

Simulations numériques en temps long : des atomes aux étoiles

Gilles Vilmart



**UNIVERSITÉ
DE GENÈVE**

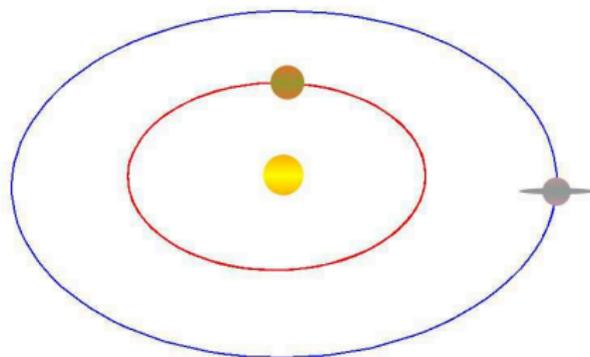
FACULTÉ DES SCIENCES
Section de mathématiques

Institut Henri Poincaré, 26 avril 2017

Un premier exemple

Le système solaire simplifié

Comment simuler les trajectoires des planètes du système solaire ?



Système Soleil-Jupiter-Saturne.

Le système Soleil-Jupiter-Saturne

	Masse	Position	Quantité de mouvement
Soleil	m_0	$q_0(t) \in \mathbb{R}^3$	$p_0(t) \in \mathbb{R}^3$
Jupiter	m_1	$q_1(t) \in \mathbb{R}^3$	$p_1(t) \in \mathbb{R}^3$
Saturne	m_2	$q_2(t) \in \mathbb{R}^3$	$p_2(t) \in \mathbb{R}^3$

G : Constante universelle de gravitation.

Les équations du mouvement sont données par la loi de gravitation universelle de Newton (1687).

$$m_i q'_i(t) = p_i(t) \quad (i = 0, 1, 2),$$
$$p'_i(t) = -G \sum_{0 \leq j \neq i \leq 2} m_i m_j \frac{q_i(t) - q_j(t)}{\|q_i(t) - q_j(t)\|^3}.$$

On obtient une équation différentielle de dimension 18.

Calculer des trajectoires du système solaire

Faisons un saut dans le temps : nous sommes le 1er janvier 1600, **Johannes Kepler** fuit Graz et s'installe à Prague pour devenir assistant de l'astronome **Tycho Brahe**.



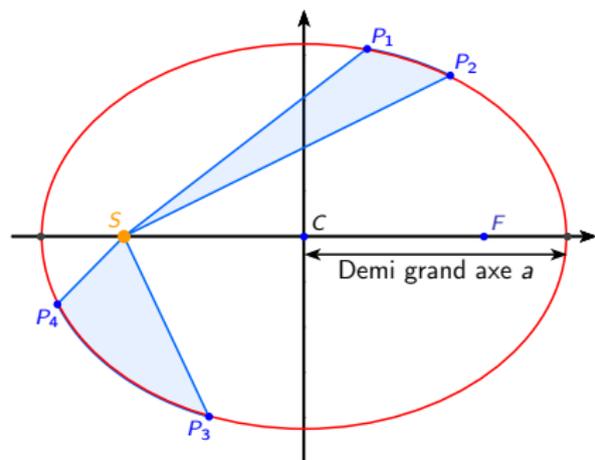
Johannes Kepler (1571–1630)



Tycho Brahe (1546–1601)

Mars : une planète qui ne tourne pas rond ?

Brahe demande à Kepler de prédire la trajectoire de Mars.
Mais la trajectoire de Mars est très “aplatie” (en fait **elliptique**!).
Il faudra six années à Kepler pour comprendre l'orbite de Mars.



Les trois lois de Kepler :

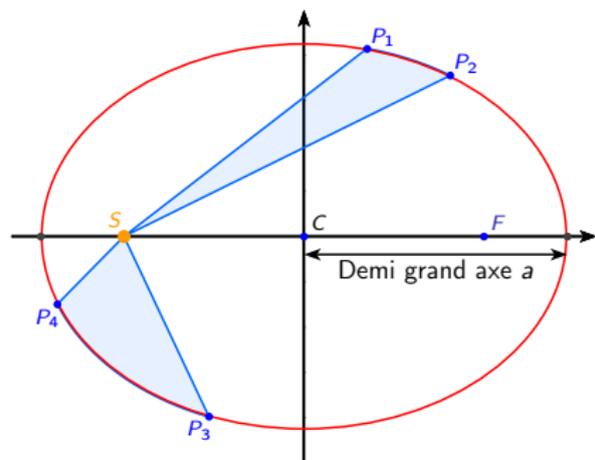
❶ Les trajectoires des planètes sont elliptiques.

❷ La loi des aires.

❸ $\frac{a^3}{T^2} = \text{constante}$, avec a demi-grand axe, T période.

Mars : une planète qui ne tourne pas rond ?

Brahe demande à Kepler de prédire la trajectoire de Mars.
Mais la trajectoire de Mars est très “aplatie” (en fait **elliptique**!).
Il faudra six années à Kepler pour comprendre l'orbite de Mars.



Les trois lois de Kepler :

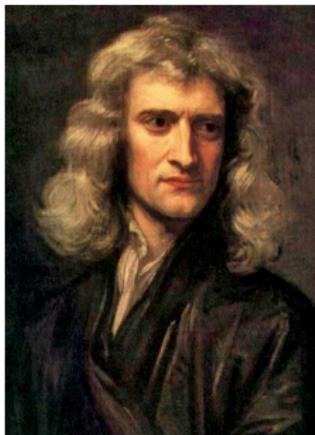
❶ Les trajectoires des planètes sont elliptiques.

❷ La loi des aires.

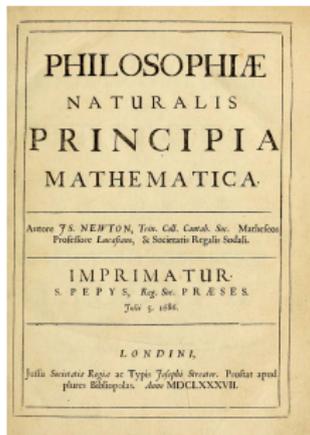
❸ $\frac{a^3}{T^2} = \text{constante}$, avec a demi-grand axe, T période.

La loi de gravitation universelle de Newton

En 1687, Isaac Newton, s'appuyant sur les trois lois de Kepler, énonce la loi de gravitation universelle.



Isaac Newton (1642–1727)



Les corps s'attirent mutuellement avec une force inversement proportionnelle à leur distance d au carré :

$$\vec{F}_{S \rightarrow P} = -\vec{F}_{P \rightarrow S} = -\frac{Gm_S m_P}{d^2} \vec{u}.$$

La preuve de la loi des aires par Newton

Une preuve historique de la loi des aires : $SAB = SBC = SCD = \dots$

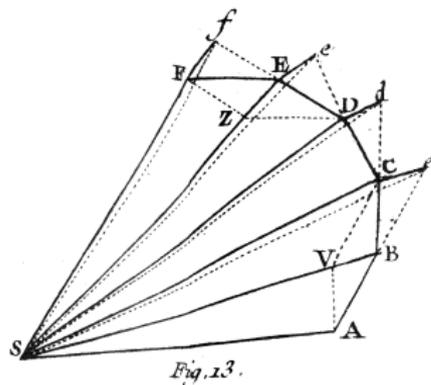
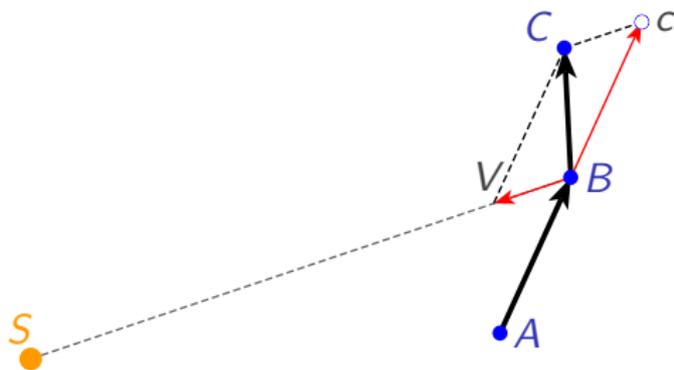


Figure des *Principia Mathematica* de Newton (1687)



La planète soumise à une "impulsion" de force.

"Preuve" : $VBcC$ est un parallélogramme, et $SAB = SBc = SBC$.

Le système Soleil-Jupiter-Saturne

	Masse	Position	Quantité de mouvement
Soleil	m_0	$q_0(t) \in \mathbb{R}^3$	$p_0(t) \in \mathbb{R}^3$
Jupiter	m_1	$q_1(t) \in \mathbb{R}^3$	$p_1(t) \in \mathbb{R}^3$
Saturne	m_2	$q_2(t) \in \mathbb{R}^3$	$p_2(t) \in \mathbb{R}^3$

G : Constante universelle de gravitation.

Les équations du mouvement sont données par la loi de gravitation universelle de Newton (1687).

$$m_i q'_i(t) = p_i(t) \quad (i = 0, 1, 2),$$
$$p'_i(t) = -G \sum_{0 \leq j \neq i \leq 2} m_i m_j \frac{q_i(t) - q_j(t)}{\|q_i(t) - q_j(t)\|^3}.$$

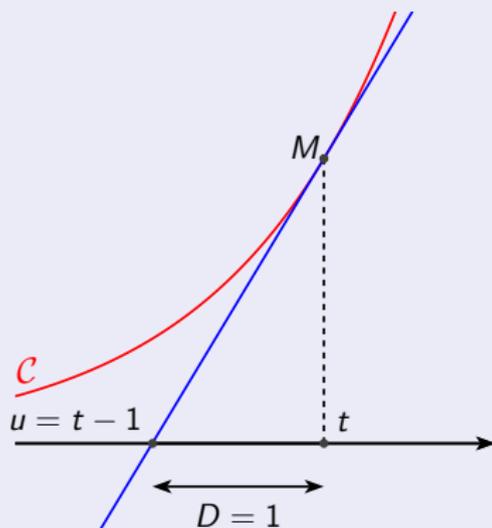
On obtient une équation différentielle de dimension 18.

Qu'est-ce qu'une équation différentielle ?

Équation différentielle

C'est une équation reliant une (ou plusieurs) fonction et ses dérivées.

Exemple : le problème de de Beaune (1638)



- Trouver une courbe dont la tangente coupe toujours l'axe horizontal à une distance $D = 1$ de la verticale de M .
- On obtient l'équation différentielle $y'(t) = y(t)$.
- La solution est $y(t) = \text{const } e^t$.

Méthodes numériques

La méthode la plus simple est la méthode d'Euler.



Portrait de Léonard Euler (1707–1783)

Billet de 10 francs suisses, en circulation de 1979 à 2000

Quelques apports d'Euler...



- hydrodynamique
- optique
- astronomie
- ...

La méthode d'Euler

On souhaite résoudre l'équation différentielle avec condition initiale

$$y'(t) = f(y(t)), \quad y(0) = y_0.$$

La méthode d'Euler

On souhaite résoudre l'équation différentielle avec condition initiale

$$y'(t) = f(y(t)), \quad y(0) = y_0.$$

Rappel : dérivée et taux d'accroissement

Par définition, la *dérivée* $y'(t)$ est la limite du taux d'accroissement

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{y(t+h) - y(t)}{h} = y'(t).$$

La méthode d'Euler

On souhaite résoudre l'équation différentielle avec condition initiale

$$y'(t) = f(y(t)), \quad y(0) = y_0.$$

Rappel : dérivée et taux d'accroissement

Par définition, la *dérivée* $y'(t)$ est la limite du taux d'accroissement

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{y(t+h) - y(t)}{h} = y'(t).$$

Idee : on approche la dérivée par le taux d'accroissement.

La méthode d'Euler

On souhaite résoudre l'équation différentielle avec condition initiale

$$y'(t) = f(y(t)), \quad y(0) = y_0.$$

Rappel : dérivée et taux d'accroissement

Par définition, la *dérivée* $y'(t)$ est la limite du taux d'accroissement

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{y(t+h) - y(t)}{h} = y'(t).$$

Idee : on approche la dérivée par le taux d'accroissement.

La méthode d'Euler explicite

On calcule les approximations $y_n \approx y(t_n)$ aux temps $t_n = nh$,

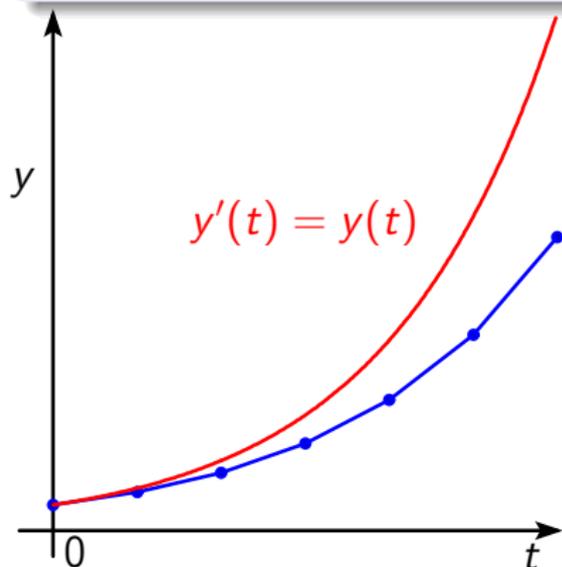
$$\frac{y_{n+1} - y_n}{h} = f(y_n) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

La méthode d'Euler

La méthode d'Euler explicite

On calcule les approximations $y_n \approx y(t_n)$ aux temps $t_n = nh$,

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{h} = f(y_n) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$



Exemple avec la fonction $f(y) = y$.

- Condition initiale $y_0 = 1$ fixée.
- $y_1 = y_0 + hf(y_0)$
- $y_2 = y_1 + hf(y_1)$
- $y_3 = y_2 + hf(y_2)$
- ...

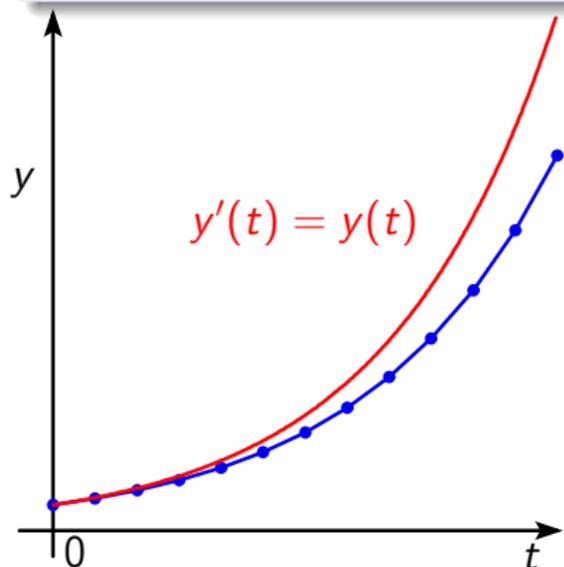
Longueur de pas : $h = 0.5$

La méthode d'Euler

La méthode d'Euler explicite

On calcule les approximations $y_n \approx y(t_n)$ aux temps $t_n = nh$,

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{h} = f(y_n) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$



Exemple avec la fonction $f(y) = y$.

- Condition initiale $y_0 = 1$ fixée.
- $y_1 = y_0 + hf(y_0)$
- $y_2 = y_1 + hf(y_1)$
- $y_3 = y_2 + hf(y_2)$
- ...

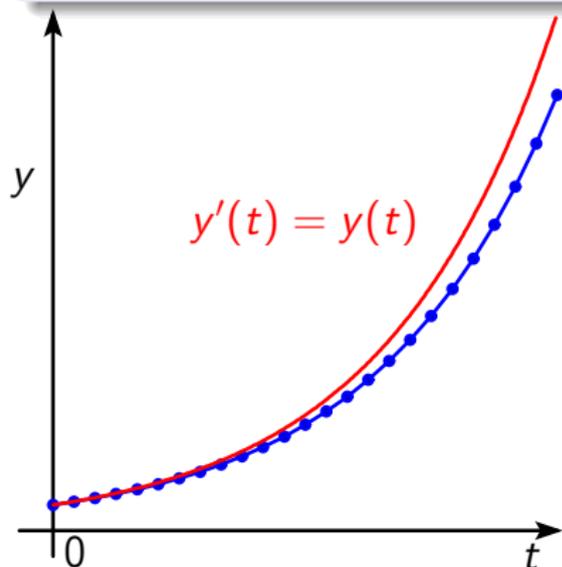
Longueur de pas : $h = 0.25$

La méthode d'Euler

La méthode d'Euler explicite

On calcule les approximations $y_n \approx y(t_n)$ aux temps $t_n = nh$,

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{h} = f(y_n) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$



Exemple avec la fonction $f(y) = y$.

- Condition initiale $y_0 = 1$ fixée.
- $y_1 = y_0 + hf(y_0)$
- $y_2 = y_1 + hf(y_1)$
- $y_3 = y_2 + hf(y_2)$
- ...

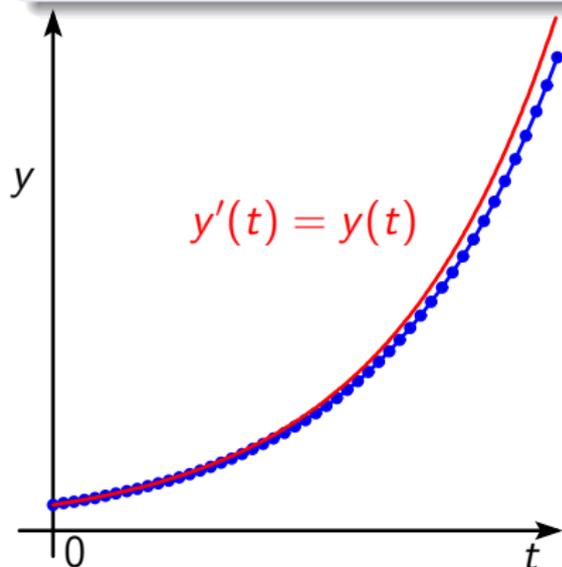
Longueur de pas : $h = 0.125$

La méthode d'Euler

La méthode d'Euler explicite

On calcule les approximations $y_n \approx y(t_n)$ aux temps $t_n = nh$,

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{h} = f(y_n) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$



Exemple avec la fonction $f(y) = y$.

- Condition initiale $y_0 = 1$ fixée.
- $y_1 = y_0 + hf(y_0)$
- $y_2 = y_1 + hf(y_1)$
- $y_3 = y_2 + hf(y_2)$
- ...

Longueur de pas : $h = 0.0625$

Méthodes d'Euler

On souhaite résoudre l'équation différentielle avec condition initiale

$$\begin{aligned}q'(t) &= f(p(t)), & q(0) &= q_0, \\p'(t) &= g(q(t)), & p(0) &= p_0.\end{aligned}$$

La méthode d'Euler explicite

On calcule les approximations $p_n \approx p(t_n)$, $q_n \approx q(t_n)$, $t_n = nh$,

$$\frac{q_{n+1} - q_n}{h} = f(p_n), \quad \frac{p_{n+1} - p_n}{h} = g(q_n).$$

Méthodes d'Euler

On souhaite résoudre l'équation différentielle avec condition initiale

$$\begin{aligned}q'(t) &= f(p(t)), & q(0) &= q_0, \\p'(t) &= g(q(t)), & p(0) &= p_0.\end{aligned}$$

La méthode d'Euler implicite

On calcule les approximations $p_n \approx p(t_n)$, $q_n \approx q(t_n)$, $t_n = nh$,

$$\frac{q_{n+1} - q_n}{h} = f(p_{n+1}), \quad \frac{p_{n+1} - p_n}{h} = g(q_{n+1}).$$

Méthodes d'Euler

On souhaite résoudre l'équation différentielle avec condition initiale

$$\begin{aligned}q'(t) &= f(p(t)), & q(0) &= q_0, \\p'(t) &= g(q(t)), & p(0) &= p_0.\end{aligned}$$

La méthode d'Euler symplectique

On calcule les approximations $p_n \approx p(t_n)$, $q_n \approx q(t_n)$, $t_n = nh$,

$$\frac{q_{n+1} - q_n}{h} = f(p_n), \quad \frac{p_{n+1} - p_n}{h} = g(q_{n+1}).$$

Méthodes d'Euler

On souhaite résoudre l'équation différentielle avec condition initiale

$$q'(t) = f(p(t)), \quad q(0) = q_0,$$

$$p'(t) = g(q(t)), \quad p(0) = p_0.$$

La méthode d'Euler symplectique

On calcule les approximations $p_n \approx p(t_n)$, $q_n \approx q(t_n)$, $t_n = nh$,

$$\frac{q_{n+1} - q_n}{h} = f(p_n), \quad \frac{p_{n+1} - p_n}{h} = g(q_{n+1}).$$

Conservation de l'énergie

La méthode symplectique conserve bien l'énergie (sans biais) sur des temps longs. (théorie de l'analyse rétrograde pour l'intégration géométrique, années 90).

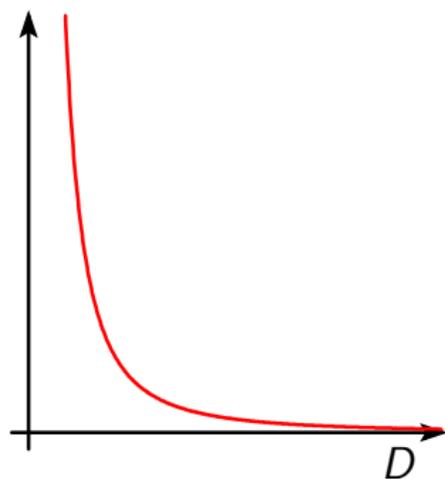
Attraction gravitationnelle

Rappel : force d'attraction gravitationnelle

La force d'attraction gravitationnelle entre deux corps est proportionnelle à

$$\frac{1}{D^2}$$

où D est la distance entre les corps.



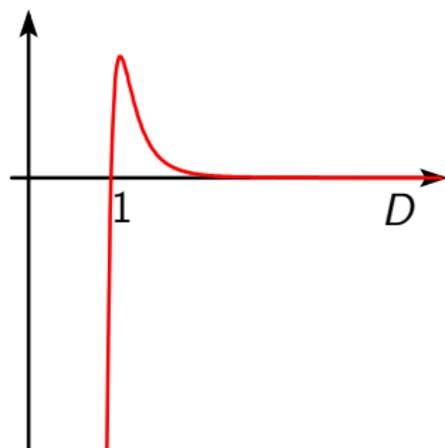
Cette force est toujours **attractive**.

Simulation de dynamique moléculaire

Force avec potentiel d'interaction de Lennard-Jones

La force d'attraction entre les molécules d'un gaz est proportionnelle

à $\underbrace{\frac{1}{D^7}}_{\text{attractif}} - \underbrace{\frac{1}{D^{13}}}_{\text{répulsif}}$ où D est la distance entre les molécules.



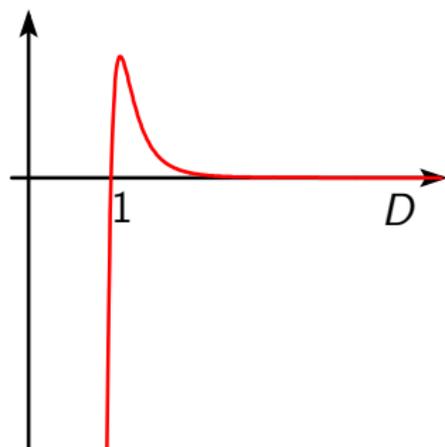
- Si $D = 1$, force nulle.
- Si $D > 1$, attraction.
- Si $D < 1$, répulsion.

Simulation de dynamique moléculaire

Force avec potentiel d'interaction de Lennard-Jones

La force d'attraction entre les molécules d'un gaz est proportionnelle

à $\underbrace{\frac{1}{D^7}}_{\text{attractif}} - \underbrace{\frac{1}{D^{13}}}_{\text{répulsif}}$ où D est la distance entre les molécules.



- Si $D = 1$, force nulle.
- Si $D > 1$, attraction.
- Si $D < 1$, répulsion.

Comparons à nouveau les différentes méthodes d'Euler.

Le mouvement brownien

- 1827, observations du naturaliste **Robert Brown** à l'intérieur des grains de pollen ;
- 1905, **Albert Einstein** donne une description quantitative du mouvement brownien pour confirmer indirectement l'existence des atomes et molécules ;
- 1909, **Jean Perrin** publie une valeur du nombre d'Avogadro ($\simeq 6.02 \cdot 10^{23}$), ce qui lui vaut un prix Nobel en 1926 ;
- 1923, **Norbert Wiener** donne une définition mathématique et définit l'intégrale par rapport au mouvement brownien ;
- 1948, **Paul Lévy** publie le premier grand ouvrage sur le mouvement brownien *Processus stochastiques et mouvement brownien*.

Exemple de modèle stochastique : l'éq. de Langevin

Modélise des particules soumises à un **potentiel** V , **une friction** et **une diffusion moléculaire** :

$$q'(t) = p(t), \quad p'(t) = -\nabla V(q(t)) - \gamma p(t) + \sqrt{2\gamma\beta^{-1}} W'(t).$$

$W(t)$: **mouvement brownien** \mathbb{R}^d , continu, incréments aléatoires,
 $W(t+h) - W(t) \sim \mathcal{N}(0, h)$, **presque sûrement dérivable nulle part.**

Intégrale d'Itô

Pour $f(t)$ un processus stochastique vérifiant certaines hypothèses,

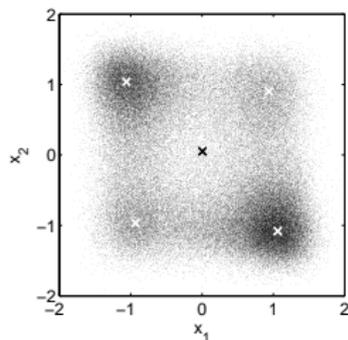
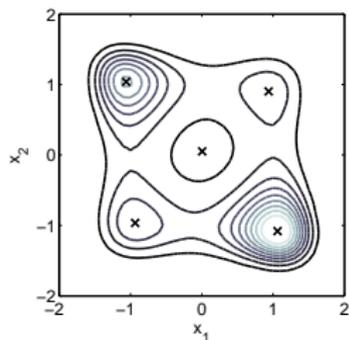
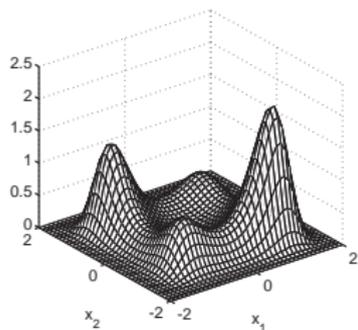
$$\int_0^{t=t_N} f(s) dW(s) = \lim_{h \rightarrow 0} \sum_{n=0}^{N-1} f(t_n) (W(t_{n+1}) - W(t_n)), \quad t_n = nh.$$

Comportement à long terme : ergodicité

Sous des hypothèses naturelles, le système possède une mesure invariante μ_∞ (mesure de Gibbs) avec densité $\rho_\infty(x) = Ce^{-V(x)}$,

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \phi(X(s)) ds = \int_{\mathbb{R}^d} \phi(y) d\mu_\infty(x), \quad p.s.$$

Exemple ($d = 2$) : $V(x) = (1 - x_1^2)^2 + (1 - x_2^2)^2 + \frac{x_1 x_2}{2} + \frac{x_2}{5}$.



Conclusion

- Une simulation numérique typique avec les ordinateurs actuels : $\simeq 10^3$ à 10^9 particules (très inférieur au nombre d'Avogadro 10^{23}).
- Les expériences numériques jouent un rôle central : elles remplacent des expériences coûteuses ou infaisables et peuvent inspirer de nouvelles théories.
- Les mathématiques appliquées/l'analyse numérique sont utiles pour choisir et développer des méthodes numériques efficaces.

Pour aller plus loin :

- S. Fiorelli Vilmart & G. V., *Les planètes tounent-elles rond ?*, Interstices (INRIA), 2013. interstices.info/planetes
- S. Fiorelli Vilmart & G. V., *Computing the long term evolution of the solar system with geometric numerical integrators*, [snapshots of modern mathematics from Oberwolfach](#), 2017, to appear.