation la linéarisation des équations du mouvement est permise et le système se comporte comme un oscillateur harmonique.

### 3 Modèles de croissance

Une autre classe de systèmes dynamiques concerne les phénomènes de croissance de populations au sens large, dont les coordonnées décrivent des phénomènes assez différents, comme la dynamique d'un écosystème ou la cinétique d'une réaction chimique. Du point de vue mathématique, ces systèmes ont la particularité que les variables dynamiques ne peuvent pas prendre des valeurs négatives. Une condition suffisante est la forme suivante des équations du mouvement

$$\dot{x}_j = x_j \phi_j(x_1, \dots, x_f) + \psi_j(x_1, \dots, x_f) \quad (62)$$

où  $\psi_j \geq 0$ . Si  $\psi_j(\cdot) = 0$  on peut donner une solution formelle de (62)

$$x_j(t) = x_j(0) \exp\left(\int_0^t d\tau \phi_j(x_1(\tau), \dots, x_f(\tau))\right) \quad (63)$$

qui montre clairement que  $x_j(t) \geq 0$  si  $x_j(0) \geq 0$ . Si l'on ajoute encore le terme  $\psi_j(\cdot)$  dans l'équation du mouvement, cette propriété sera certainement préservée, car la vitesse est toujours augmentée vers des valeurs positives.

#### 3.1 Modèle logistique

La croissance illimitée d'une population dont le nombre d'individus est décrit par la variable  $x$  et qui se reproduit avec un *taux de croissance relatif*  $\alpha$  est décrite par l'équation

$$\frac{dx(t)}{dt} = \alpha x(t). \quad (64)$$

La solution de cette équation est une exponentielle,  $x(t) = x(0) \exp(\alpha t)$ . En absence de limites de ressources la population croit donc d'une manière exponentielle si  $\alpha > 0$ . Dans la plupart des cas, cette situation n'est pas réaliste et on trouve que le modèle logistique (modèle de Verhulst) [5] est plus proche de la réalité

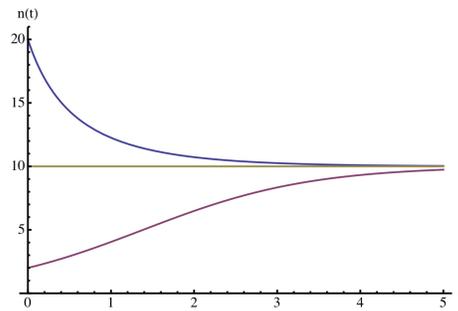


FIGURE 7 – Solution de l'équation (65) pour trois valeurs initiales,  $\alpha = 1, \beta = 0.1$ .

$$\boxed{\frac{dx(t)}{dt} = \alpha x(t) - \beta x(t)^2} \quad (65)$$

où  $\alpha > 0, \beta > 0$ . Ici le deuxième terme décrit la décroissance de la population à cause de la compétition des individus pour les ressources. La solution de

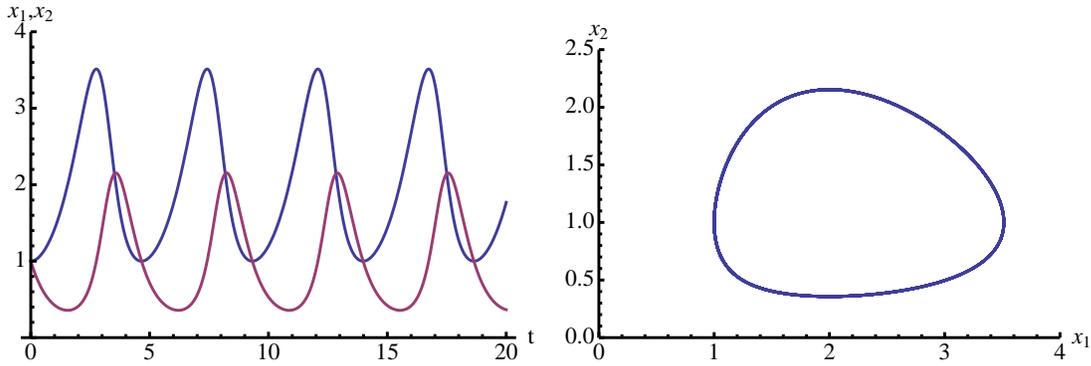


FIGURE 8 – **A gauche** : Solution numérique des équations (69) et (70) pour  $\alpha_1 = 1, \beta_1 = 1, \alpha_2 = 1, \beta_2 = 2$ . **A droite** : Portrait de phases correspondant.

l'équation différentielle (65) peut être trouvée par séparation de variables,

$$x(t) = \frac{\alpha \exp(\alpha t)x(0)}{\alpha + \beta x(0)(\exp(\alpha t) - 1)}, \quad (66)$$

et on voit qu'elle tend vers un plateau,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} x(t) = \frac{\alpha}{\beta}, \quad (67)$$

indépendamment de la valeur initiale (voir fig. 7). La valeur stationnaire est défini par  $dx/dt = 0$ , ce qui mène ici à  $x(\alpha - \beta n) = 0$ . Les deux solutions possibles sont donc  $n_s = 0$  et

$$x_s = \frac{\alpha}{\beta}. \quad (68)$$

Ici la solution stationnaire est donc la même que la solution asymptotique.

### 3.2 Modèle de Lotka-Volterra

Le modèle de Lotka et Volterra [7] est un joli exemple pour la modélisation réaliste de la dynamique de deux populations en interactions, qui représentent, respectivement, des proies et des prédateurs. Si  $x_1$  est la population des proies et  $x_2$  celle des prédateurs, les équations du mouvement ont la forme

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{dx_1(t)}{dt} &= x_1(t) \left( \alpha_1 - \beta_1 x_2(t) \right), & (69) \\ \frac{dx_2(t)}{dt} &= -x_2(t) \left( \beta_2 - \alpha_2 x_1(t) \right), & (70) \end{aligned}}$$

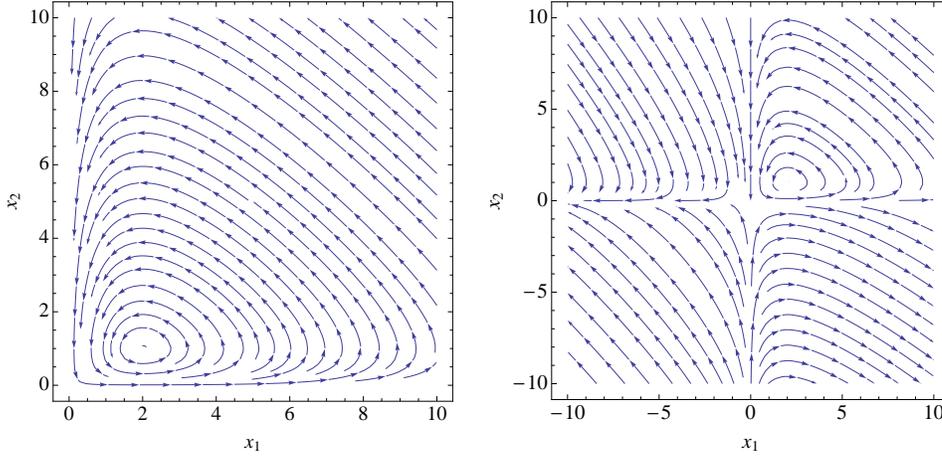


FIGURE 9 – **A gauche** : Champ de vitesse du modèle Lotka-Volterra pour  $x_1 \geq 0$ ,  $x_2 \geq 0$  **A droite** : Champ de vitesse incluant les régimes non-physiques  $x_1 < 0$  et  $x_2 < 0$ .

où  $\alpha_k > 0, \beta_k > 0$  ( $k = 1, 2$ ). Les équations différentielles remplissent visiblement la condition (62) pour la forme générale des équations du mouvement qui garantit la positivité des solutions. Dans ce modèle la population des proies évolue d'une manière exponentielle en absence de prédateurs et le taux relatif de leur mortalité est proportionnelle à la population des prédateurs. Le taux relatif de reproduction des prédateurs est proportionnel à la population des proies et leur taux relatif de mortalité est constant. Le modèle a été utilisé avec succès afin de décrire l'évolution périodique des populations de deux espèces de poissons dans la méditerranée.

La figure 8 montre une solution numérique particulière des équations (69) et (70) (partie gauche) et le portrait de phase correspondant (partie droite). Définissant

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{V} = \begin{pmatrix} x_1(\alpha_1 - \beta_1 x_2) \\ -x_2(\beta_2 - \alpha_2 x_1) \end{pmatrix} \quad (71)$$

on trouve que

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = (\alpha_1 - \beta_1 x_2) - (\beta_2 - \alpha_2 x_1) \neq 0. \quad (72)$$

Il ne s'agit donc pas d'un système hamiltonien, mais il y a une quantité conservée [7],

$$G(t) = \alpha_1 \left( \frac{x_2(t)}{x_{2,s}} - \ln \left[ \frac{x_2(t)}{x_{2,s}} \right] \right) + \beta_2 \left( \frac{x_1(t)}{x_{1,s}} - \ln \left[ \frac{x_1(t)}{x_{1,s}} \right] \right), \quad (73)$$

qui vérifié  $\dot{G}(t) = 0$  et qui définit une "surface" convexe 1d dans l'espace de phases sur laquelle reste le système pendant son mouvement périodique.

Il est intéressant d'effectuer une analyse de stabilité autour des points critiques qui sont définis par la relation  $\mathbf{V}(\mathbf{X}) = \mathbf{0}$ . Avec (71) on obtient

$$\mathbf{X}_{1,s} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{X}_{2,s} = \begin{pmatrix} \beta_2/\alpha_2 \\ \alpha_1/\beta_1 \end{pmatrix}, \quad (74)$$

et la matrice  $\mathbf{A}$  est donnée par

$$\mathbf{A}(\mathbf{X}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} & \frac{\partial v_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial v_2}{\partial x_1} & \frac{\partial v_2}{\partial x_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 - \beta_1 x_2 & -\beta_1 x_1 \\ \alpha_2 x_2 & \alpha_2 x_1 - \beta_2 \end{pmatrix}. \quad (75)$$

Pour les matrices  $\mathbf{A}$  évaluées au points  $\mathbf{X}_{s,k}$  et les valeurs propres associées on trouve

$$\mathbf{A}(\mathbf{X}_{s,1}) = \begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 \\ 0 & -\beta_2 \end{pmatrix}, \quad \lambda_1 = \alpha_1, \quad \lambda_2 = -\beta_2, \quad (76)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{X}_{s,2}) = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\beta_1 \beta_2}{\alpha_2} \\ \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\beta_1} & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_{1,2} = \pm i \sqrt{\alpha_1 \beta_2}. \quad (77)$$

Le point critique  $\mathbf{X}_{s,1}$  est donc instable et  $\mathbf{X}_{s,2}$  est un foyer, ce qui est confirmé par la fig. 9. La partie droite de cette figure montre un portrait de phases qui inclut des régions non-physiques. La figure confirme que  $\mathbf{X}_{s,1}$  est un point critique instable et on voit que les trajectoires ne traversent pas les lignes  $x_1 = 0$  et  $x_2 = 0$ .

## 4 Systèmes dynamiques sous contraintes

Le traitement de contraintes dans des systèmes dynamiques est un sujet classique de la mécanique analytique et remonte aux travaux de D'Alembert, Lagrange et Gauss [8, 9, 10]. Les méthodes de l'Algèbre linéaire moderne, notamment le concept matrices inverses généralisées [11, 12, 13, 14] mènent à une formulation élégante du problème [15, 16] et montrent également comment les équations du mouvement d'un système dynamique quelconque sous contraintes peuvent être formulées [17].

### 4.1 Systèmes mécaniques

#### 4.1.1 Les principes classiques de la mécanique sous contraintes

On commence par les équations du mouvement de Newton pour un système de  $N$  points matériels sous l'influence de  $N$  forces,  $\mathbf{f}_1, \dots, \mathbf{f}_n$ . En prévision des discussions suivantes il est commode d'utiliser une notation matricielle,

$$\mathbf{M} \cdot \ddot{\mathbf{x}} = \mathbf{f} \quad (78)$$

où  $\mathbf{M}$  est une masse diagonale de dimensions  $3N \times 3N$ ,

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} m_1 \mathbf{1} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & m_2 \mathbf{1} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & m_N \mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad (79)$$

et  $\mathbf{x}$  et  $\mathbf{f}$  sont des vecteurs de colonne de longueur  $3N$  contenant, respectivement, toutes les positions  $\mathbf{x}_\alpha$  et toutes les forces  $\mathbf{f}_\alpha$  ( $\alpha = 1, \dots, N$ ),

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_N \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{f}_N \end{pmatrix}, \quad (80)$$

On suppose maintenant que le système est soumis à des contraintes

$$\boxed{\sigma_k(\mathbf{x}) = 0, \quad (k = 1, \dots, n_h)} \quad (81)$$

$$\boxed{\eta_l(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = 0, \quad (l = 1, \dots, n_v)} \quad (82)$$

où  $n_h + n_v < 3N$ . On peut par exemple imposer une distance fixe entre deux points matériels

$$\sigma(\mathbf{x}) = (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^2 - d_{12}^2 = 0, \quad (83)$$

ou fixer l'énergie cinétique du système

$$\eta(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{x}}^T \cdot \mathbf{M} \cdot \dot{\mathbf{x}} - E_{cin} = 0. \quad (84)$$

En présence de ces contraintes les équations de Newton seront modifiées en ajoutant des forces des contraintes qui font que les contraintes imposées soient respectées,

$$\boxed{\mathbf{M} \cdot \ddot{\mathbf{x}} = \mathbf{f} + \mathbf{z}} \quad (85)$$

La question qui se pose est comment on peut déterminer les forces de contrainte,

$$\mathbf{z} = \begin{pmatrix} \mathbf{z}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{z}_N \end{pmatrix}. \quad (86)$$

à partir des contraintes imposées. Essentiellement deux principes on été formulés pour résoudre cette tâche

1. **Le principe de D'Alembert** : Ici on considère des *variations virtuelles* des positions

$$\delta \mathbf{x} = \begin{pmatrix} \delta \mathbf{x}_1 \\ \vdots \\ \delta \mathbf{x}_N \end{pmatrix}, \quad (87)$$

qui sont mathématiquement compatibles avec les contraintes imposées, mais qui ne sont pas effectuées par le système. D'après D'Alembert [8]

$$\boxed{(\mathbf{M}\ddot{\mathbf{x}} - \mathbf{f})^T \cdot \delta \mathbf{x} = \mathbf{z}^T \cdot \delta \mathbf{x} = 0} \quad (88)$$

2. **Le principe de Gauss** : Gauss a montré [10] que le principe de D'Alembert peut être formulé comme un vrai principe de d'optimisation, en minimisant l'écart entre les accélérations réelles et les accélérations dues aux forces externes,

$$\boxed{\frac{1}{2} \mathbf{z}^T \cdot \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{z} = \frac{1}{2} \|\mathbf{M}^{-1/2} \cdot \{\ddot{\mathbf{x}} - \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{f}\}\|^2 = \min[\ddot{\mathbf{x}}]} \quad (89)$$

où  $\|\dots\|$  dénote la norme euclidienne. Ce principe est appelé la *principe de la moindre contrainte*.

#### 4.1.2 Dynamique sous contraintes comme problème de Bott & Duffin

En différentiant les contraintes  $\sigma_i(\cdot)$  deux fois par rapport à  $t$  et les contraintes  $\eta_j(\cdot)$  une fois par rapport à  $t$  on obtient  $s = n_h + n_v$  contraintes linéaires pour les accélérations,

$$\boxed{\mathbf{A} \cdot \ddot{\mathbf{x}} = \mathbf{b}} \quad (90)$$

$$\boxed{\mathbf{A}(s, 3N)} \quad \boxed{\ddot{\mathbf{x}}} = \boxed{\mathbf{b}}$$

FIGURE 10 – Linear acceleration constraints

où  $\mathbf{A}$  est une matrice de dimensions  $s \times 3N$  et  $\mathbf{b}$  un vecteur de longueur  $s$  (voir fig.10). Les éléments de la matrice  $\mathbf{A}$  sont

$$A_{ij} = \begin{cases} \frac{\partial \sigma_i}{\partial x_j} & \text{si } i = 1, \dots, n_h, \\ \frac{\partial \eta_{i-n_h}}{\partial \dot{x}_k} & \text{si } i = n_h + 1, \dots, n_h + n_v \end{cases} \quad (91)$$

et ceux du vecteur  $\mathbf{b}$

$$b_i = \begin{cases} -\frac{\partial^2 \sigma_i}{\partial x_j \partial x_k} \dot{x}_j \dot{x}_k & \text{si } i = 1, \dots, n_h, \\ 0 & \text{si } i = n_h + 1, \dots, n_h + n_v \end{cases} \quad (92)$$

Les eqs. (90) peuvent être considérées comme un système de  $s$  équations linéaires pour  $3N$  inconnues qui sont les composantes du vecteur d'accélération. Comme  $s < 3N$  un tel système il n'y a pas une solution unique pour un tel système d'équation, mais sous une condition encore à définir on peut donner un ensemble de solutions qui représente les accélérations qui sont compatibles avec les contraintes imposées,

$$\boxed{\ddot{\mathbf{x}} = \mathbf{A}^+ \cdot \mathbf{b} + \ddot{\mathbf{x}}_{\parallel}} \quad (93)$$

Ici  $\mathbf{A}^+$  est la matrice inverse généralisée de  $\mathbf{A}$  [13, 14] et  $\ddot{\mathbf{x}}_{\parallel}$  vérifie  $\mathbf{A} \cdot \ddot{\mathbf{x}}_{\parallel} = \mathbf{0}$ . Si les contraintes (81) et (82) sont indépendantes, tel que la matrice  $\mathbf{A}$  a rang  $s$ , son inverse généralisée peut être exprimée par

$$\boxed{\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^T \cdot (\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^T)^{-1}} \quad (94)$$

Comme  $\mathbf{A} \cdot \ddot{\mathbf{x}}_{\parallel} = \mathbf{0}$ , la multiplication de (93) avec  $\mathbf{A}$  mène à

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^+ \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b} \quad (95)$$

ce qui représente une condition pour la solvabilité des équations (93). Si  $\mathbf{A}$  a rang  $s$ , tel que (158) est valable, la relation (95) est visiblement vérifiée. Avec la matrice  $\mathbf{A}^+$  on construit les projecteurs

$$\mathbf{P}_{\parallel} = \mathbf{1} - \mathbf{A}^+ \cdot \mathbf{A}, \quad (96)$$

$$\mathbf{P}_{\perp} = \mathbf{A}^+ \cdot \mathbf{A}, \quad (97)$$

où  $\mathbf{1}$  est la matrice d'unité de dimensions  $3N \times 3N$ . Les deux projecteurs ont les propriétés  $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$  et  $\mathbf{P}^T = \mathbf{P}$  et projettent sur les espaces orthogonaux  $\mathcal{V}_{\parallel}$  et  $\mathcal{V}_{\perp}$  de dimensions  $f = 3N - s$  et  $s$ , respectivement. Comme  $\mathbf{P}_{\perp} \cdot \mathbf{A}^+ \cdot \mathbf{b} = \mathbf{A}^+ \cdot \mathbf{b}$  on voit que (93) définit une décomposition orthogonale des accélérations en une composante fixée par les contraintes,

$$\ddot{\mathbf{x}}_{\perp} = \mathbf{A}^+ \cdot \mathbf{b}, \quad (98)$$

et une composante inconnue,  $\ddot{\mathbf{x}}_{\parallel}$ . Les équations du mouvement (85) prennent donc la forme

$$\boxed{\mathbf{M} \cdot (\ddot{\mathbf{x}}_{\parallel} + \ddot{\mathbf{x}}_{\perp}) = \mathbf{f} + \mathbf{z}} \quad (99)$$

Dans ces équations linéaires les inconnues sont les vecteurs  $\ddot{\mathbf{x}}_{\parallel}$  et  $\mathbf{z}$ . Une solution peut être donnée si l'on impose

$$\boxed{\mathbf{z} \cdot \ddot{\mathbf{x}}_{\parallel} = 0} \quad (100)$$

On montrera plus tard que cette formulation de la mécanique analytique des systèmes sous contraintes est équivalente à celle de D'Alembert et de Gauss.

### 4.1.3 Détermination des forces de contrainte

Avec la condition (100) la détermination de  $\ddot{\mathbf{x}}_{\parallel}$  et  $\mathbf{z}$  via (99) devient un problème connue en algèbre linéaire (problème de Bott & Duffin) [11]. Ici on procède de la manière suivante. Comme  $\ddot{\mathbf{x}}_{\parallel} \in \mathcal{V}_{\parallel}$  et  $\mathbf{z} \in \mathcal{V}_{\perp}$ , où  $\mathcal{V}_{\perp}$  est engendré par les lignes de  $\mathbf{A}$ . Pour cette raison on peut écrire

$$\boxed{\mathbf{z} = \mathbf{A}^T \cdot \boldsymbol{\lambda}} \quad (101)$$

où  $\boldsymbol{\lambda}$  est un vecteur de dimension  $s$  dont les composantes sont à déterminer

$$\boldsymbol{\lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_s \end{pmatrix}. \quad (102)$$

On transforme maintenant (99) dans la forme

$$\ddot{\mathbf{x}}_{\parallel} + \ddot{\mathbf{x}}_{\perp} = \mathbf{M}^{-1} \cdot (\mathbf{f} + \mathbf{A}^T \cdot \boldsymbol{\lambda})$$

et multiplie cette équation par la gauche avec  $\mathbf{P}_\perp$ . Avec cette multiplication  $\ddot{\mathbf{x}}_\parallel$  est éliminé et on obtient

$$\ddot{\mathbf{x}}_\perp = \mathbf{P}_\perp \cdot \mathbf{M}^{-1} \cdot (\mathbf{f} + \mathbf{A}^T \cdot \boldsymbol{\lambda})$$

ou bien

$$\mathbf{A}^+ \cdot \mathbf{b} = \mathbf{A}^+ \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{M}^{-1} \cdot (\mathbf{f} + \mathbf{A}^T \cdot \boldsymbol{\lambda}).$$

Multiplication avec  $\mathbf{A}$  et utilisation de (158) donne un système de  $s$  équations linéaires pour les coefficients  $\lambda_1, \dots, \lambda_s$ ,

$$\boxed{\mathbf{A} \cdot \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{A}^T \cdot \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{b} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{f}} \quad (103)$$

Le vecteur des forces de contraintes est alors donné par

$$\mathbf{z} = \mathbf{A}^T \cdot (\mathbf{A} \cdot \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{A}^T)^{-1} \cdot (\mathbf{b} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{f}). \quad (104)$$

et il suit de (85) que l'équation du mouvement prend la forme

$$\boxed{\ddot{\mathbf{x}} = \mathbf{M}_\parallel^+ \cdot \mathbf{f} + \mathbf{A}^T \cdot (\mathbf{A} \cdot \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{A}^T)^{-1} \cdot \mathbf{b}} \quad (105)$$

où la matrice

$$\mathbf{M}_\parallel^+ = \mathbf{M}^{-1} - \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{A}^T \cdot (\mathbf{A} \cdot \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{A}^T)^{-1} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{M}^{-1} \quad (106)$$

est l'inverse généralisée de la matrice

$$\boxed{\mathbf{M}_\parallel = \mathbf{P}_\parallel \cdot \mathbf{M} \cdot \mathbf{P}_\parallel} \quad (107)$$

La matrice  $\mathbf{M}_\parallel$  et donc la projection de  $\mathbf{M}$  dans le sous-espace  $\mathcal{V}_\parallel$  et  $\mathbf{M}_\parallel^+$  est l'inverse par rapport à ce sous-espace (*constrained generalized inverse* [11, 15, 16]).

---

#### Exemple 4. Mouvement sur une sphère:

*Comme illustration de la méthode décrite ce-dessus nous considérons une particule de masse  $m$  qui se déplace sur une sphère de rayon  $R$ ,*

$$\boxed{\|\mathbf{x}\|^2 = R^2} \quad (108)$$

La double différentiation de par rapport à  $t$  donne

$$\mathbf{x}^T \cdot \ddot{\mathbf{x}} = -\dot{\mathbf{x}}^T \cdot \dot{\mathbf{x}}, \quad (109)$$

tel que  $\mathbf{A} = \dot{\mathbf{x}}^T$  et  $b = -\dot{\mathbf{x}}^T \cdot \dot{\mathbf{x}}$ . Ici  $\mathbf{b} = b$  est un scalaire. Avec  $\mathbf{M} = m\mathbf{1}$  l'équation (103) prend la forme  $\mathbf{x}^2 \lambda = -m \dot{\mathbf{x}}^T \cdot \dot{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{f}$ . Utilisant la contrainte, on obtient l'équation du mouvement

$$\ddot{\mathbf{x}} = \left( \mathbf{1} - \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}^T}{R^2} \right) \frac{\mathbf{f}}{m} - \left( \frac{\dot{\mathbf{x}}^T \cdot \dot{\mathbf{x}}}{R^2} \right) \mathbf{x} \quad (110)$$

On reconnaît que le premier terme sur la droite est l'accélération tangentielle due à la force externe et le deuxième l'accélération normale qui compense l'accélération centrifugale.

### Exemple 5. Thermostat:

Une contrainte non-standard pour un système mécanique est un thermostat qui oblige le système à évoluer à énergie cinétique constante,

$$\frac{1}{2} \dot{\mathbf{x}}^T \cdot \mathbf{M} \cdot \dot{\mathbf{x}} = \frac{3}{2} N k_B T \quad (111)$$

La différentiation par rapport à  $t$  mène à

$$\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{M} \cdot \ddot{\mathbf{x}} = 0, \quad (112)$$

tel que  $\mathbf{A} = \dot{\mathbf{x}}^T \cdot \mathbf{M}$  et  $\mathbf{b} = b = 0$ . L'équation pour  $\lambda$  devient  $\{\dot{\mathbf{x}}^T \cdot \mathbf{M} \cdot \dot{\mathbf{x}}\} \lambda = -\dot{\mathbf{x}}^T \cdot \mathbf{f}$ . Utilisant la contrainte on obtient  $\lambda = -\dot{\mathbf{x}}^T \cdot \mathbf{f} / (3Nk_B T)$  et l'équation du mouvement devient

$$\ddot{\mathbf{x}} = \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{f} - \left\{ \frac{\dot{\mathbf{x}}^T \cdot \mathbf{f}}{3Nk_B T} \right\} \dot{\mathbf{x}} \quad (113)$$

Ici la deuxième terme sur la droite a la forme d'une "accélération de friction", sachant que le terme entre les crochets peut devenir négatif pour contrôler l'énergie cinétique.

## 4.2 Relation avec les principes classiques

Afin de relier l'approche de dériver les équations du mouvement d'un système dynamique par la méthode décrite dans la section 4.1.2 avec le principe de D'Alembert on considère un développement limité d'une trajectoire à un instant  $t$  donné,

$$\mathbf{x}(t + \delta t) = \mathbf{x}(t) + \delta t \dot{\mathbf{x}}(t) + \frac{\delta t^2}{2} \ddot{\mathbf{x}}(t). \quad (114)$$

Toute variation de  $\mathbf{x}(t + \delta t)$  qui est compatible avec les contraintes imposées est due à la variation de l'accélération à l'instant  $t$ , car les positions et les vitesses doivent être considérées données comme conditions initiales,

$$\delta \ddot{\mathbf{x}}(t) = \delta \ddot{\mathbf{x}}_{\parallel}(t) \in \mathcal{V}_{\parallel}(t). \quad (115)$$

Par conséquent la variation à l'instant  $t + \delta t$  est donnée par

$$\delta \mathbf{x}(t + \delta t) = \frac{\delta t^2}{2} \delta \ddot{\mathbf{x}}_{\parallel}(t) \quad (116)$$

et on voit que  $\delta \mathbf{x}(t + \delta t) \in \mathcal{V}_{\parallel}$ . Le principe de D'Alembert (88) doit être lu comme

$$\boxed{\mathbf{z}^T(t) \cdot \delta \mathbf{x}(t + \delta t) = 0} \quad (117)$$

et fixe la direction de  $\mathbf{z}$  qui est un vecteur de l'espace  $\mathcal{V}_{\parallel}$ . Ceci peut être exprimé dans la forme (101).

L'idée de Gauss était de formuler le principe de D'Alembert par un principe des moindres carrés. Si l'on considère la trajectoires sans contraintes on a le développement

$$\mathbf{x}^{(0)}(t + \delta t) = \mathbf{x}(t) + \delta t \dot{\mathbf{x}}(t) + \frac{\delta t^2}{2} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{f}(t), \quad (118)$$

au lieu de (122), tel que

$$\mathbf{z}(t) \propto \mathbf{M} \cdot (\mathbf{x}(t + \delta t) - \mathbf{x}^{(0)}(t + \delta t)). \quad (119)$$

Comme la variation de  $\mathbf{x}^{(0)}(t + \delta t)$  est nulle et peut écrire

$$\delta \mathbf{x}(t + \delta t) = \delta (\mathbf{x}(t + \delta t) - \mathbf{x}^{(0)}(t + \delta t)), \quad (120)$$

ce qui mène à une formulation possible du principe de Gauss,

$$\boxed{\frac{1}{2} \|\mathbf{M}^{1/2} \cdot \{\mathbf{x}(t + \delta t) - \mathbf{x}^{(0)}(t + \delta t)\}\|^2 = \min.} \quad (121)$$

Comme le développement (122) peut également être exprimé sous la forme

$$\mathbf{x}(t + \delta t) = \mathbf{x}(t) + \delta t \dot{\mathbf{x}}(t) + \frac{\delta t^2}{2} \mathbf{M}^{-1} \cdot \{\mathbf{f}(t) + \mathbf{z}(t)\}, \quad (122)$$

on retrouve effectivement le principe de Gauss sous la forme (89)

$$\frac{1}{2} \mathbf{z} \cdot \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{z} = \frac{1}{2} \|\mathbf{M}^{-1/2} \cdot \{\ddot{\mathbf{x}} - \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{f}\}\|^2 = \min[\ddot{\mathbf{x}}]. \quad (123)$$

### 4.3 Modèles de croissance

Le traitement de contraintes dans les modèles de croissance doit tenir compte de la condition de positivité des variables dynamiques. Ce problème a été abordé dans un article récent de Horvath et Kneller [18] dont l'essentiel sera présenté ici, en adaptant la notation au reste du cours.

#### 4.3.1 Equations du mouvement et traitement de contraintes

On suppose que les équations du mouvement sans contraintes ont la forme générale (62). Ici on utilisera la notation matricielle,

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{\Psi}(\mathbf{x}) + \mathbf{G}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) \quad (124)$$

où  $\mathbf{G}(\mathbf{x})$  est la matrice diagonale

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}) = \text{diag}(x_1, \dots, x_n), \quad (125)$$

et les vecteurs  $\mathbf{\Psi}$  et  $\boldsymbol{\phi}$  sont définis par  $\mathbf{\Psi} = (\Psi_1, \dots, \Psi_n)^T$  et  $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, \dots, \phi_n)^T$ , respectivement.

On impose maintenant les conditions

$$\sigma_i(\mathbf{x}, t) = \sigma_i^{(0)}, \quad i = 1, \dots, m_h \quad (126)$$

$$\sum_{j=1}^n A_{ij}^{(v)}(\mathbf{x}, t) \dot{x}_j = b_i^{(v)}(\mathbf{x}, t), \quad i = 1, \dots, m_v \quad (127)$$

où il est important que les contraintes pour les vitesses soient des fonctions linéaires. Par différentiation des contraintes holonomes (126) on dérive un jeu de contraintes global pour les vitesses,

$$\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{x}} = \mathbf{b} \quad (128)$$

Ici  $\mathbf{A}$  est une matrice de dimensions  $m \times n$ , où  $m = m_h + m_v < n$ , et  $\mathbf{b}$  est un vecteur de dimension  $m$ , dont les composantes sont données par

$$A_{ij} = \begin{cases} \partial\sigma_i/\partial c_j & \text{si } i = 1, \dots, m_h, j = 1, \dots, n \\ A_{i-m_h, j}^{(v)} & \text{if } i = m_h + 1, \dots, m, j = 1, \dots, n \end{cases} \quad (129)$$

$$b_i = \begin{cases} -\partial\sigma_i/\partial t & \text{si } i = 1, \dots, m_h, \\ b_{i-m_h}^{(v)} & \text{if } i = m_h + 1, \dots, m \end{cases} \quad (130)$$

On suppose que les contraintes sont indépendantes tel que la matrice  $\mathbf{A}$  a rang  $m$ .

En analogie avec la mécanique on résout les équations (128) afin d'obtenir ici les vitesses qui sont compatibles avec les contraintes imposées

$$\boxed{\dot{\mathbf{x}} = \dot{\mathbf{x}}_{\parallel} + \mathbf{A}^+ \mathbf{b}} \quad (131)$$

Ceci est une décomposition orthogonale,  $\dot{\mathbf{x}} = \dot{\mathbf{x}}_{\parallel} + \dot{\mathbf{x}}_{\perp}$ , où

$$\dot{\mathbf{x}}_{\perp} = \mathbf{A}^+ \mathbf{b} \quad (132)$$

et  $\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{x}}_{\parallel} = \mathbf{0}$  et  $\mathbf{A}^+$  est donnée par (158).

Afin de préserver la positivité des solutions, on écrit les équations du mouvement pour la dynamique sous contraintes dans la forme

$$\boxed{\dot{\mathbf{x}} = \Psi(\mathbf{x}) + \mathbf{G} \{\phi(\mathbf{x}) + \mathbf{z}(\mathbf{x})\}} \quad (133)$$

où  $\mathbf{z}$  est un vecteur des *taux de contrainte*. Définissant le vecteur

$$\mathbf{h} = \mathbf{A}^+ \cdot \mathbf{b} - \Psi - \mathbf{G} \cdot \phi, \quad (134)$$

les équations du mouvement peuvent être écrites sous la forme compacte

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{z} - \dot{\mathbf{x}}_{\parallel} = \mathbf{h} \quad (135)$$

qui représente un système d'équations linéaires pour les inconnues vectorielles  $\dot{\mathbf{x}}_{\parallel}$  et  $\mathbf{z}$ . Posant la condition

$$\mathbf{z}^T \cdot \dot{\mathbf{x}}_{\parallel} = 0, \quad (136)$$

la solution de l'équation (135) devient un problème de Bott et Duffin [11], qui a une solution unique. Pour la solution on procède de la même façon que pour les systèmes mécaniques, posant

$$\mathbf{z} = \mathbf{A}^T \cdot \boldsymbol{\lambda} \in \mathcal{V}_{\perp}. \quad (137)$$

L'insertion de cette expression dans (135) et multiplication avec  $\mathbf{A}$  par la gauche mène à

$$(\mathbf{A} \cdot \mathbf{G} \cdot \mathbf{A}^T) \cdot \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{h}, \quad (138)$$

car  $\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{x}}_{\parallel} = \mathbf{0}$ . Si  $\det(\mathbf{A} \cdot \mathbf{G} \cdot \mathbf{A}^T) \neq 0$ , on obtient une solution unique pour  $\boldsymbol{\lambda}$  et  $\mathbf{z}$  devient

$$\boxed{\mathbf{z} = \mathbf{G}_{\perp}^+ \cdot \mathbf{h}} \quad (139)$$

où  $\mathbf{G}_{\perp}^+$  est donnée par

$$\mathbf{G}_{\perp}^+ = \mathbf{A}^T (\mathbf{A} \mathbf{G} \mathbf{A}^T)^{-1} \mathbf{A} \quad (140)$$

Cette matrice est l'inverse généralisée de la projection

$$\boxed{\mathbf{G}_{\perp} = \mathbf{P}_{\perp} \cdot \mathbf{G} \cdot \mathbf{P}_{\perp}} \quad (141)$$

où  $\mathbf{P}_{\perp} = \mathbf{A}^+ \cdot \mathbf{A}$  (voir eq. (97)).

### 4.3.2 Réactions autocatalytiques avec contraintes

Comme application on considère un réseau cyclique de réactions autocatalytiques

$$\boxed{\dot{x}_i = k_h x_i x_{i+1}, \quad x_{n+1} = x_1} \quad (142)$$

Ici  $x_i = N_i/N$  où  $N_i$  est le nombre de molécule de espèces  $i$  et  $N = \sum_{i=1}^n N_i$ . Avec la notation introduite préalablement, nous avons ici  $\phi_i = k_h c_{i+1}$  et  $\Psi_i = 0$ . Le taux de réaction est contrôlé par la constante cinétique,  $k_h > 0$ . Les équations (142) ont été proposées par Eigen et Schuster comme modèle pour une évolution prébiotique [19].

La première contrainte que nous imposons fixe le nombre total de molécules

$$\sum_{i=1}^n x_i = 1 \quad (143)$$

ce qui devient par différentiation

$$\boxed{\sum_{i=1}^n \dot{x}_i = 0} \quad (144)$$

La deuxième contrainte concerne fixe la production d'entropie et nécessite une discussion préalable. Le changement de l'entropie d'un système peut être décomposé en une contribution due à la production d'entropie interne et une contribution due aux échanges avec l'extérieur,

$$dS = dS_{\text{int}} + dS_{\text{ext}}. \quad (145)$$

Si le système est proche de l'équilibre on peut utiliser les relations de la thermodynamique d'équilibre et la composante interne de l'entropie intensive,  $s = S/N$ , est donnée par

$$Tds_{\text{int}} = - \sum_{i=1}^n \mu_i dx_i^{\text{int}}. \quad (146)$$

Ici  $\mu_i$  est le potentiel chimique pour lequel un modèle possible est

$$\mu_i = \mu_i^{(0)} + k_B T \ln \left( \frac{x_i}{\sum_{l=1}^n x_l} \right) \quad (147)$$

Comme modèle pour la production d'entropie on propose une fonction qui part d'une valeur  $s_0$  et s'approche d'une manière exponentielle de la valeur  $s_{\text{eq}}$  pour  $t \rightarrow \infty$ ,

$$s(t) = s_0 + (s_{\text{eq}} - s_0) (1 - \exp[-t/\tau_s]). \quad (148)$$

La constante  $\tau$  fixe le taux de production d'entropie. Avec ceci on trouve pour un système fermé, où  $ds = ds_{\text{int}}$

$$\boxed{T \frac{ds}{dt} = \sum_{i=1}^n \mu_i \dot{x}_i = -\frac{T(s_{\text{eq}} - s_0)}{\tau_s} \exp(-t/\tau_s)} \quad (149)$$

Pour un système ouvert, l'entropie totale reste constante,  $ds = ds_{\text{int}} + ds_{\text{ext}} = 0$ , et on obtient à la place de (149) la contrainte

$$\boxed{T \frac{ds}{dt} = \sum_{i=1}^n \mu_i \dot{x}_i = 0} \quad (150)$$

pour les vitesses de réaction.

Les contraintes introduites ci-dessus mène à une matrice  $\mathbf{A}$  avec des éléments  $A_{ij} = \delta_{i1} + \mu_j \delta_{i2}$ , où  $\delta_{ij}$  est le symbole Kronecker. Les éléments de  $\mathbf{b} = (b_1, b_2)^T$  sont  $b_1 = 0$ ,  $b_2 = -T(s_{\text{eq}} - s_0) \exp[-t/\tau_s]/\tau_s$  pour les contraintes (143) and (149) et  $b_1 = 0$ ,  $b_2 = 0$  pour les contraintes (143) and (150). Avec ceci on trouve pour les les éléments de la matrice  $\mathbf{G}_{\perp}^+$

$$(\mathbf{G}_{\perp}^+)_{i,j} = \frac{\mu_i \mu_j - \mathcal{M}_1 (\mu_i + \mu_j) + \mathcal{M}_2}{\mathcal{M}_2 - \mathcal{M}_1^2} \quad (151)$$

avec les "moments"

$$\mathcal{M}_q = \sum_{l=1}^n \mu_l^q x_l \quad (q = 1, 2). \quad (152)$$

Avec ceci les composantes du vecteur des taux de contrainte sont

$$\boxed{z_i = \eta_M \left( (\eta_1 + \eta_0 \mathcal{M}_1) \mu_i - (\eta_1 \mathcal{M}_1 + \eta_0 \mathcal{M}_2) \right)} \quad (153)$$

où  $\eta_0 = k_h \sum_{i=1}^n x_i x_{i+1}$ ,  $\eta_1 = b_2 - k_h \sum_{i=1}^n x_i x_{i+1} \mu_i$ , et  $c_{n+1} = c_1$ .

La figure 11 montre les résultats d'un calcul pour un choix particulier des paramètres. La courbe noir pointillée est le résultat avec la constance de la population totale comme seule contrainte. Visiblement on a un comportement similaire à celui du modèle de Lotka-Volterra et ceci est aussi vrai si l'on ajoute une contrainte pour une production zéro de la production totale de l'entropie. La seule différence essentielle est un décalage différent des populations dans le temps et des amplitudes légèrement réduites. La situation change avec une production positive d'entropie. Avec ceci on introduit visiblement un effet de dissipation qui mène à une valeur constante pour chaque population pour  $t \rightarrow \infty$ . Plus de détails peuvent être trouvés dans la référence [18].

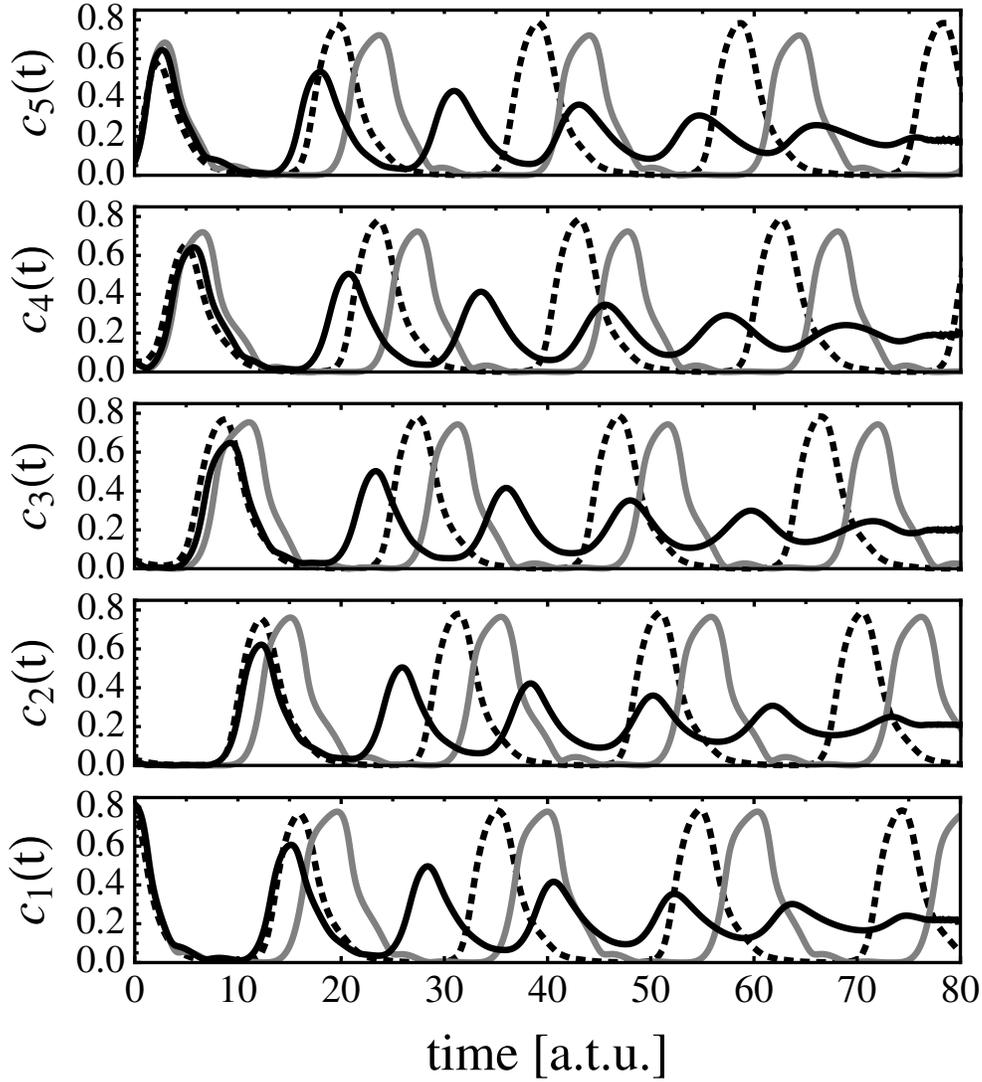


FIGURE 11 – Dynamique d’un hypercycle avec  $n = 5$  pour différents types de contraintes : (a) population totale constante (ligne noire pointillée), (b) population totale constante avec production d’entropie (ligne noire continue), (c) population totale constante sans production globale d’entropie (ligne grise continue). Les calculs ont été effectués pour  $\tau_s = 30$  a.t.u. (*arbitrary time units*), une constante de réaction  $k_h = 3/\text{a.t.u.}$ , et  $\mu_l^{(0)} = (0.1 + 0.05l)k_B T$  ( $l = 1, \dots, 5$ ).

# A Appendix

## A.1 Matrices inverses généralisées

Dans son article intitulé *A Generalized Inverse for Matrices* [12] Penrose montre que pour chaque matrice complexe  $\mathbf{A}$  de dimensions  $m \times n$  existe une matrice  $\mathbf{X}$  de dimensions  $n \times m$ , tel que

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A}, \quad (154)$$

$$\mathbf{X} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{X}, \quad (155)$$

$$(\mathbf{A} \cdot \mathbf{X})^\dagger = \mathbf{A} \cdot \mathbf{X}, \quad (156)$$

$$(\mathbf{X} \cdot \mathbf{A})^\dagger = \mathbf{X} \cdot \mathbf{A}. \quad (157)$$

Ici le symbole “ $\dagger$ ” dénote la transposée et conjuguée complexe d’une matrice. La matrice  $\mathbf{X}$  qui remplit les conditions (154)–(157) et dénotée par

$$\mathbf{A}^+ \equiv \mathbf{X}. \quad (158)$$

Si la matrice  $\mathbf{A}$  peut être décomposée en deux facteurs  $\mathbf{F}$  et  $\mathbf{G}$

$$\mathbf{A} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{G}, \quad (159)$$

où  $\mathbf{F}$  est une matrice de dimensions  $m \times r$  de rang  $r$  et  $\mathbf{G}$  une matrice de dimensions  $r \times n$ -matrix de rang  $r$ ,  $\mathbf{A}^+$  a la forme

$$\mathbf{A}^+ = \mathbf{G} \cdot (\mathbf{G} \cdot \mathbf{G}^T)^{-1} \cdot (\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F})^{-1} \cdot \mathbf{F}. \quad (160)$$

Les matrices inverses généralisées permettent de construire la solution d’équations linéaires sous- ou surdéterminées. Partant de

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (161)$$

on trouve par multiplication avec  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^+$  par la gauche que  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^+ \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^+ \cdot \mathbf{b}$ . Par conséquent

$$\mathbf{b} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^+ \cdot \mathbf{b}. \quad (162)$$

est une condition nécessaire pour une l’existence d’une solution  $\mathbf{x}$ . Si cette condition est vérifiée la solution est donnée par

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^+ \cdot \mathbf{b} + (\mathbf{1} - \mathbf{A}^+ \cdot \mathbf{A}) \cdot \mathbf{y}, \quad (163)$$

où  $\mathbf{y}$  est un vecteur arbitraire de dimension  $n$ . L’équation (163) représente effectivement une décomposition orthogonale de la solution  $\mathbf{x}$ ,

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_{\parallel} + \mathbf{x}_{\perp}, \quad (164)$$

où les deux composantes sont définies par

$$\mathbf{x}_{\parallel} = (\mathbf{1} - \mathbf{A}^+ \cdot \mathbf{A}) \cdot \mathbf{y}, \quad (165)$$

$$\mathbf{x}_{\perp} = \mathbf{A}^+ \cdot \mathbf{b}. \quad (166)$$

Ici  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x}_{\parallel} = \mathbf{0}$  et  $\mathbf{x}_{\perp}$  est la solution de norme minimale qui est engendrée par les lignes de la matrice  $\mathbf{A}$ .

Si la relation (161) n'est pas vérifiée, on peut chercher la solution pour laquelle le résidu

$$\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x} \quad (167)$$

est minimal. La quantification de la taille de  $\mathbf{r}$  on peut utiliser sa norme euclidienne. Dans ce cas on cherche le minimum de

$$\|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2 \quad (168)$$

par rapport à  $\mathbf{x}$ . La solution est donnée par (163), et  $\mathbf{x}_{\parallel} = \mathbf{A}^+\mathbf{b}$  est la solution de norme minimale.

## Références

- [1] L.A. Pars. *A treatise on analytical dynamics*. Heinemann, London, 1965.
- [2] H. Goldstein. *Classical Mechanics*. Addison-Wiley, 1971.
- [3] Cornelius Lanczos. *The variational principles of mechanics*. University of Toronto Press, Toronto, 4th edition, 1974.
- [4] V.I. Arnold. *Mathematical Methods of Classical Mechanics*. Springer, 2nd edition, 1989.
- [5] Hermann Haken. *Advanced Synergetics*. Springer, 1983.
- [6] H. Haken. *Information and Self-Organization : A Macroscopic Approach to Complex Systems*. Springer Series in Synergetics. Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 2nd enlarged edition, 2000.
- [7] N.S. Goel, S.C. Maitra, and E.W. Montroll. On the Volterra and other nonlinear models of interacting populations. *Reviews of Modern Physics*, 43(2) :231, 1971.
- [8] Jean D'Alembert. *Traité de dynamique* (réimpression de l'édition originale de 1758). Editions Jacques Gabay, Paris, 1990.
- [9] Joseph-Louis Lagrange. *Mécanique analytique* (réimpression de l'édition originale de 1778). Editions Jacques Gabay, Paris, 1989.
- [10] C.F. Gauß. Über ein neues allgemeines Grundgesetz der Mechanik. *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, 1829(4) :232–235, 1829.
- [11] R. Bott and RJ Duffin. On the algebra of networks. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 74(99-109) :150, 1953.
- [12] R. Penrose. A generalized inverse for matrices. *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, 51(406-413) :C655, 1955.
- [13] A. Ben-Israel and T.N.E. Greville. *Generalized Inverses : Theory and Applications*. John Wiley, New York, 1974.
- [14] S.L. Campbell and C.D. Meyer (Jr). *Generalized inverses of Linear Transformations*. Pitman, 1979.
- [15] G R Kneller. Hamiltonian formalism for semiflexible molecules in Cartesian coordinates. *J Chem Phys*, 125(11) :114107, 2006.
- [16] Gerald R Kneller. Projection formalism for constrained dynamical systems : From Newtonian to Hamiltonian mechanics. *J Chem Phys*, 127(16) :164114, 2007.
- [17] Gerald R Kneller and Konrad Hinsén. Quantitative model for the heterogeneity of atomic position fluctuations in proteins : A simulation study. *J Chem Phys*, 131(4) :045104, 2009.

- [18] Denis Horvath and Gerald R Kneller. A least-constraint principle for population dynamics and reaction kinetics : Modeling entropy-controlled chemical hypercycles. *J Chem Phys*, 131(17) :171101, 2009.
- [19] M. Eigen and P. Schuster. *The Hypercycle - A principle of Natural Self-Organization*. Springer-Verlag, Heidelberg, 1979.