Nœuds électrostatiques \Box

Michel Salaün

UPRES EA n°2140, IAT-CNAM, 15 rue Marat, F-78210 Saint-Cyr l'Ecole

F. Dubois•

• Applications Scientifiques du Calcul Intensif, CNRS, Orsay

Nous nous intéressons au problème classique de la classification des noeuds. Il s'agit de définir les classes d'équivalence d'isotopie dans l'espace des lacets (voir par exemple Adams [1]). Nous nous proposons de tenter de caractériser une classe de noeuds par une "forme idéale", en suivant une démarche voisine de celle de Katrich $et\ al\ [2]$. Pour cela, nous nous plaçons dans un cadre discret. Par définition, un N-lacet de longueur L est la donnée de N points distincts de \mathbb{R}^3 , vérifiant une condition d'égalité de distance entre points consécutifs :

$$y \in Y_N^L = \{(x_0, x_1, ..., x_N) \in (\mathbb{R}^3)^{N+1}, x_0 = x_N, |x_{j+1} - x_j| = \frac{L}{N} \text{ pour } 0 \le j \le N - 1\}.$$

Pour trouver une forme qui soit la "plus tendue possible", nous supposons que chaque noeud porte une charge électrique identique, ce qui a pour effet que les points se repoussent. Nous introduisons alors l'énergie électrostatique $W_N^L(y)$ du lacet discret $y \in Y_N^L$ par la relation :

$$W_N^L(y) = \frac{L}{4\pi N^2} \sum_{1 \le i < j \le N} \frac{1}{|x_i - x_j|}.$$

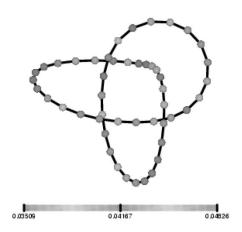
Nous faisons la conjecture suivante :

- (i) chaque classe d'équivalence de noeuds correspond à un minimum local de la fonctionnelle d'énergie électrostatique, et chaque point de minimum caractérise une "belle forme" du noeud correspondant;
- (ii) la façon dont le minimum local de l'énergie électrostatique tend vers l'infini, lorsque le nombre N de noeuds augmente, caractérise chaque classe d'équivalence.

Nous cherchons donc à mettre en évidence numériquement des minima locaux du problème suivant : $\inf_{y \in Y_N^L} W_N^L(y)$. Nous présentons les premiers résultats numériques, pour le cercle et le noeud de trèfle.

Mots clefs: Classification des noeuds - Optimisation sous contrainte.

Remerciements. Les auteurs remercient Jean-Louis Loday de les avoir motivés pour ce problème.



Nœud de trèfle discret.

Références

- [1] C.C. Adams, The knot book, Freeman, New York (1992).
- [2] V. Katritch, J. Bednar, D. Michoud, R.G. Scharein, J. Dubochet, A. Stasiak, Geometry and physics of knots, *Nature*, vol. 84 (Nov. 1996), pp. 142-145.

Note proposée pour le Congrès National d'Analyse Numérique 2000, édition 11 septembre 2005.