

Mouvement conservatif à un degré de liberté

Plan du cours

I	Analyse du profil d'énergie potentielle	1
I.A	Rappel : forces, énergies potentielles et énergie mécanique	1
I.B	État lié ou de diffusion.	2
I.C	Positions d'équilibre.	3
II	Oscillations au voisinage d'une position d'équilibre stable	6
II.A	Exemple : potentiel de Morse	6
II.B	Approximation harmonique.	7
II.C	Au delà de l'approximation harmonique : effets des non-linéarités	8

(R) Résultat à connaître par cœur.

(M) Méthode à retenir, mais pas le résultat.

(D) Démonstration à savoir refaire.

(Q) Aspect qualitatif uniquement.

Les paragraphes sans mention en marge sont là pour faciliter votre compréhension ou pour votre culture mais n'ont pas forcément besoin d'être appris en tant que tel.

Ce chapitre a pour but d'approfondir l'approche énergétique des mouvements en se focalisant sur le cas où le système ne possède qu'un seul degré de liberté, c'est-à-dire qu'une seule coordonnée géométrique (cartésienne ou angulaire) suffit à décrire son mouvement. On se restreint de plus aux **mouvements conservatifs**, pour lesquels l'énergie mécanique est une constante du mouvement : le système n'est donc soumis qu'à des forces conservatives ou qui ne travaillent pas.

Exemples :

Espace 1

I - Analyse du profil d'énergie potentielle

I.A - Rappel : forces, énergies potentielles et énergie mécanique

Système : point matériel de masse m , évoluant le long d'un axe (Ox) , c'est-à-dire à un degré de liberté cartésien x .

Remarque : Des relations analogues (mais pas identiques !) s'obtiennent pour un mouvement à un degré de liberté angulaire θ .

Référentiel : à voir au cas par cas, mais toujours galiléen.

Bilan des forces :

► forces conservatives $\vec{F}_i(x)$ dérivant d'une énergie potentielle $E_{p,i}(x)$, dont on note les résultantes

$$\vec{F}(x) = \sum_i \vec{F}_i(x) \quad \text{et} \quad E_p(x) = \sum_i E_{p,i}(x),$$

sachant que

$$\vec{F}_i = -\overrightarrow{\text{grad}} E_{p,i} = -\frac{dE_{p,i}}{dx} \vec{e}_x \quad \text{donc} \quad \vec{F} = -\overrightarrow{\text{grad}} E_p = -\frac{dE_p}{dx} \vec{e}_x.$$

► éventuellement forces $\vec{F}_j$ non-conservatives mais qui ne travaillent pas de résultante

$$\vec{F}' = \sum_j \vec{F}_j.$$

Conservation de l'énergie mécanique : d'après le théorème de l'énergie mécanique,

$$\frac{dE_m}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 + E_p(x) \right) = \sum_j \underbrace{\vec{F}_j \cdot \dot{x} \vec{e}_x}_{=0 \text{ (hyp)}} = 0 \quad \text{donc} \quad \boxed{E_m = \text{cte.}}$$

L'énergie mécanique est fixée par les conditions initiales, elle est donc supposée constante et est un paramètre de notre étude.

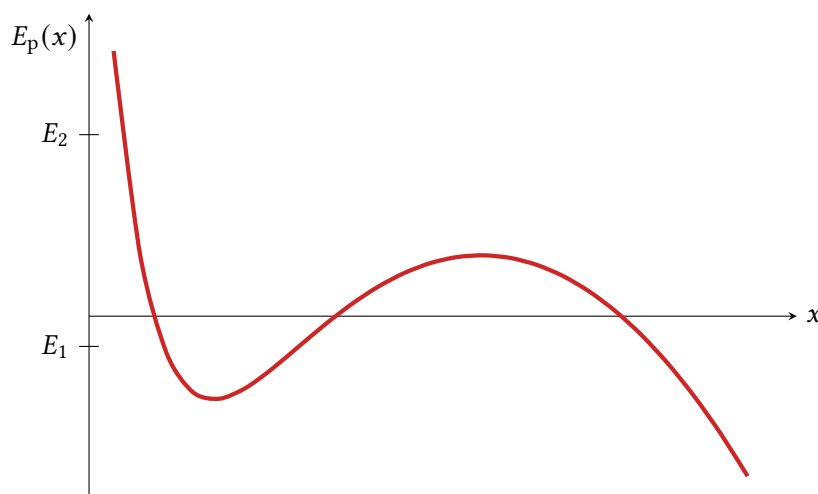
I.B - État lié ou de diffusion

Figure 1 – Exemple de profil d'énergie potentielle.

- Points de vitesse nulle



La vitesse s'annule aux positions x telles que $E_p(x) = E_m$.

Démonstration : $E_c = E_m - E_p(x) = 0$ lorsque la vitesse est nulle.

Illustration : points de vitesse nulle pour $E_m = E_1$ ou E_2 indiqués figure 1.

- Positions accessibles



Les positions accessibles sont celles pour lesquelles $E_p(x) \leq E_m$.

Démonstration : comme $E_c \geq 0$, on a forcément $E_p(x) \leq E_m$, sinon il y a une incohérence qui signifie que le système ne peut pas se trouver en x .

Illustration :

Espace 2



Un système est dit **dans un état lié** si son mouvement est restreint à un domaine fini de l'espace. Réciproquement, il est dit **dans un état de diffusion** si son mouvement se fait dans un domaine infini.



Pour qu'un système se trouve dans un état lié, il faut que la courbe d'énergie potentielle présente un minimum (éventuellement local) : on parle alors de **puits de potentiel** délimité par une **barrière de potentiel** (pouvant être finie ou infinie).

Illustration :

Espace 3

I.C - Positions d'équilibre

Si le système est lâché sans vitesse à une position d'équilibre $x = x_{\text{eq}}$, alors il y demeure indéfiniment.

I.C.1 - Caractérisation énergétique

Espace 4



Une position d'équilibre correspond à un extrémum d'énergie potentielle.



Illustration : voir figure 2.

Conséquence :



Un mouvement conservatif dans un puits de potentiel est, sauf exception, périodique.



Démonstration : Une position de vitesse nulle ne correspond en général pas à une position d'équilibre, le système y fait donc demi-tour et revient sur ses pas avec en tout point une énergie cinétique indépendante du sens du déplacement. Il finit donc par repasser par sa position initiale avec une vitesse égale à sa vitesse initiale, et reproduit son mouvement à l'identique.

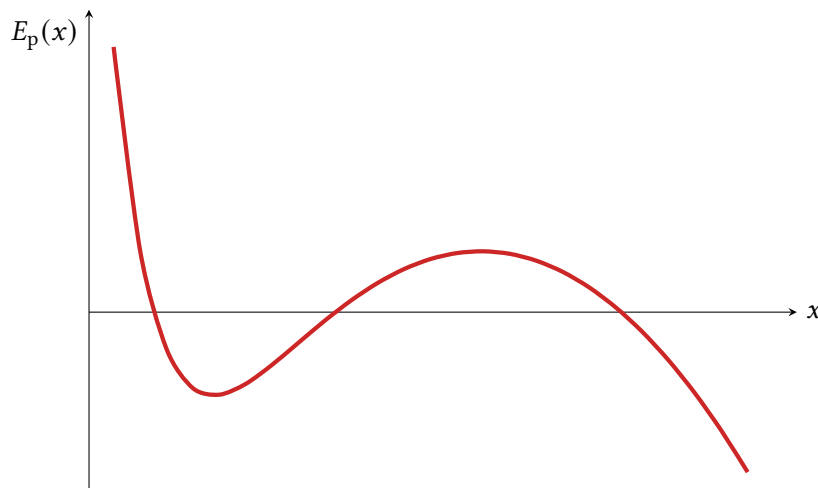


Figure 2 – Exemple de profil d'énergie potentielle.

I.C.2 - Stabilité

R



Une position d'équilibre est dite **stable** si les forces subies par le système le ramènent vers cette position lorsqu'il en est légèrement écarté.

Dans le cas contraire, la position d'équilibre est dite **instable**.

• Approche qualitative

Sens de la force et sens de variation de l'énergie potentielle :

$$\vec{F} = -\overrightarrow{\text{grad}} E_p \quad \text{donc} \quad F_x(x) = -\frac{dE_p}{dx}$$

Espace 5

R



La force est toujours dirigée dans le sens des énergies potentielles décroissantes, donc vers le minimum d'énergie potentielle le plus proche.

Q

↪ un profil d'énergie potentielle peut s'interpréter de manière intuitive comme celui d'une piste sur laquelle évoluerait p.ex. une bille.

Conséquence :



Un minimum d'énergie potentielle correspond à une position d'équilibre stable, un maximum à une position d'équilibre instable.

• Approche mathématique

Si l'écart ε par rapport à la position d'équilibre x_{eq} est faible, alors la force $F_x(x_{\text{eq}} + \varepsilon)$ peut être estimée par un développement limité au premier ordre en ε .

D

• Conclusion

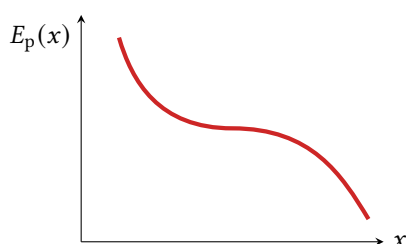
Une position d'équilibre x_{eq} est stable si l'énergie potentielle y est minimale :

$$\frac{dE_p}{dx}(x=x_{\text{eq,st}}) = 0 \quad \text{et} \quad \frac{d^2E_p}{dx^2}(x=x_{\text{eq,st}}) > 0.$$

La position d'équilibre est instable dans tous les autres cas, le plus fréquent étant que l'énergie potentielle soit maximale,

$$\frac{dE_p}{dx}(x=x_{\text{eq,ins}}) = 0 \quad \text{et} \quad \frac{d^2E_p}{dx^2}(x=x_{\text{eq,ins}}) < 0.$$

►► **Pour approfondir** : Le cas où la dérivée seconde est nulle en x_{eq} demande un peu plus de précaution, et peut conduire à une position d'équilibre stable ou instable. S'il s'agit d'un minimum (p.ex. $E_p(x) \propto (x - x_{\text{eq}})^4$), alors la position d'équilibre est stable, et il s'agit d'un maximum (p.ex. $E_p(x) \propto -(x - x_{\text{eq}})^4$) alors elle est instable.



Un point d'inflexion donne également un équilibre instable, comme on peut le constater sur le profil ci-contre. Si la particule est légèrement écartée vers la gauche elle se trouve dans un état de diffusion : lâchée sans vitesse depuis une position $x_{\text{eq}} - \varepsilon$, elle repasse en x_{eq} avec une vitesse $\dot{x} > 0$, et continue son chemin en étant de plus en plus accélérée vers la droite, et finit donc infiniment écartée de sa position d'équilibre.

II - Oscillations au voisinage d'une position d'équilibre stable

II.A - Exemple : potentiel de Morse

Quitte à travailler sur un exemple, autant le choisir physiquement pertinent : nous allons travailler sur le **potentiel de Morse**, introduit par Philipp Morse en 1929 pour modéliser les vibrations des molécules diatomiques, par exemple sous l'effet de la température ou de l'interaction avec une onde électromagnétique. Ce modèle était destiné à une étude quantique, mais nous l'étudierons dans une approche classique où il conduit déjà à des résultats intéressants.

Il stipule que les vibrations d'une molécule diatomique AB peuvent être décrites par le mouvement unidimensionnel par rapport à un point fixe O d'un point matériel M de masse m telle que

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B}$$

soumis à une unique force $\vec{F}$ dérivant de l'énergie potentielle

$$E_p(x) = E_0 \left(1 - e^{-(x-\ell_0)/a} \right)^2.$$

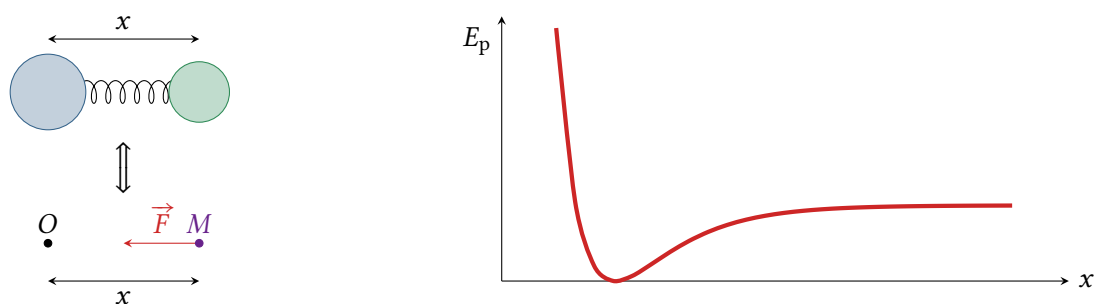


Figure 3 – Modélisation d'une molécule diatomique.

Interprétation des différents paramètres : (ordres de grandeur pour une molécule de dihydrogène H_2)

▷ $\ell_0 \sim 0,08 \text{ nm}$:

Espace 7

▷ $a \sim 0,05 \text{ nm}$:

Espace 8

▷ $E_0 \sim 5 \text{ eV}$:

Espace 9

Remarque : On note ici le choix un peu inhabituel d'une énergie potentielle non-nulle à l'infini afin d'avoir une énergie potentielle minimale nulle. Rien n'interdirait cependant de prendre une énergie potentielle nulle à l'infini : il suffirait alors de poser $E'_p(x) = E_p(x) - E_0$, ce qui donne la même physique puisqu'une énergie potentielle est définie à une constante additive près.

II.B - Approximation harmonique

Pour étudier les petits mouvements au voisinage d'une position d'équilibre stable $x_{\text{eq}} = \ell_0$, une première approche consiste à raisonner sur un développement limité en $x - x_{\text{eq}}$ de l'énergie potentielle, à l'ordre 2 qui est le premier ordre non-nul.

Approximation de l'énergie potentielle :

D

Espace 10

Équation du mouvement approchée :

Espace 11



Au voisinage d'une position d'équilibre stable,
toute énergie potentielle peut s'approximer par une fonction quadratique
grâce à un développement limité à l'ordre 2.

L'équation du mouvement est alors celle d'un oscillateur harmonique,
c'est pourquoi on parle d'approximation par un **puits de potentiel harmonique**.

R

→ les oscillations de la particule sont donc harmoniques, c'est-à-dire sinusoïdales, centrées sur la position d'équilibre, et **isochrones** : leur pulsation est indépendante de leur amplitude.

Exemple du potentiel de Morse : on peut montrer que

$$k = \frac{d^2 E_p}{dx^2}(x = \ell_0) = \frac{2E_0}{a^2}$$



→ plus le puits de potentiel est profond et plus il est étroit, plus le ressort équivalent est raide, ce qui est cohérent avec le fait que la particule peut moins aisément s'écarter de sa position d'équilibre.

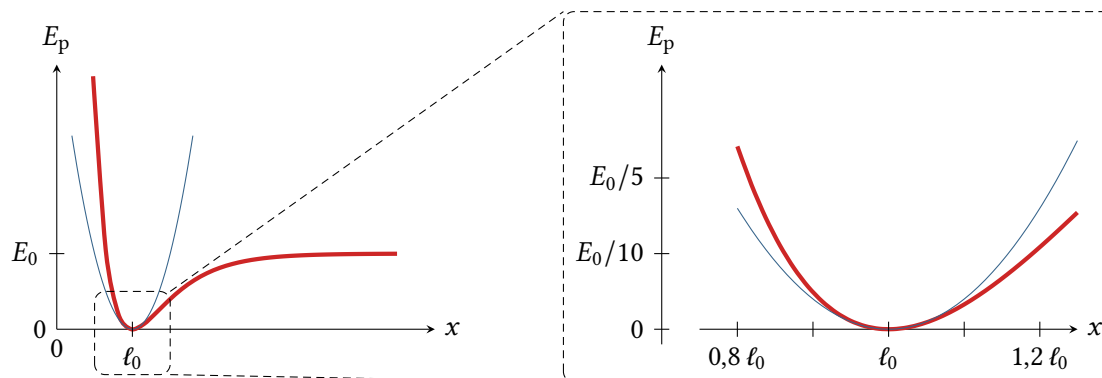


Figure 4 – Approximation harmonique du potentiel de Morse.

II.C - Au delà de l'approximation harmonique : effets des non-linéarités

L'approximation harmonique conduit à une force **linéaire**, c'est-à-dire proportionnelle à l'écart à la position d'équilibre, qui permet des calculs simplifiés ... mais conduit à des résultats simplifiés également. Analyser l'effet des non-linéarités, c'est-à-dire aller au-delà de l'approximation harmonique, demande généralement de se tourner vers une résolution numérique de l'équation du mouvement.

L'équation du mouvement issue du TEM s'écrit

$$m\ddot{x} = F_x(x) \quad \text{avec} \quad F_x(x) = -\frac{dE_p}{dx} = -\frac{2E_0}{a} e^{-(x-\ell_0)/a} \left(1 - e^{-(x-\ell_0)/a}\right).$$

II.C.1 - Adimensionnalisation de l'équation différentielle

Pour alléger l'écriture du code, raisonner sur des grandeurs adimensionnées est souvent pratique.

→ nécessité d'identifier des grandeurs caractéristiques du problème, permettant de constituer un **système d'unités naturelles**, c'est-à-dire adapté au problème physique étudié.

Longueur caractéristique :

Espace 12

→ définition de la position adimensionnée :

Temps caractéristique :

Espace 13

→ définition du temps adimensionné :

Espace 14

Masse caractéristique : masse m du point matériel, ce qui donne une masse adimensionnée $m^* = m/m = 1$.

Et l'énergie ? L'énergie potentielle fait apparaître une énergie caractéristique E_0 , qu'il serait tentant de prendre comme unité naturelle d'énergie.

→

Espace 15

Adimensionnaliser une équation ne peut se faire
qu'à partir de grandeurs caractéristiques dimensionnellement indépendantes,
c'est-à-dire s'exprimant différemment en termes des dimensions fondamentales
du système international :

L longueur	M masse	T temps
I intensité électrique	θ température	N quantité de matière
	J intensité lumineuse	

Tenant compte des grandeurs caractéristiques déjà identifiées, on peut ainsi *identifier* (mais pas définir !) une énergie caractéristique $\tilde{E}$:

Espace 16

→ les grandeurs caractéristiques ayant été « correctement » identifiées, l'énergie caractéristique que l'on peut construire est naturellement égale à E_0 , et elle correspond à l'énergie cinétique obtenue pour une vitesse adimensionnée $v^* = 1$.

Remarque : Les préfacteurs sont ici tous égaux à 1, mais il peut rester de façon plus générale un préfacteur numérique de l'ordre de 1 mais pas forcément égal. Cela aurait été le cas si le temps caractéristique avait été choisi égal à la période propre $T_0 = 2\pi/\omega_0$ au lieu de $1/\omega_0$.

Équation du mouvement adimensionnée : d'après le TEM,

$$\ddot{x} = \frac{F_x(x)}{m} = -\frac{2E_0}{ma} e^{-(x-\ell_0)/a} \left(1 - e^{-(x-\ell_0)/a}\right).$$

En explicitant la dérivée,

(M)
$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{a}{1/\omega_0^2} \frac{d^2x^*}{dt^{*2}} = \omega_0^2 a \frac{d^2x^*}{dt^{*2}}$$

ce qui conduit à

$$\frac{d^2x^*}{dt^{*2}} = - \underbrace{\frac{2E_0}{\omega_0^2 ma^2}}_{=1} e^{-x^*} (1 - e^{-x^*}) \quad \text{soit} \quad \boxed{\frac{d^2x^*}{dt^{*2}} = -e^{-x^*} (1 - e^{-x^*})}.$$

II.C.2 - Méthode d'Euler pour une équation différentielle d'ordre 2

À partir de maintenant, on ne note plus les grandeurs adimensionnées d'une étoile pour alléger les notations, et on note l'équation différentielle à résoudre

$$\ddot{x} = f(x) \quad \text{avec} \quad f(x) = -e^{-x}(1 - e^{-x}).$$

L'équation différentielle étant du second ordre, la méthode d'Euler ne permet pas de la résoudre directement. Il est donc nécessaire de « ruser » pour contourner la difficulté.

(R)



Pour résoudre par la méthode d'Euler une équation différentielle d'ordre 2,
on se ramène à un système différentiel du premier ordre
en introduisant une fonction inconnue v égale à la dérivée première.

On établit alors des relations de récurrence par application du schéma d'Euler explicite à ce système.

• Relations de récurrence

(M)

Système différentiel :

Relations de récurrence : en introduisant un pas de temps Δt et en posant $x_n = x(n \Delta t)$,

• Implémentation Python

Choix du pas de temps :



Espace 18

Choix de la condition initiale : Il est tout à fait possible d'étudier le mouvement à partir d'une position initiale $x^*(0)$ et d'une vitesse initiale $v^*(0)$ quelconques, mais la grandeur plus pertinente physiquement est l'énergie E communiquée à la particule. On suppose donc la particule lâchée du fond du puits de potentiel avec une énergie cinétique E^* , soit

$$x^*(0) = 0 \quad \text{et} \quad v^*(0) = \sqrt{E^*}.$$

En effet, l'énergie étant initialement uniquement cinétique, on a

$$E_m = E^* E_0 = \frac{1}{2} m (\omega_0 a v^*(0))^2 = \frac{1}{2} m \times \frac{2E_0}{ma^2} a^2 v^*(0)^2 \quad \text{donc} \quad v^*(0) = \sqrt{E^*}$$

Exemple de code :

```

1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt

4 ### Paramètres de la simulation :
5 dt = 0.001          # pas de temps adimensionné
6 t_max = 70          # durée de la simulation adimensionnée
7 N = int(t_max/dt)   # nombre de points de la simulation

9 ### Conditions initiales :
10 E = 0.8             # on fixe Em = Ec(0)
11 x0 = 0              # pas d'énergie potentielle (fond du puits)
12 v0 = np.sqrt(E)

14 ### Force adimensionnée dérivant du potentiel de Morse
15 def f(x):
16     return - np.exp(-x) * (1-np.exp(-x))

18 ### Initialisation des listes :
19 t = [n*dt for n in range(N)] # liste des temps
20 x = [None for n in range(N)] # liste des positions
21 v = [None for n in range(N)] # liste des vitesses

23 x[0] = x0
24 v[0] = v0

26 ### Relations de récurrence :
27 for n in range(N-1):
28     x[n+1] = x[n] + v[n]*dt
29     v[n+1] = v[n] + f(x[n])*dt

31 ### Tracés :
32 plt.figure()
33 plt.plot(t,x)
34 plt.xlabel('$t$ (adimensionné)')
35 plt.ylabel('$x$ (adimensionné)')
```



- **Analyse des résultats**

Les résultats sont représentés figure 5.

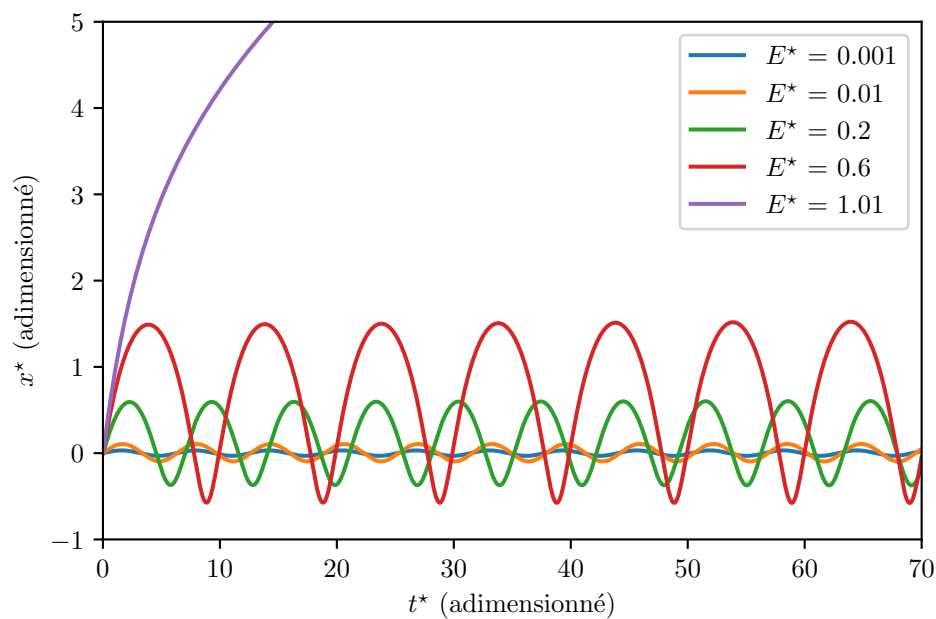


Figure 5 – Mouvement dans le potentiel de Morse. Ces courbes sont réalisées pour un pas de temps $\Delta t^* = 5 \cdot 10^{-4}$.

État lié ou état de diffusion ?



Espace 19

Oscillations de faible énergie = faible amplitude :



Espace 20

Oscillations de grande énergie = grande amplitude : on observe l'effet des non-linéarités.



Espace 21

II.C.3 - Utilisation d'un schéma numérique plus performant

• Limitation de la méthode d'Euler

Une limitation importante de la méthode d'Euler est qu'elle ne converge pas toujours, comme l'illustre la figure 6. Autrement dit, elle peut parfois amplifier progressivement les erreurs et conduire à des courbes divergentes alors même que la solution physique est bornée. La limitation est intrinsèque au schéma d'Euler : prendre un pas de temps plus court ne fait que retarder la divergence, mais ne peut pas l'annuler.



→ nécessité d'utiliser des schémas numériques plus élaborés grâce à la bibliothèque de calcul scientifique `scipy`.

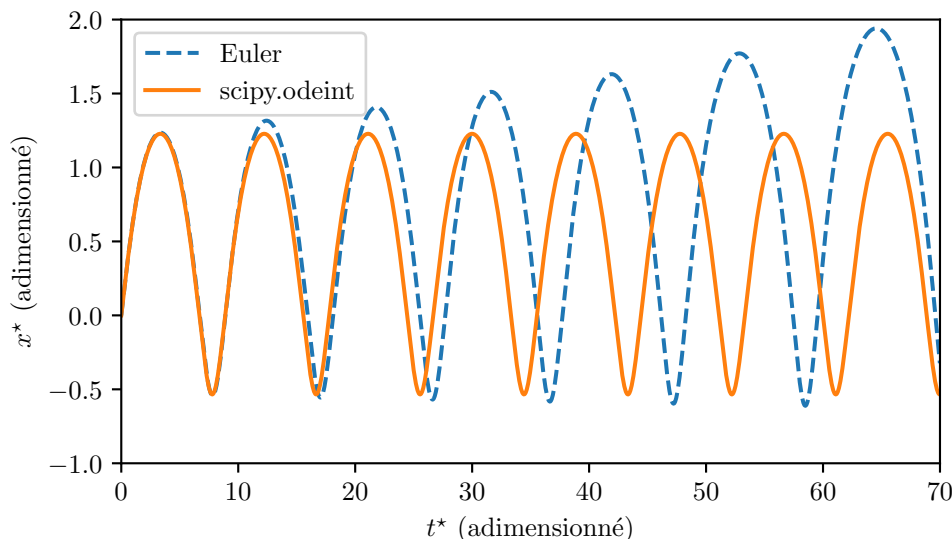


Figure 6 – Nécessité d'un schéma numérique plus évolué que celui d'Euler. Courbes réalisées pour $\Delta t^* = 0,01$.

• Utilisation de la fonction `odeint`

La fonction `odeint` du module `scipy.integrate` demande d'écrire l'équation différentielle ou le système différentiel à résoudre sous la forme

$$\frac{d\vec{y}}{dt} = F(\vec{y}, t)$$

où l'inconnue $\vec{y}$ est un vecteur à n dimensions, et la **fonction d'évolution** F à valeurs dans $\mathbb{R}^n$. Le cas $n = 1$ correspond bien sûr à une équation différentielle scalaire.

La fonction `odeint(F, y0, t)` :

- ▶ prend trois arguments obligatoires : la fonction d'évolution F , une condition initiale y_0 et une liste ou tableau numpy d'instant t ;
- ▶ renvoie le vecteur Y à tout instant contenu dans t sous forme d'un tableau numpy à $n + 1$ dimensions ;
- ▶ il existe des arguments facultatifs, se reporter à la documentation.

Dans notre cas : le système différentiel à résoudre s'écrit

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = v \\ \frac{dv}{dt} = f(x) \end{cases} \quad \text{donc} \quad \vec{y} = \begin{bmatrix} x \\ v \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad F(\vec{y}, t) = \begin{bmatrix} v \\ f(x) \end{bmatrix}.$$



ce qui donne le code Python ci-dessous.

```
1 from scipy.integrate import odeint
2 t = np.linspace(0, t_max, N) # liste des temps
3
4 def F(yt, t):
5     xt, vt = yt
6     return [vt, f(xt)]
7
8 y0 = [x0, v0] # à définir p.ex. [0, np.sqrt(E)]
9 y = odeint(F, y0, t)
10 x = y[:, 0]
```

