Le langage APL au service de la physique Présenté à la réunion de l'AFAPL du 30 mai 2007

Claude Chachaty claude.chachaty@wanadoo.fr

INTRODUCTION

En 1978 Gérard Langlet a donné un cours d'initiation à APL dans le laboratoire de résonance magnétique du Département de Physico-Chimie du CEA Saclay dont j'avais la responsabilité. En dépit de sérieuses limitations techniques qui n'existent plus aujourd'hui, APL a été adopté pendant plus d'une décennie comme unique langage de programmation dans ce laboratoire.

Je pratique donc APL depuis une trentaine d'années, d'abord dans le cadre de mes activités au CEA où j'ai écrit un logiciel destiné à la résonance magnétique que je continue à développer [1] et pour d'autres sujets tels que les fractales [2] et la résolution numérique des équations différentielles [3] dont nous verrons quelques applications.

J'utilise parallèlement APL2 IBM et APL+WIN. Récemment j'ai converti plusieurs worskpaces en DYALOG APL. Ces trois logiciels ont à peu près les mêmes performances pour ce qui est de la vitesse de calcul. Le mieux adapté au calcul scientifique me semble être APL2 IBM qui comporte la workspace graphique GRAPHPAK convenant bien à cette application. De plus, APL2 IBM traite un nombre complexe comme un scalaire alors qu'en APL+WIN par exemple, il est considéré comme un vecteur à deux composantes.

L'inconvénient commun à APL2 IBM et DYALOG APL est la difficulté pour les non-initiés d'utiliser le clavier APL. APL+WIN présente aussi cet inconvénient, mais à un moindre degré puisqu'un bon nombre de caractères APL peuvent être composés sur le clavier ASCII. Il est donc recommandé aux personnes utilisant mes programmes sans connaître APL. Par ailleurs APL+WIN permet d'ouvrir une fenêtre DOS pour exécuter des programmes et recueillir les résultats en APL.

Il sera question ici des applications d'APL à la géométrie fractale, aux orbites planétaires ainsi que de l'optimisation de paramètres spectroscopiques.

FRACTALES

La plupart des objets fabriqués par l'homme relèvent de la géométrie Euclidienne alors que les objets naturels sont de nature fractale. En géométrie Euclidienne, pour représenter une courbe, une surface ou un volume à l'échelle R, on divise l'objet en N parties telles que N=1/R, $1/R^2$ ou $1/R^3$. En géométrie fractale $N=1/R^{Df}$. Df est la dimension fractale comprise entre 1 et 2 pour une courbe (ex. cours de la Bourse), entre 2 et 3 pour une surface (ex. massif montagneux) et entre 3 et 4 pour un volume (ex. nuages). On distingue deux sortes de fractales : les fractales aléatoires et les fractales à homothétie interne (voir par exemple [4]).

Fractales aléatoires

Dans un fractale aléatoire, la distribution de taille des objets qui le constitue est statistiquement la même à différentes échelles. C'est le cas par exemple des bulles d'une mousse liquide. Les objets à surface fractale ont un intérêt particulier en physico-chimie car le rapport surface/volume tend vers l'infini quand la dimension fractale tend vers 3. C'est une propriété importante pour les catalyseurs de réactions chimiques et pour les résines échangeuses car on dispose d'une surface d'échange considérable dans un volume réduit.

Par ailleurs, le relief des planètes rocheuses est fractal. La dimension fractale moyenne de la surface terrestre est par exemple 2.1 à 2.2.

Une surface fractale aléatoire peut être générée par une fonction telle que FRACT2D dont les éléments essentiels sont:

```
Dimensions en x et y du tableau: NP
Dimension fractale 2<DF<3: DF
p+1NP
RAU0+((p*2)°.+p*2)*<sup>2</sup>+0.5×DF
RAU1+(NP,NP)pgaussrand NP*2
phi+02×((p,RAU0)?ARAND)÷ARAND
```

TAB←90IFFT2D RAU0×RAU1×(NP,NP)p⁻120phi

DF est la dimension fractale, gaussrand, une fonction qui crée du bruit gaussien avec ARAND = 2^{31} -1. IFFT2D est la fonction de transformée de Fourier inverse sur deux dimensions dont on prend la partie réelle ou imaginaire (9 ou 11°IFFT2D). Enfin 12°phi correspond à exp(i×phi).



Figure 1. Surfaces fractales générées par FRACT2D. Les éléments aléatoires tels que RAU1 et phi sont les mêmes pour les deux parties de la figure qui ne diffèrent que par leur dimension fractale. Cette figure montre l'effet de cette dimension sur la rugosité d'une surface. On comprend également que l'érosion d'un massif montagneux entraîne la diminution de sa dimension fractale.



Figure 2. Topographie d'une planète fictive. Le relief tracé par MATHCAD est calculé par le programme APL EXOPLANETE comme la somme de quatre surfaces fractales dont l'une correspond à Df = 2.5 et les trois autres à Df = 2.1.

Fractales à homothétie interne

Dans le cas des fractales à homothétie interne, la forme d'un motif est reproduite exactement à différentes échelles. Il en existe de multiples exemples dans le monde végétal.

Il est remarquable que des fonctions itératives très simples comme par exemple FONCZ créent des formes extraordinairement compliquées. Cette fonction procède par les étapes suivantes :

-Calculer une fonction F(z) avec z = x+iy où x = y = iN

-Pour chaque valeurs de x et y, prendre X = Re F(z) et Y = Im F(z)-Itérer F(X+iY) jusqu'à ce X^2 +abs Y^2 = R, R étant une valeur choisie selon la forme de F(z)-En chaque point du tableau $\{x,y\}$, on porte le nombre d'itérations NIT nécessaire pour atteindre R.

-L'image fractale est généralement représentée par les courbes de niveaux de NIT(x,y).

```
FCNCZ;DIO;CH
 □IO+1◊CH+0
 'sin(z) [1], cos(z) [2], sinh(z) [5], cosh(z) [6]'
 'ou autre fonction de z [0]: ',F+6
 (F≠0)/'''Lambda (2 valeurs): '',LAM+1+<sup>-</sup>1100.2'
 'Xmin, Xmax, Ymin, Ymax: ',(Xmin Xmax Ymin Ymax)←1 1 1 1
 'Nombre de points en X et en Y:', (NPX NPY) +300
 'Nombremax d''iterations: ',NIT+100
 TABXY+Xmin,Xmin+((Xmax-Xmin) +NPX-1)×1NPX-1
 dim1+pTABXY+, TABXY•., Ymin, Ymin+((Ymax-Ymin) +NPY-1)×1NPY-1
 j+1¢nit+10
L1: (x \ y) \leftarrow \exists TABXY[j] \land n \leftarrow 0
L2:n \leftarrow n+1 \diamond z \leftarrow x+110y
 \pm (F\neq0) / 'Z\leftarrowLAM×Foz'\diamond\pm (F=0) / 'Z\leftarrow\pmFZ'
 x \leftarrow 90Z \diamond y \leftarrow 110Z \diamond R \leftarrow x \times x \diamond R \leftarrow R + y \times y
 \rightarrow ((n<NIT) \land 3000>R)/L2\diamonddim2\leftarrowpnit\leftarrownit, n\diamond \rightarrow (dim1\geqj\leftarrowj+1)/L1
 XY+(2pdim2*0.5)pnit
```

Les images fractales suivantes ont été calculées par FONCZ et tracées par MATHCAD.



Figure 3. $F(z) = (1+0.3i)\sin(z)$, 16000 points, x et y varient entre -1 et 1.



Figure 4. $F(z) = (1+0.4i)\cosh(z)$, mêmes conditions que pour la figure 3.



Figure 5. $F(z) = (1+0.3i)\cosh(z)$, mêmes conditions que figures 3 et 4.

ORBITES PLANETAIRES

Le système le plus simple de l'orbite d'un satellite autour d'un astre est décrit par les équations de Newton qui admettent une solution analytique. Pour une distance initiale donnée et selon la vitesse initiale du satellite, son l'orbite est une ellipse une parabole ou une hyperbole dont un foyer est l'astre attracteur.



Figure 6. Orbites d'un satellite calculées avec $M = 5.98 \times 10^{24} \text{ kG}$ (terre) pour les positions et vitesses initiales $x = 3.85 \times 10^8$ m (distance moyenne terre-lune), y = 0, u = 0 et plusieurs valeurs de v. $G = 6.673 \times 10^{-11} \text{ m}^3/\text{kG/s}^2$ est la constante de la gravitation.

Si le satellite est soumis à l'attraction de deux astres ou plus, on ne trouve pas de solution analytique aux équations de Newton et le résultat du calcul numérique est souvent imprévisible, même en utilisant un modèle simplifié tel qu'un satellite de masse négligeable soit dans le plan orbital des deux astres dont les orbites sont des cercles centrés autour de leur centre de gravité mutuel [5].

Dans ce cas particulier le calcul de la trajectoire du satellite est effectué par le programme A3CORPS qui résout numériquement un système de quatre équations différentielles par la méthode de Runge-Kutta. Le calcul est effectué en coordonnées réduites et l'échelle de temps est la période de rotation de l'axe x qui joint les deux astres.

```
A3CORPS, A, B, C, D, E, t, x, y, u, v, DIO, DPP
 DPP+40DIO+1
 'Masse réduite de l''astre II (m2≤m1): ',m2+0.1
 'Coordonnées réduites/barycentre dans le plan XY: '
 'Astre I: ',m2 00'Astre II: ',(m1+m2-1)0
 'Valeurs initiales réduites de x, y, u et v: ', (x0 y0 u0 v0)+0 -0.5 0.5 0
 'Nombre d''itérations: ',MAXIT+10000
 'Incrément de temps: ',dt+0.001
 DIM+pAE+FTV+, 'u' sysequa4 FAE+AE
 DIM+pAE+GTV+, 'v' sysequa40GAE+AE
 HTV+'x+(2×v) - (m1×(x-m2)×((y×2)+(x-m2)×2)×<sup>-</sup>1.5) '
 DIM+pAE+HTV+HTV, '+m2×(x+m1)×((y*2)+(x+m1)*2)* 1.5'
 sysequa40HAE+AE
 ITV+'y-(2×u)+(m1×y×((y*2)+(x-m2)*2)*~1.5)'
 DIM + pAE + ITV + ITV, '+m2×y×((y*2)+(x+m1)*2)* 1.5'
 sysequa40IAE+AE
 t+0oTps+X+Y+X1+Y1+XP+YP+U+V+1I+0
 (t x y u v)+0 x0 y0 u0 v0
L1:I+I+10A+t+0.5×dt
 K1+dt×±FTV&B+x+0.5×K1&M1+dt×±GTV&C+y+0.5×M1
 N1+dt× HTV D+u+0.5×N1 P1+dt× ITV E+v+0.5×P1
 K2+dt× #FAE M2+dt× #GAE N2+dt× #HAE
 P2+dt×+IAE
 B+x+0.5×K2◊C+y+0.5×M2◊D+u+0.5×N2◊E+v+0.5×P2
 K3+dt×±FAE0M3+dt×±GAE0N3+dt×±HAE0P3+dt×±IAE
 A+t+dtOB+x+K3OC+y+M3OD+u+N3OE+v+P3
 K4+dt× #FAE M4+dt× #GAE N4+dt× #HAE P4+dt× #IAE
 X \leftarrow X, x \leftarrow x + (K1 + (2 \times K2 + K3) + K4) \div 6 \diamond Y \leftarrow Y, y \leftarrow y + (M1 + (2 \times M2 + M3) + M4) \div 6
 U \neq U, u \neq u + (N1 + (2 \times N2 + N3) + N4) \div 6 \diamond V \neq V, v \neq v + (P1 + (2 \times P2 + P3) + P4) \div 6 \diamond t \neq A
 Tps+Tps,t0Y1+Y1,sinw+10W+02×t0X1+X1,cosw+20W
 XP+XP, (x×cosw) -y×sinw VP+YP, (x×sinw) +y×cosw
 →(I<MAXIT) †L1◊''
 'x = f(t), y = g(t) : tableau TXY 'OTXY+(Tps,[1.5]X),Yo''
 'XY: TRAJECTOIRE DANS REFERENTIEL TOURNANT PENDANT 10 PERIODES'
 PLOT XY+X, [1.5]Y
 'TRAJECTOIRE DANS REFERENTIEL FIXE'
 PLOT(-m1×X1, [1.5]Y1)AND(m2×X1, [1.5]Y1)AND XYP+XP, [1.5]YP
sysegua4
MSK+AE='t'OAE[MSK/1DIM]+'A'
MSK + AE='x ' AE [MSK / 1DIM] + 'B'
MSK + AE='y' AE [MSK / 1DIM] + 'C'
MSK+AE='u' AE [MSK/1DIM] +'D'
```



MSK+AE='v'OAE[MSK/1DIM]+'E'

Figure 7. Trajectoires d'un corps de masse négligeable dans le champ gravitationnel de deux astres de masses réduites 0.1 et 0.9 calculées par le programme A3CORPS pour dix périodes de rotation de l'axe joignant les deux astres. A : référentiel tournant, B : référentiel fixe.

Une série de programmes basés sur un algorithme de Chaitin [6] permet de traiter le problème à N corps dans toute sa généralité. Cet algorithme utilisé par exemple dans le programme NEWTON2 qui ne concerne que deux astres, peut être facilement étendu à des systèmes plus compliqués comme on le verra plus loin.

```
NEWTON2; DIO
 DIO+0 0N+20G+6.67E 110T+00DELT+36000t+0
 v+x+V+X+N 3p0♦M+6E24÷1 81
 X[1;0]+3846000000V[1;1]+10230step+10WT+M++/M
LOOP: F \leftarrow (1N) \circ . FORCEIN\diamond A \leftarrow \supset (+/F) \div M
 V+V+A×DELT X+X+V×DELT T+DELT t+t,T
 v \leftarrow v, [0] V \diamond x \leftarrow x, [0] X
 +(650≥step+step+1)/LOOP◊dim+1↑pXY+2 0↓0 1↓x
 XY1+(dimp1 0)/XY÷1000 xY2+(dimp0 1)/XY÷1000
 BARY+((1 0 1 0/XY1,XY2)+.×WT), [0.5](0 1 0 1/XY1,XY2)+.×WT
 xy1+XY1-BARY xy2+XY2-BARY
 'Trajectoires rapportées au barycentre : xy1, xy2'
 'xy1: 'OPLOT xy10'xy2: 'OPLOT xy2
 PLOT xy1 AND xy2
AN:NOMBRE D'ASTRESOM:MASSES
AX: COORDONNEES, V: VITESSES
AF: FORCE, A: ACCELERATION
ADELT: INCREMENT DE TEMPS
F+i FORCE i
```

 $F \leftarrow 3\rho 0 \diamond \rightarrow (i=j)/0 \diamond DELX \leftarrow X[j;] - X[i;] \diamond R \leftarrow (+/DELX + 2) + 0.5$ $F \leftarrow (G \times M[i] \times M[j] + R + 2) \times (DELX + R)$

Exemple de système à trois corps : le système soleil, terre, lune.



Figure 8. Orbite de la lune autour de la terre. En rouge : orbite non perturbée, en bleu : orbite perturbée par le soleil. A : pendant 1 période lunaire (27.3 jours), B : pendant 1 an.

Exemple de système à cinq corps : soleil, jupiter, saturne, uranus et neptune.



Figure 9. Orbites des planètes géantes calculées par le programme NEWTON5 en tenant compte de toutes les interactions gravitationnelles. UA : unité astronomique, distance moyenne de la terre au soleil soit 1.5×10^8 km.



Figure 10. Déplacement radial du soleil (selon Y) sous l'influence des 4 planètes géantes pendant une période de révolution de neptune autour du soleil (164.65 ans). L'influence des planètes telluriques est négligeable. La mesure d'un tel déplacement a permis la première détection d'une planète extra-solaire en 1995 par Mayor et Queloz de l'Observatoire de Genève. Les raies spectrales de l'étoile se déplacent vers les petites ou grandes longueurs d'onde selon qu'elle se rapproche ou s'éloigne de l'observateur (effet Doppler).



Figure 11. Orbites de jupiter et d'uranus perturbées (bleu) et non perturbées (rouge) par les autres planètes. Pour jupiter, beaucoup plus proche du soleil qu'uranus, la différence entre les deux types d'orbites est imperceptible sur cette figure. Neptune se comporte à peu près comme uranus. Dans le cas de saturne, la perturbation est visible mais moins nette que pour ces deux planètes.

En 1846 Le Verrier et Adams annoncèrent parallèlement que les perturbations observées dans l'orbite d'Uranus étaient dues à une planète inconnue jusqu'alors, neptune, qui fut observée par Galle la même année. Pour évaluer ces perturbations on calcule l'orbite d'uranus par le programme NEWTON5 mentionné plus haut, avec et sans neptune.



Figure 12. Influence de neptune sur le mouvement orbital d'uranus (écart entre l'orbite perturbée et non perturbée) durant une révolution de neptune autour du soleil. La perturbation moyenne sur cette période est de 0.0385 UA.

OPTIMISATION DE PARAMETRES

Pour extraire les valeurs des paramètres d'une courbe expérimentale Y=F(x, P) on ajuste par les moindres carrés à cette courbe, une courbe calculée Z=G(x,p) simulant la courbe Y sur la base d'une théorie appropriée et avec des paramètres initiaux vraisemblables.

Les vecteurs \mathbf{p} et \mathbf{P} sont respectivement les valeurs approximatives et les valeurs expérimentales des paramètres. Pour obtenir les valeurs de \mathbf{P} recherchées, il est commode de multiplier \mathbf{p} par un vecteur \mathbf{B} dont les composantes initiales $\mathbf{B1}$ sont égales à 1.

L'optimisation de **B** est effectuée par la fonction $B \leftarrow Y$ MARQ B1 qui minimise $(Y-Z \leftarrow G B)*2$. La fonction MARQ est une version améliorée par M.A. Jenkins, de l'algorithme de Levenberg-Marquardt [7]. Elle a le mérite d'être assez peu sensible au choix des paramètres initiaux du moment que leurs ordres de grandeur sont respectés.

```
B ← Y MARO B1; DIO; A; I; j; M; N; F; F1; SS; S1; LAM; DIR; FAST; DB; CSUMS; DS; R
 □IO+1◊DIAG+' '◊GLOBVARS
MMARQUARDT ALGORITHM WITH ESTIMATED DERIVATIVES BASED ON PAPER BY
AKEN BROWN. LES VARIABLES GLOBALES CONTENUES DANS GLOBVARS
ACONTROLENT LE COMPORTEMENT DE L'ALGORITHME
 M \leftarrow \rho Y \diamond N \leftarrow \rho B \leftarrow B + \beta A \leftarrow ((M+N), N) \rho 0 \diamond LAM \leftarrow LAMBDA \diamond SS1 \leftarrow SS \leftarrow + / (R \leftarrow Y - F \leftarrow FUNC B) * 2
  j+DIR+0
NEXT: → (iTCNT<j+j)/FAILURE (i+1+000 MESTIMATE THE DERIVATIVES :
LOOP: \rightarrow (0=I \leftarrow I-1)/L1 \diamond A[\iota M; I] \leftarrow ((FUNC B+(eTA \times 1[|B) \times I=\iota N) - F) \div eTA \times 1[|B[I])
 →LOOP
L1: FAST \leftarrow 1 \diamond CSUMS \leftarrow + \neq [A[1N;]
ASOLVE LINEAR LS SYSTEM, INCREASING LAM UNTIL SS DECREASES
SOLVE: → (lAMCEIL<LAM←ePS[LAM÷fACTOR*DIR)/FAILURE
 A[M+iN;] \leftarrow ((N,N)\rho(1[CSUMS) \times LAM \times 0.5) \times (iN) \circ .= iN \diamond DB \leftarrow ((F-Y), N\rho 0) \exists A
 S1 \leftarrow +/(R \leftarrow Y - F1 \leftarrow FUNC B - DB) \times 20 \rightarrow ((ePS \times S1) < DS \leftarrow SS - S1)/TESTCONV
ASET PARAMETERS TO INCREASE LAM
 DIR← 1 ◊ FAST+0 ◊ ± (SS1>S1) / ' → FAILURE, B+B-DB' ◊ SS1+S1 ◊ → SOLVE
TESTCONV: \rightarrow (\land / (|DB) \le (ePS \div 1 + LAM) \times |B) / 0 \diamond B \leftarrow B - DB \diamond SS \leftarrow SS1 \leftarrow S1 \diamond F \leftarrow F1
 DIR←FAST♦→NEXT
FAILURE:DIAG←'IL N''Y A PAS CONVERGENCE'
```

Application.

Dans les membranes biologiques, le cholestérol ne se répartit pas d'une manière homogène. Pour connaître la proportion des domaines enrichis ou appauvris en cholestérol ainsi que certaines de leurs propriétés physiques telles que l'ordre moléculaire et la fluidité, l'une des méthodes que l'on utilise est la résonance paramagnétique électronique (RPE).



Figure 13. Représentation schématique des doubles couches d'une membrane de phospholipides dans laquelle on insère une sonde d'acide stéarique marqué par un groupe radicalaire • dont on enregistre le spectre RPE. Selon la position de ce groupe, on peut tester certaines propriétés des doubles couches (polarité, ordre moléculaire, fluidité) pour différentes profondeurs d'immersion de la sonde. La partie inférieure de cette figure est une représentation plus réaliste d'une telle membrane avec des inclusions de protéines.

Les membranes sont des cristaux liquides lamellaires dans lesquelles les molécules tendent à s'orienter autour d'une direction privilégiée, le directeur, perpendiculaire à la surface d'une double couche. Pour un cristal liquide lamellaire, l'amplitude de libration des molécules autour du directeur est caractérisée par un paramètre d'ordre S compris entre 0 et 1. Ces deux limites correspondent respectivement à l'état liquide isotrope (liquide ordinaire) et à l'état solide.



Figure 14. Spectre RPE d'une sonde radicalaire dans une membrane contenant du cholestérol. La dérivée d'absorption du rayonnement micro-onde est tracée en fonction du champ magnétique appliqué. Le diagramme inférieur comporte le spectre expérimental, le spectre simulé après optimisation des paramètres et leur différence. Le diagramme supérieur indique que le spectre simulé est la somme de deux spectres correspondant respectivement aux domaines enrichis en cholestérol, les mieux ordonnés (site A, 38%, S = 0.279) et aux domaines désordonnés (site B, 62%, S = 0.141) dépourvus de cholestérol. Le principe de ces simulations est exposé dans la réf. [1].

REFERENCES

1a - C. Chachaty, APL, a Powerful Research Tool in Magnetic Resonance Spectroscopy.

APL Quote Quad, 34 (4), 69 (2002). APL2002, Madrid 22-25 Juillet 2002.

1b – C. Chachaty, Analysis and Simulation of Electron Spin Resonance Spectra of Randomly Oriented Paramagnetic Species. Site <u>www.esr-spectsim-softw.fr</u>

2 - C. Chachaty, Images de fractales avec APL2 IBM pour Windows. Les Nouvelles d'APL, **31**, 29 (1999).

3 - C. Chachaty, Quelques fonctions APL simples pour la résolution numérique des équations et systèmes différentiels. Les Nouvelles d'APL, **27**, 61 (1998).

4 - R.F. Voss, Fractals in nature: from characterization to simulation. Dans "The Science of Fractal Images", H.O.Peitgen, D. Saupe éditeurs, Springer-Verlag, Berlin 1988, ISBN 3-540-96608-0.

5 - P. Hellings, "Astrophysics with a PC: an introduction to computational

astrophysics",1994, William Bell, Richmond (USA), ISBN 943396-43-3.

6 - G.J. Chaitin, An APL2 Gallery of Mathematical Physics- A Course Outline. Proceedings Japan 85 APL Symposium, N:GE18-9948-0, IBM Japan, pp1-56.

7 - D.W. Marquardt, J. Soc. Ind. Appl. Math. 11, 431 (1963).