

Comprendre l'expérimentation virtuelle jusqu'à ses limites

Jean-François Colonna^(*)

Résumé : après avoir rappelé en quoi consiste l'expérimentation dite *réelle*, ce texte définit l'expérimentation virtuelle, nouvelle approche de la connaissance scientifique. Ses avantages sont décrits et illustrés à l'aide de quelques exemples empruntés, en particulier, à la mécanique quantique, à la géométrie fractale et à la mécanique céleste. Ses dangers, liés principalement à la programmation, aux erreurs d'arrondi et aux modes de représentation, sont exposés en détail.

1. L'expérimentation réelle

Lever et coucher du soleil ou encore chute inexorable des pommes : depuis la nuit des temps, l'homme observe les régularités et les symétries de son univers. Le sens de la vision, certainement à l'origine de la curiosité scientifique, joue ici un rôle essentiel grâce d'une part à sa « portée infinie » (que serait d'ailleurs notre science si nous n'étions dotés que de l'ouïe et du toucher ?) et, d'autre part, à ses performances exceptionnelles dans le domaine de la reconnaissance des formes dans un environnement quelconque, changeant et bruité. Pour décrire, structurer et transmettre ces régularités et ces symétries, en particulier dans le domaine de la physique, c'est le **langage des mathématiques** qui est utilisé et, aujourd'hui, toutes les grandes lois de la nature sont exprimées sous la forme d'équations qui n'ont bien souvent pas d'équivalents dans nos langues naturelles. Bien que d'une redoutable efficacité, nos mathématiques ne sont probablement que le reflet de nos structures cognitives et non point l'ultime réalité platonicienne.

Mais les équations ainsi obtenues ne font pas qu'enranger des connaissances ; elles permettent aussi d'en produire de nouvelles. Donnons quelques exemples historiques :

- En 1846, Urbain Le Verrier découvre, à partir des équations de la mécanique newtonienne, la planète Neptune. Les instruments de mesure progressant, eux-aussi, de petites différences étaient apparues entre les observations astronomiques et les calculs. Plutôt que de vouloir remplacer une mécanique qui donnait malgré tout d'aussi bons résultats, Urbain Le Verrier imagina que notre connaissance du système solaire était alors incomplète et calcula les caractéristiques d'une certaine planète manquante qui fut ensuite effectivement observée. Malheureusement une telle démarche ne suffit pas à expliquer ultérieurement les anomalies concernant Mercure et seule une révolution en eut raison...

(*) France Télécom R&D/DTL/DLI/france Télécom. CMAP/Ecole Polytechnique. 91128 Palaiseau Cedex

- En 1915, Albert Einstein, utilisant sa théorie de la relativité générale, prévoit la déviation des rayons lumineux par la matière et c'est en 1919, au cours d'une éclipse restée fameuse, que Sir Arthur Stanley Eddington vérifia, par la mesure, les prévisions d'Albert Einstein, ce qui lui valut alors une célébrité planétaire. Grâce à sa théorie, par la suite, furent imaginés les trous noirs ou encore une origine possible de notre espace et de notre temps : le *Big Bang* que des expériences actuelles semblent confirmer.
- En 1930, Paul Dirac annonce l'existence de l'anti-électron grâce à la mécanique quantique. Plus tard, faisant suite au fameux paradoxe EPR (Einstein, Podolsky et Rosen), il y eut le théorème de Bell et les expériences d'Alain Aspect à l'Institut d'Optique d'Orsay et l'humanité découvrait le caractère *non séparable* de la réalité...

Ces quelques exemples illustrent bien le « miracle » des mathématiques qui ont ainsi le pouvoir de nous entraîner bien au-delà de nos sens et de notre intuition... Mais bien évidemment, ses prédictions n'ont de sens que si elles sont ensuite confrontées à l'expérience, une théorie scientifique se devant d'être, par essence, **réfutable**.

Ainsi le chercheur observe, modélise et expérimente.

Des modèles mathématiques vont donc décrire le comportement des systèmes que les chercheurs et les ingénieurs étudient (par la suite, nous n'examinerons pas le cas de la recherche industrielle ; mais, en fait, tout ce qui sera dit concernant la recherche fondamentale pourra être transposé, sans difficulté, aux domaines plus appliqués). Pour un système donné, le modèle qui est censé le décrire contient des équations reliant entre elles les différentes grandeurs caractéristiques (par exemple des coordonnées), des conditions initiales (donnant certaines valeurs à l'instant 0) et enfin des conditions aux limites (précisant, par exemple, ce qui se passe aux frontières du domaine à l'intérieur duquel se fait l'étude). Ainsi qu'il est facile de l'imaginer, ils sont en général d'une très grande complexité ; leur étude pourra donc présenter des difficultés tant théoriques que techniques, parfois insurmontables, dont l'annexe 1 donne un aperçu. Que faire ? Sommes-nous alors dans une impasse ?

2. Définition de l'expérimentation virtuelle

Sans remonter jusqu'aux automates de Vaucanson ou encore au métier à tisser de Jacquard, c'est au milieu du dix-neuvième siècle que Charles Babbage, aidé de sa collaboratrice Lady Ada Lovelace (fille de Lord Byron et premier programmeur de l'histoire de l'humanité), imagina une machine numérique programmable. Malheureusement, il n'avait à sa disposition que des systèmes mécaniques. Il faudra attendre la seconde guerre mondiale et le travail de John Von Neumann, Alan Turing et beaucoup d'autres, pour voir se développer les premiers ordinateurs électroniques, grâce auxquels, aujourd'hui, nous sommes capables de calculer tout et parfois n'importe quoi, comme nous le verrons par la suite.

Dès l'origine, John Von Neumann avait imaginé la possibilité de faire des expériences numériques grâce aux ordinateurs. Mais les machines des années quarante n'avaient ni les performances, ni l'ergonomie des machines d'aujourd'hui.

À titre d'exemple, l'ordinateur de la figure 1, qui fut le premier dont l'auteur a pu disposer à titre professionnel en 1972, disposait, à l'intérieur de ses armoires de six mètres cubes, d'une « phénoménale » mémoire centrale de 32 kilooctets et de trois disques durs de chacun un demi méga-octet ! Aujourd'hui (au mois de novembre 2002), les ordinateurs portables les plus performants disposent d'horloges de deux gigahertz, intègrent des mémoires centrales d'un



Figure 1

giga-octet (Go) et des disques de plusieurs dizaines de Go. Il semble que cette course aux performances soit faite pour se poursuivre dans les années à venir. Évidemment, la technologie actuelle possède des limites, mais celles-ci sont relativement éloignées (et d'ailleurs l'histoire montre qu'elles sont fréquemment repoussées...). Et au-delà, les recherches les plus avancées nous annoncent l'*ordinateur quantique*, mais pourrait-il être construit au-delà de quelques prototypes de laboratoire capables actuellement de factoriser de petits nombres à deux chiffres (il convient de rappeler que l'un des attraits de ces machines, reposant sur le principe de superposition linéaire cher à la mécanique quantique, est d'offrir, par rapport aux machines « classiques », la possibilité de factoriser beaucoup plus rapidement les nombres entiers – algorithme de Schorr –, avec des conséquences évidentes en ce qui concerne de nombreuses méthodes de chiffrement...).

Une *expérience virtuelle* sera une expérience effectuée non pas sur un système « réel », mais bien plutôt sur son modèle mathématique traduit en un ou plusieurs programmes exécutés dans la mémoire d'ordinateurs (le mot *virtuel* ayant été choisi en tant que l'un des antonymes de *réel*).

Des méthodes dites *numériques* seront en général nécessaires afin de connaître la solution des équations, non point sous la forme générale de formules inexistantes ou inaccessibles, mais sous celle particulière de valeurs numériques. Cette situation ne doit d'ailleurs pas nous choquer. N'oublions pas que l'acte fondamental du scientifique est la **mesure** : la réalité ne se manifeste à lui, au cours des expériences, que par l'intermédiaire de nombres (des coordonnées, des vitesses, des températures, ...); il n'a jamais accès aux formules du « *Vieux* » (pour paraphraser Albert Einstein...).

Que faire alors des résultats obtenus ?

Dans le cas du problème des N-corps (revoir l'annexe 1), la situation n'est pas dramatique, puisque le nombre de valeurs obtenues n'excède pas quelques dizaines de milliers. Malgré cela, la contemplation de celles-ci ne révélerait pas aisément ce qui, en fait, saute immédiatement aux yeux lorsqu'elles sont mises en images d'une

façon tout à fait naturelle (c'est-à-dire telle que les corps étudiés seraient perçus dans l'espace physique). Par exemple, la figure 2 montre instantanément et sans effort de réflexion, des trajectoires de ce problème à quatre corps utilisant les conditions initiales suivantes (données en unités MKSA et visualisées en bas et à gauche de cette matrice de 16 images) :

$$C_1 = \{0,0,0\}, V_1 = \{0,0,0\}, M_1 = 1030,$$

$$C_2 = \{26.1010,0,0\}, V_2 = \{0,-133.102,0\}, M_2 = 1028,$$

$$C_3 = \{-8.1011,0,0\}, V_3 = \{0,5.103,0\}, M_3 = 2.1027,$$

$$C_4 = \{-8.1011,5.1010,0\}, V_4 = \{-960,5.103,0\}, M_4 = 735.1020$$

(où C_k , V_k et M_k représentent respectivement les coordonnées, la vitesse et la masse du corps numéro k).

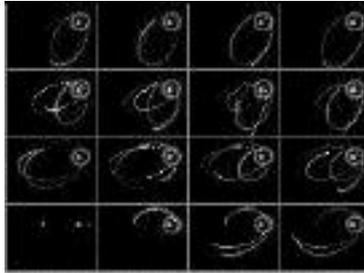


Figure 2

Les trajectoires ne sont pas des ellipses et, même, ne sont pas périodiques. Il est alors évident que, dans des situations fréquentes où le volume des résultats s'exprime en milliards de nombres (ou davantage encore), le recours à l'image de synthèse est incontournable. De plus, ainsi que cela fut rappelé précédemment, l'acte de mesure est fondamental ; les expériences qui sont actuellement menées, par exemple, avec les accélérateurs de particules ou les télescopes, donnent, elles aussi, des « montagnes » de résultats numériques. L'image de synthèse est donc tout aussi utile dans ce contexte. Il n'est certainement pas exagéré de dire qu'elle est aux expériences d'aujourd'hui ce que l'aiguille des appareils de mesures était aux expériences d'hier.

3. Quelques exemples d'expériences virtuelles

3.1. La mécanique quantique

L'expérimentation virtuelle va nous permettre de manipuler et de voir des objets autrement inaccessibles. Voici quelques exemples allant de la théorie des supercordes à l'atome d'hydrogène :

- Figure 3 : *représentation tridimensionnelle d'une variété quadridimensionnelle de Calabi-Yau*. La théorie des supercordes est actuellement la solution la plus prometteuse en ce qui concerne l'unification de la mécanique quantique (les interactions fortes et électrofaibles) et de la relativité générale (interaction gravitationnelle). Elle demande pour cela sept dimensions supplémentaires « à côté » des quatre dimensions (3 d'espace et une de temps) que nous percevons. Ces sept dimensions, auxquelles nous ne sommes pas sensibles, seraient organisées selon des variétés de Calabi-Yau, dont la « forme » et la topologie conditionneraient notre physique

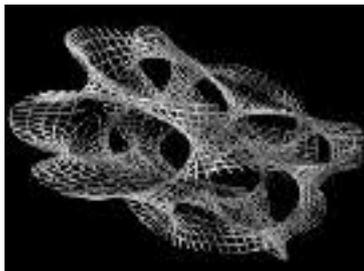


Figure 3

(nombre de familles de particules élémentaires – 3 – et leurs propriétés, en particulier).

- Figure 4 : *structure en quarks et gluons du nucléon*. Le nucléon (proton ou neutron) n'est pas une particule élémentaire. Il est constitué de trois quarks dits *de valence* (*de saveur* UUD et UDD pour le proton et le neutron respectivement) et d'une mer de particules virtuelles (quarks et gluons) en interaction. Interrogeons-nous, dès à présent, sur la signification des formes et des couleurs utilisées dans cette image : quel sens ont-elles à cette échelle (1.0 E-15 mètre) ?

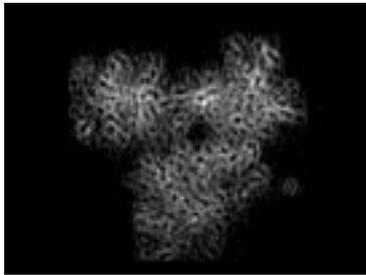


Figure 4

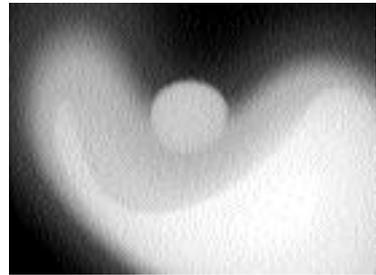


Figure 5

- Figure 5 : *visualisation tridimensionnelle de la superposition linéaire de 6 états propres de l'atome d'hydrogène (calcul tridimensionnel)*. L'hydrogène, le plus simple des atomes, bien qu'il soit parfaitement connu dans le cadre de la mécanique quantique, peut encore nous révéler bien des choses. Cette image est extraite d'une séquence représentant l'évolution au cours du temps, dans certaines conditions qu'il n'est pas utile de préciser ici, de la densité de probabilité de présence de l'électron dans l'espace physique. Celle-ci est codée à l'aide de la luminance de chacun des points de l'image : plus un point est lumineux, plus l'électron a de chances de se trouver sur la ligne de visée joignant l'œil de l'observateur à ce point. Cette animation a une vocation pédagogique et fut réalisée en collaboration avec Jean-Louis Basdevant pour le cours de mécanique quantique qu'il enseigne à l'École Polytechnique.

Ces quelques images ne peuvent pas ne pas nous intriguer ; en effet, les « objets » ici représentés relèvent de la mécanique quantique, laquelle nous interdit, par exemple, de connaître simultanément avec une infinie précision la position et la vitesse d'une particule, ce qu'elles semblent montrer malgré tout. De plus, quelles significations ont les formes et les couleurs utilisées, alors que ces notions n'ont aucun sens à cette échelle ? Nous reviendrons ultérieurement sur ces problèmes...

3.2. La géométrie fractale

L'expérimentation virtuelle va aussi nous permettre de reproduire des fragments de réalité « intuitive ».

Les premières courbes continues non différentiables apparurent à la fin du dix-neuvième siècle, nées de l'imagination de Weierstrass – peut-être le pionnier –, Cantor, Peano, Lebesgue, Hausdorff, Besicovitch, von Koch, Sierpinski, ... Mais il

fallut attendre la fin des années soixante pour que Benoit Mandelbrot réveille ces « monstres » assoupis et en montre l'utilité.

3.2.1. La géométrie fractale déterministe

Pour ces objets, le hasard n'intervient pas.

- Figure 6 : les trois premières itérations de la construction de la courbe de von Koch. Il s'agit là du plus simple des objets fractals. Malgré cela, il en possède toutes les propriétés : d'une part l'*autosimilarité* (l'objet est invariant par homothétie) et d'autre part le fini et l'infini s'y côtoient (bien que cette courbe réside dans un domaine fini, à chaque itération, sa longueur est multipliée par $4/3$ et tend donc vers

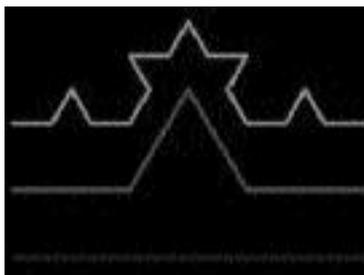


Figure 6

l'infini ; par exemple, partant d'un segment d'un mètre de long, au bout de 90 itérations, la longueur est supérieure à la distance de la Terre au Soleil !).

- Figure 7 : le long de la frontière de l'ensemble de Mandelbrot. L'ensemble de Mandelbrot et les ensembles de Julia sont ici définis dans le plan complexe.

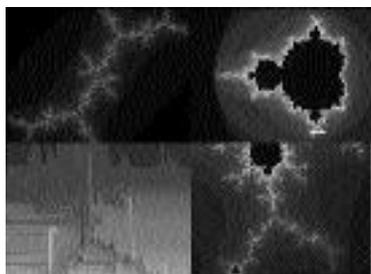


Figure 7

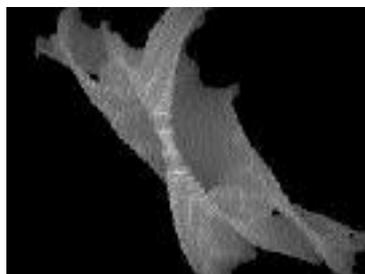


Figure 8

- Figure 8 : l'ensemble de Julia dans le corps des quaternions calculé pour $c = (0,1,0,0)$. Les itérations dans le plan complexe peuvent être étendues sans difficultés au corps des quaternions. La difficulté est alors plus au niveau de la représentation, puisqu'il s'agit alors d'objets quadrimensionnels.
- Figure 9 : ensembles de Julia dans le corps des quaternions lors d'une promenade autour de l'ensemble de Mandelbrot.
- Figure 10 : rotation de 2π autour des axes Y et Z d'un ensemble de Julia dans le corps des quaternions. La visualisation d'un ensemble de Julia calculé dans le corps des quaternions présente donc des difficultés considérables. Il n'est évidemment pas question ici de représenter directement ses quatre dimensions, puisque nous évoluons dans un espace aux apparences tridimensionnelles. Un ou plusieurs artifices doivent donc être utilisés : dans ce cas précis, seules sont visualisées seize sections tridimensionnelles obtenues au cours d'une rotation de

2π autour de l'un de ses axes. Cette opération, difficile à imaginer, peut être mieux comprise en l'appliquant à un objet de notre espace physique : prenons, par exemple, un cylindre que nous représenterions par une coupe effectuée à l'aide d'un plan arbitraire. Si nous observons l'image de celle-ci alors que le cylindre est en rotation, nous verrons une figure géométrique bidimensionnelle se déformer et présenter alternativement l'apparence d'un rectangle et d'une ellipse, suivant l'orientation du plan de coupe par rapport à l'axe du cylindre. C'est ce qui est montré ici, le cylindre étant remplacé par un objet fractal à quatre dimensions, et le plan par un hyper-plan tridimensionnel...

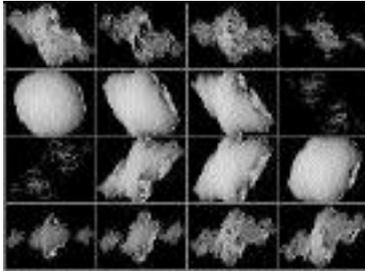


Figure 9

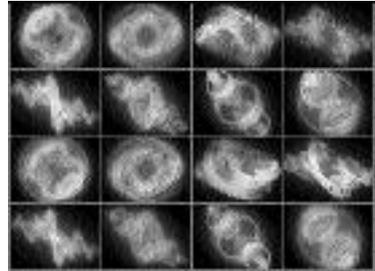


Figure 10

3.2.2. La géométrie fractale non déterministe

De nombreux objets de la nature possèdent (approximativement) la propriété d'autosimilarité ; c'est le cas des côtes maritimes, des montagnes, des nuages, de certaines plantes, ... Ils peuvent donc être modélisés à l'aide de la géométrie fractale, à condition d'y introduire de l'aléatoire.

- Figure 11 : le processus itératif de génération de champs fractals bidimensionnels (16 itérations). Il consiste à ajouter, à chaque nouvelle itération, des détails, identiques statistiquement à ceux ajoutés aux itérations précédentes, mais à une échelle inférieure.



Figure 11

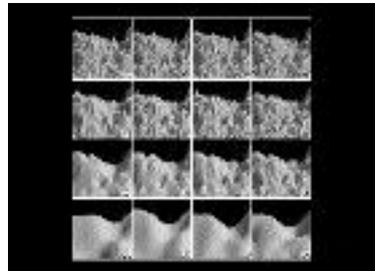


Figure 12

- Figure 12 : le processus itératif de génération de montagnes fractales (16 itérations).
- Figure 13 : montagnes au lever du soleil.
- Figure 14 : montagnes et dynamique de nuages légers – cette séquence étant

périodique –. Toutes ces images sont en fait des coupes tridimensionnelles dans des objets fractals quadrimensionnels ; cela permet d’envisager divers types d’animations.



Figure 13

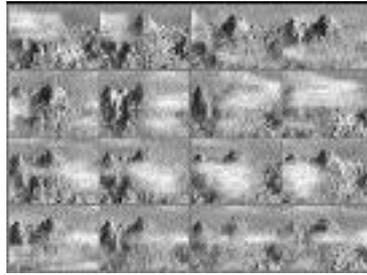


Figure 14

- Figure 15 : *l'érosion de la Tour de Babel.*

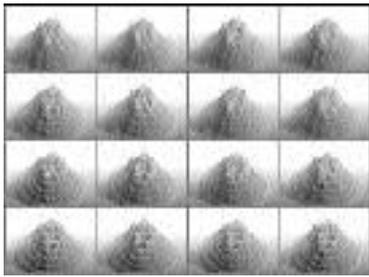


Figure 15

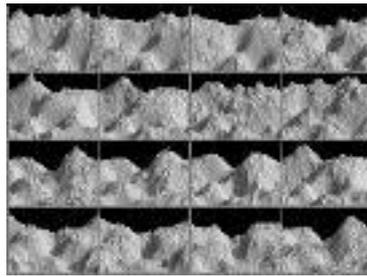


Figure 16

- Figure 16 : *tremblement de terre sur des montagnes multi-fractales.*
- Figure 17 : *Monument Valley au lever de soleil.* Des contraintes diverses peuvent être appliquées ; cela permet ainsi de reproduire des reliefs connus (dans le cas présent, il n’y a quasiment que des basses et des hautes altitudes).



Figure 17

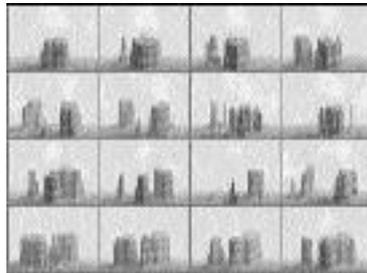


Figure 18

- Figure 18 : *Monument Valley dansant.*
- Figure 19 : *l'anomalie de Botticelli sur la Lune.* En exploitant plusieurs fois le modèle simultanément, il est possible de reconstituer les trois types de relief présents à la surface de la Lune (les montagnes, les failles dans les mers et les

cratères). Afin de « signer » la nature synthétique de cette image, un relief anthropomorphique (le visage de Flore dans le Printemps de Botticelli) a été ajouté au centre et à droite du relief.

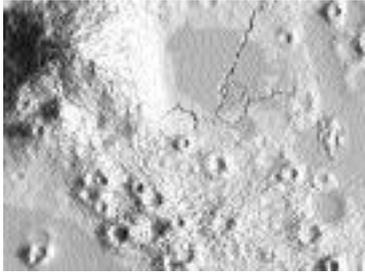


Figure 19

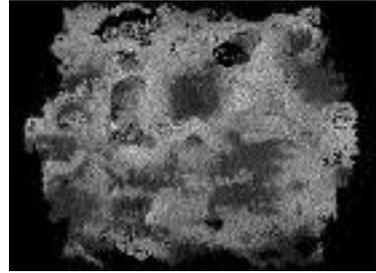


Figure 20

- Figure 20 : *structure fractale tridimensionnelle*. Il est intéressant de noter au sujet de cette image qu'elle est issue des mêmes valeurs numériques que la plupart des images précédentes, l'apparence visuelle très différente venant d'un autre choix de mode de représentation. Il s'agit là d'un problème très général, sur lequel nous reviendrons plus tard : en toute généralité, il y a de très nombreuses façons de représenter un même ensemble de valeurs numériques.

Pourquoi de nombreux objets naturels sont-ils fractals ? Il semblerait qu'une réponse possible (la réponse ?) vienne de cette « cohabitation » du fini et de l'infini qu'ils permettent. À titre d'exemple, les poumons, situés à l'intérieur du volume réduit de la cage thoracique, assurent ainsi des échanges gazeux (nous aurons l'occasion d'en présenter des images ultérieurement...) sur une surface supérieure à cent mètres carrés alors qu'une géométrie plus euclidienne (une sphère par exemple) donnerait un dispositif gigantesque, instable et non viable !

3.3. Les systèmes de particules

Dans toute expérience virtuelle les modèles mathématiques ne sont pas seuls à jouer un rôle fondamental ; les programmes qui les rendent intelligibles aux ordinateurs sont tout aussi importants. Au dix-neuvième siècle, Heinrich Hertz déclarait de façon prophétique : *on ne peut échapper au sentiment que ces formules mathématiques ont une existence qui leur est propre, qu'elles sont plus savantes que ceux qui les ont découvertes, et que nous pouvons en extraire plus de science qu'il n'en a été mis à l'origine*. Cela est encore plus vrai aujourd'hui et peut s'étendre, de plus, en substituant le mot *programme* à l'expression *formule mathématique*. À condition de suivre certains percepts de généralité (Jacques Hadamard ne disait-il pas, en parlant alors des mathématiques, *généraliser pour simplifier* ?) lors de la rédaction des programmes, il sera possible de considérer chacun de ceux-ci comme des *expériences potentielles*, c'est-à-dire comme contenant potentiellement une infinité d'expériences sur un « thème donné ». Il convient de noter que dans l'univers de la création artistique, le concept similaire d'*œuvre potentielle* pourra être défini avec le plus grand profit.

Illustrons ceci à l'aide d'un programme destiné à étudier l'évolution au cours du temps d'ensembles de particules possédant diverses propriétés (taille, masse, charges diverses, dureté, couleur, ...) interagissant éventuellement entre elles et avec un milieu de géométrie quelconque :

- Figure 21 : *marche aléatoire isotrope de 4 particules sur un réseau carré bidimensionnel avec visualisation de leur centre de gravité – particule blanche –*. Les six expériences qui vont suivre constituent l'ossature d'un film pédagogique portant sur la loi des grands nombres. Dans ce premier cas, le système est difficile à prévoir.

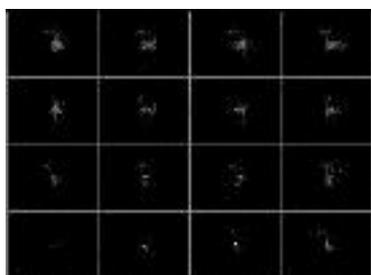


Figure 21

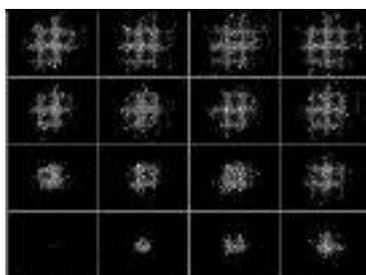


Figure 22

- Figure 22 : *marche aléatoire isotrope de 256 particules sur un réseau carré bidimensionnel avec visualisation de leur centre de gravité – particule blanche –*. Avec beaucoup de particules, le système global est beaucoup plus facile à prévoir, ce que la quasi-immobilité du centre de gravité montre. Que se passe-t-il si on remplace la marche aléatoire sur réseau carré par des déplacements libres dans un billard avec collisions ?
- Figure 23 : *billard bidimensionnel rectangulaire avec 4 particules aléatoires en collision et visualisation de leur centre de gravité – particule blanche –*. Le système est difficile à prévoir, comme pour la marche aléatoire sur réseau carré.

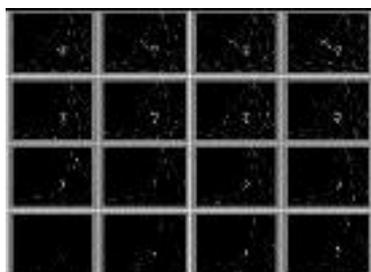


Figure 23

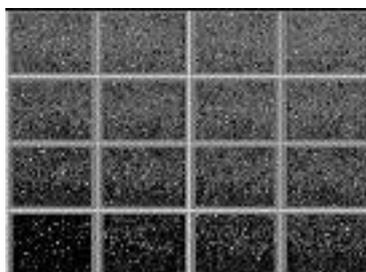


Figure 24

- Figure 24 : *billard bidimensionnel rectangulaire avec 256 particules aléatoires en collision et visualisation de leur centre de gravité – particule blanche –*. Le système est facile à prévoir, comme pour la marche aléatoire sur réseau carré. Que se passe-t-il avec un billard de forme plus complexe ?

- Figure 25 : billard bidimensionnel de Sierpinski avec 4 particules aléatoires en collision et visualisation de leur centre de gravité – particule blanche –. Les résultats précédents semblent indépendants de la forme du billard.

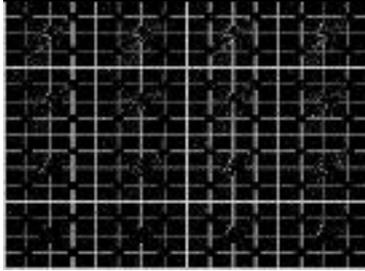


Figure 25

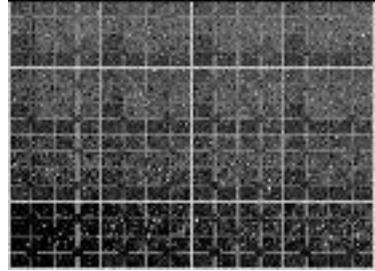


Figure 26

- Figure 26 : billard bidimensionnel de Sierpinski avec 256 particules aléatoires en collision et visualisation de leur centre de gravité – particule blanche –. De même ici...
- Figure 27 : diffusion entre deux boîtes (conditions initiales : la boîte de gauche est vide alors que la boîte de droite contient 256 particules), avec collisions et une géométrie variable. Examinons maintenant une application à la thermodynamique. Deux enceintes bidimensionnelles (l'une vide à gauche et l'autre pleine à droite) communiquent par l'intermédiaire d'un orifice de diamètre variable. Les pressions à l'intérieur des deux enceintes s'équilibrent lentement en présence d'un faible diamètre et rapidement avec un grand diamètre. Il convient de remarquer que, même si la bidimensionnalité du système est peu physique, elle présente l'avantage de produire des images plus « faciles à lire ». Cette facilité sera souvent exploitée dans un but pédagogique.

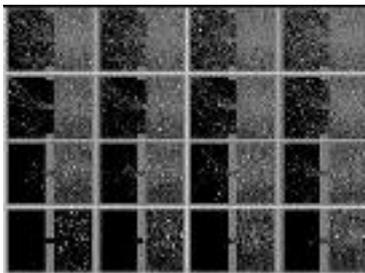


Figure 27

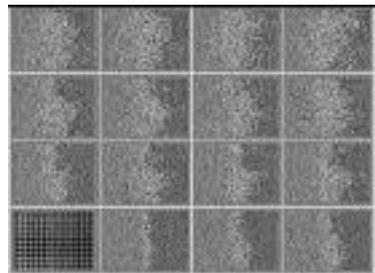


Figure 28

- Figure 28 : agrégats fractals bidimensionnels obtenus grâce à des particules identiques en interaction. La diffusion est un phénomène naturel fondamental. Ici, deux familles de particules strictement identiques sont initialement séparées l'une de l'autre. Rapidement, elles diffusent l'une dans l'autre et la frontière entre les deux familles devient rapidement fractale.
- Figure 29 : l'effet domino bidimensionnel. Par le respect des lois fondamentales de conservation, toutes les particules sont finalement mises en mouvement à la suite d'un simple choc sur une unique particule centrale.

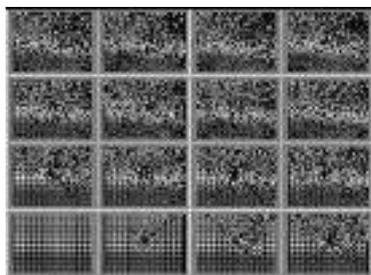


Figure 29

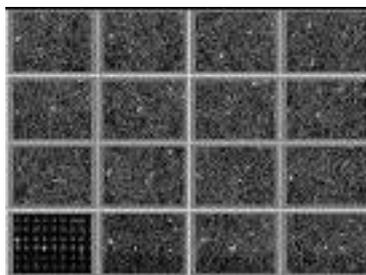


Figure 30

- Figure 30 : mouvement brownien de quelques particules lourdes dans un gaz de particules légères et rapides.
- Figure 31 : mouvement brownien de quelques particules lourdes et lumineuses dans un gaz de particules légères et rapides, avec un rapport croissant des rapports de masse (lourdes/légères = 1, 10, 100, 1000). Plus les sept particules lumineuses sont lourdes, plus leur mise en mouvement est difficile...

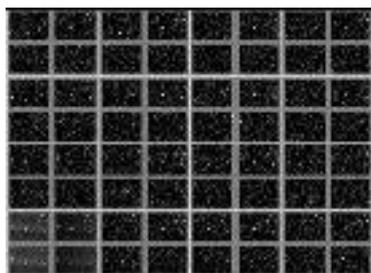


Figure 31

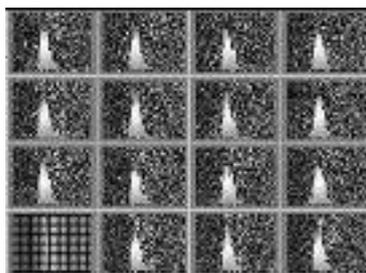


Figure 32

- Figure 32 : collisions de particules sans perte d'énergie dans un espace bidimensionnel avec visualisation de l'historgramme des vitesses. Les conditions initiales choisies ne sont pas « physiques » (les particules sont alors sur un réseau carré alors que leurs vitesses sont les mêmes en module et aléatoires en direction). Malgré cela, très rapidement, l'équilibre thermodynamique est atteint grâce à des chocs parfaitement élastiques, ce que montre l'enveloppe de l'historgramme de distribution des modules des vecteurs vitesse en $x \cdot \exp(-x \cdot x)$ dans cette simulation bidimensionnelle.
- Figure 33 : collisions de particules sans perte d'énergie dans un espace tridimensionnel avec visualisation de l'historgramme des modules des vitesses. Dans le cas tridimensionnel, le comportement est le même (l'enveloppe de l'historgramme de distribution des modules des vecteurs vitesse étant cette fois en $(x \cdot x) \cdot \exp(-x \cdot x)$).
- Figure 34 : détente d'un gaz dans une boîte circulaire bidimensionnelle avec visualisation de l'historgramme des modules des vitesses. Dans cet exemple, un gaz bidimensionnel est à l'intérieur d'une enceinte circulaire de volume croissant sans apport d'énergie. L'enveloppe de l'historgramme de distribution des modules des vecteurs vitesse se conservant au cours du temps, cette détente est donc isotherme.

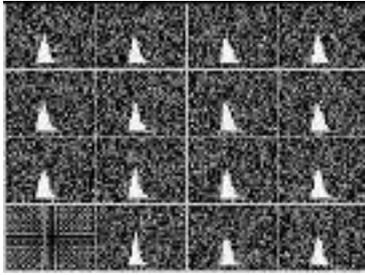


Figure 33

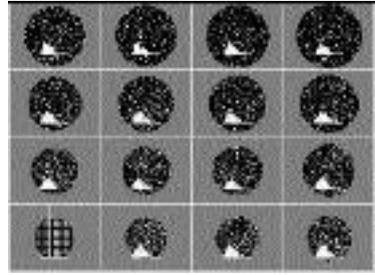


Figure 34

- Figure 35 : *billard bidimensionnel de Sierpinski avec 326 particules isotropes soumises à un fort champ de gravitation vertical. Un gaz bidimensionnel est à l'intérieur d'une enceinte de forme complexe et est soumis à un fort potentiel gravitationnel « vertical ». Les particules sont donc entraînées vers le bas ; malgré cela, un gradient vertical de densité apparaît dû à la pression élevée régnant dans les compartiments inférieurs.*

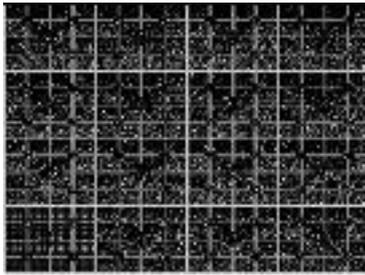


Figure 35

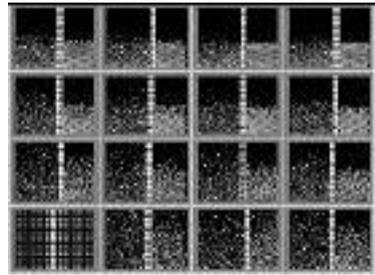


Figure 36

- Figure 36 : *un piston parfait avec les conditions initiales suivantes : piston immobile, particules chaudes à gauche et froides à droite, le tout dans une boîte bidimensionnelle soumise à un champ de gravitation vertical. Un piston parfait (sans frottement) à l'intérieur d'une boîte bidimensionnelle immergée dans un fort potentiel gravitationnel « vertical ». À sa gauche se trouve un gaz chaud, tandis qu'à sa droite se trouve un gaz froid. Le gaz chaud se détend et comprime le gaz froid ; le piston subit ensuite des oscillations amorties. Enfin, le gaz froid se solidifie selon un réseau cristallin hexagonal, alors qu'à gauche les trois phases solide, liquide et gazeuse peuvent être observées.*
- Figure 37 : *un fluide bidimensionnel avec des vitesses strictement identiques initialement et un obstacle central très légèrement décalé verticalement, avec visualisation de l'histogramme des modules des vitesses. Passage rapide de l'ordre parfait au désordre grâce à un obstacle central immobile (blanc) légèrement décalé verticalement, introduisant ainsi une légère dissymétrie lors des premiers chocs qu'il subit. Celui-ci gêne la progression d'un fluide de particules strictement identiques initialement (tous les vecteurs vitesse sont égaux – même module et même direction horizontale –).*

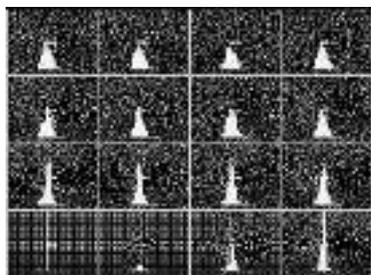


Figure 37

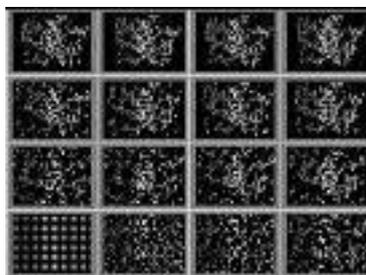


Figure 38

- Figure 38 : *agrégats fractals bidimensionnels obtenus par collage de 100% des particules lors de leurs collisions, dans un champ de gravitation central attractif.* Dans tous les exemples précédents, les chocs étaient parfaitement élastiques. Dans le cas présent, les particules, lors d'une collision, se collent les unes aux autres. Par l'intermédiaire d'un potentiel gravitationnel dit *central* (c'est-à-dire dont la source est située au centre de la boîte rectangulaire contenant les particules), des agrégats de plus en plus importants se constituent. À la fin, l'objet obtenu est un agrégat fractal très filamenteux. Que se passerait-il si toutes les particules ne se collaient pas les unes aux autres ?
- Figure 39 : *agrégats fractals bidimensionnels obtenus par collage de 50% des particules lors de leurs collisions, dans un champ de gravitation central attractif.* Lorsque seulement une partie des particules sont « collantes » (50% dans cet exemple), ces particules continuent à former un agrégat fractal (de couleur blanche) qui peut sembler plus trapu car il piège en fait de nombreuses particules non collantes.

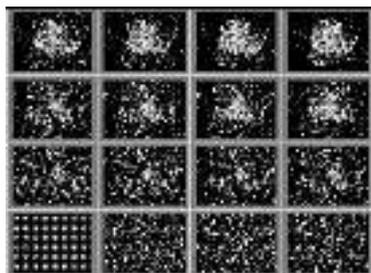


Figure 39

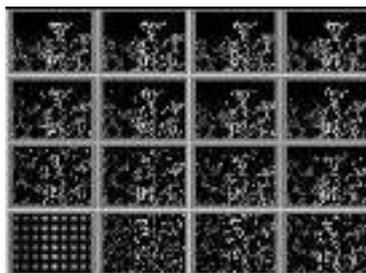


Figure 40

- Figure 40 : *agrégats fractals bidimensionnels obtenus par collage de 100% des particules lors de leurs collisions, dans un champ de gravitation vertical.* Refaisons l'expérience avec 100% de particules collantes et un potentiel gravitationnel « vertical ».
- Figure 41 : *agrégats fractals bidimensionnels obtenus par collage de 50% des particules lors de leurs collisions, dans un champ de gravitation vertical.* Refaisons l'expérience avec 50% de particules collantes et un potentiel gravitationnel « vertical ». Que se passe-t-il si toutes ces expériences étaient effectuées dans un espace tridimensionnel ?

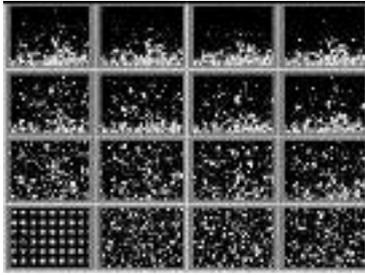


Figure 41

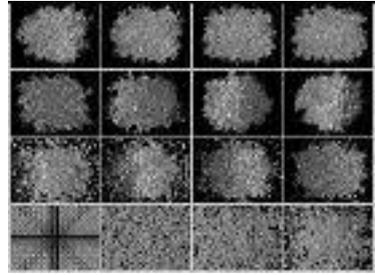


Figure 42

- Figure 42 : *agrégat fractal tridimensionnel obtenu par collage de 100% des particules lors de leurs collisions, dans un champ de gravitation central.* Là aussi, l'expérience aboutit à un agrégat fractal, mais dont la forme est beaucoup plus difficile à saisir car il réside dans un espace tridimensionnel ; une rotation de cet « objet » sous les yeux de l'observateur est donc introduite afin d'en faciliter la compréhension.
- Figure 43 : *agrégat fractal tridimensionnel obtenu par collage de 50% des particules lors de leurs collisions, dans un champ de gravitation central.*

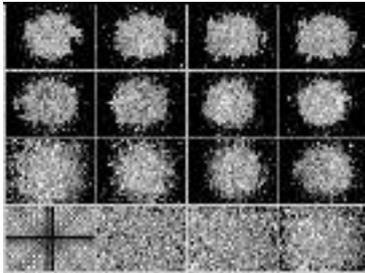


Figure 43

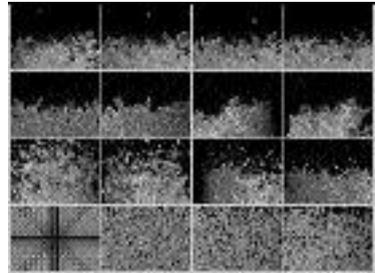


Figure 44

- Figure 44 : *agrégats fractals tridimensionnels obtenus par collage de 100% des particules lors de leurs collisions, dans un champ de gravitation vertical.*
- Figure 45 : *agrégats fractals tridimensionnels obtenus par collage de 50% des particules lors de leurs collisions, dans un champ de gravitation vertical.*

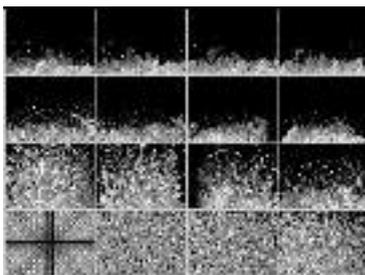


Figure 45

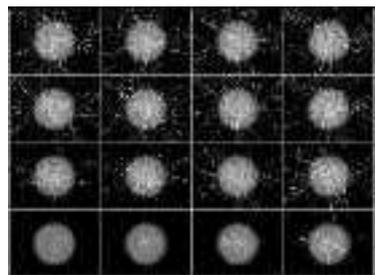


Figure 46

- Figure 46 : *la marche aléatoire des photons produits au cœur du Soleil.* La lumière qui éclaire et réchauffe notre Terre est produite par les réactions

nucléaires au cœur du Soleil. Huit minutes lui suffisent pour nous arriver. Mais, par contre, pour sortir du Soleil, chaque photon est l'objet d'une marche aléatoire d'une durée moyenne de 100 000 ans ! Il convient d'une part de noter que la sortie de chacun d'eux se fait selon une direction arbitraire relativement au vecteur normal ; c'est cela qui explique la luminosité uniforme du disque solaire (il n'apparaît pas comme une sphère...). D'autre part, cette expérience est un exemple caractéristique d'une difficulté rencontrée fréquemment lors de la visualisation de systèmes physiques : l'impossibilité de respecter les échelles spatiales et/ou temporelles...

- Figure 47 : *diffusion de particules à l'intérieur du modèle de l'acinus pulmonaire humain dû à Hiroko Kitaoka*. Les poumons forment une structure fractale assurant les échanges gazeux entre l'air et le sang. Ces expériences montrent la diffusion des gaz dans les alvéoles (ou *acinus pulmonaire*). Ici les particules blanches situées à l'origine de l'arborescence diffusent mieux que les particules colorées car ces dernières sont situées (et donc « piégées ») aux extrémités.

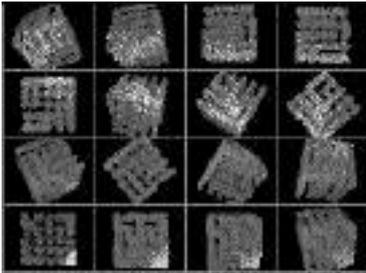


Figure 47

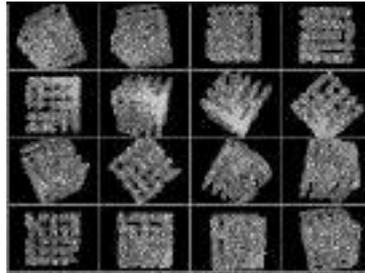


Figure 48

- Figure 48 : *diffusion de particules à l'intérieur du modèle de l'acinus pulmonaire humain dû à Hiroko Kitaoka avec perméabilité de la membrane*. Le mélange gazeux est composé approximativement de 80% d'azote et de 20% d'oxygène. La densité de ce dernier décroît en s'éloignant de l'origine de l'arborescence. L'une des difficultés rencontrées lors de ces expériences virtuelles réside dans la complexité de la géométrie du système. Que faire donc pour en faciliter la compréhension ? La solution adoptée ici consiste à faire tourner le système sous les yeux de l'observateur.
- Figure 49 : *diffusion de particules à l'intérieur du modèle de l'acinus pulmonaire humain dû à Hiroko Kitaoka avec perméabilité de la membrane*. Pour faciliter la compréhension de la géométrie de ce système, une autre solution consiste à le déplier et à le mettre à plat tout en conservant, évidemment, la tridimensionnalité de ses conduits.

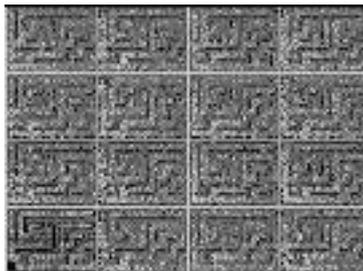


Figure 49

3.4. La mécanique céleste

Le sens de la vision, toujours en alerte, pourra réagir instantanément à toute surprise visuelle apparaissant durant une expérience virtuelle et, ainsi, de cette nouvelle approche pourront surgir des découvertes éventuellement importantes.

- Figure 50 : *visualisation de l'inclinaison de deux trajectoires elliptiques*. Cette expérience à caractère didactique est destinée à montrer la notion d'*inclinaison*. Dans ce système à trois corps, deux planètes orbitent autour d'une étoile dans des plans différents. Au cours du mouvement de l'observateur autour du système, il est possible de voir la *ligne des nœuds* (ligne d'intersection des plans de deux trajectoires qui passe évidemment par leur foyer commun).

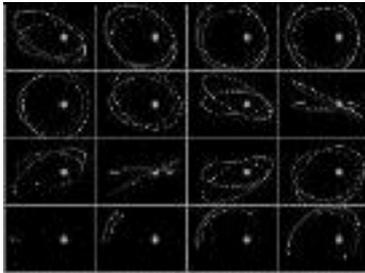


Figure 50

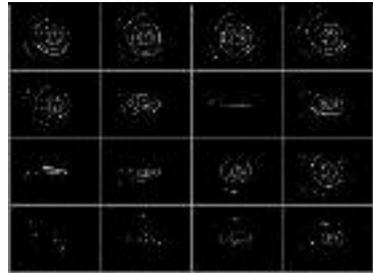


Figure 51

- Figure 51 : *intégration du problème des N-corps (N = 10) montrant le véritable système solaire avec une rotation simultanée de 2π* . En injectant dans le modèle du problème des N-corps les coordonnées et les vitesses des neuf planètes connues du système solaire à une date donnée, il est possible de calculer leurs trajectoires ultérieures. Au cours de cette expérience, l'observateur tourne autour du système afin de bien noter le cas particulier de Pluton dont la trajectoire n'est pas dans le plan des autres planètes (dit *plan de l'écliptique*). Il est important de noter l'aspect « mensonger » de cette représentation. En effet, le système solaire ne peut être représenté à l'échelle ; le Soleil, dans ce cas, serait plus petit qu'un point d'image et son diamètre doit donc être démesurément exagéré. De même, les planètes apparaissent comme ayant une taille du même ordre que celle du Soleil, ce qui n'est évidemment pas le cas en réalité. Enfin, étant donné le diamètre de la sphère matérialisant le Soleil, les trajectoires des quatre premières planètes devraient être cachées par celle-ci. Ainsi, il est nécessaire, après des calculs respectant les échelles réelles, de procéder à des dilatations non linéaires des trajectoires de façon à pouvoir les distinguer.
- * Figure 52 : *intégration du problème des N-corps (N = 10) montrant le véritable système solaire avec une rotation simultanée de 2π , notre Terre étant choisie comme origine des coordonnées*. Quel est le ciel que voyaient nos ancêtres et que nous voyons encore en le regardant « naïvement ». Cette expérience place donc la Terre au centre du système solaire (par un simple changement de référentiel). Le Soleil tourne alors autour de la Terre, alors que les huit autres planètes décrivent des boucles de rétrogradation qui furent longtemps expliquées à grand coup d'épicycles (du moins jusqu'à Copernic...).

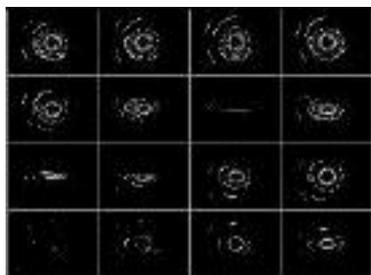


Figure 52

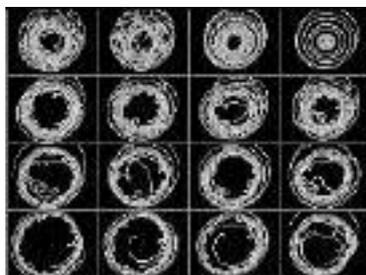


Figure 53

- Figure 53 : *du Soleil à Pluton (échelles non linéaires)*. Alors comment serait perçu notre système solaire depuis un point de vue quelconque ? C'est ce que montre cette expérience dans laquelle une dixième planète n'interagissant pas avec les autres (mais uniquement avec le Soleil) et dont quelques trajectoires possibles sont étudiées depuis le voisinage du Soleil jusqu'à l'orbite de Pluton. Le ciel perçu par ses habitants (virtuels) serait très régulier à proximité du Soleil et progressivement deviendrait d'une telle complexité qu'aucun système d'épicycles ne saurait l'expliquer. La leçon à tirer de cela est double : d'une part un système peut présenter un « visage » complexe, voire chaotique, alors qu'en fait, à condition de trouver le bon point de vue, il peut se simplifier considérablement (mais comment trouver le « bon point de vue » pour un système quelconque ?). Ce phénomène nous permet d'introduire la notion de **chaos virtuel**. D'autre part, si notre humanité s'était développée plus loin du Soleil et en dehors du plan de l'écliptique (si tant est que la chose fut possible), nos astronomes, nos mathématiciens, mais aussi nos prêtres des temps passés auraient observé un ciel beaucoup plus irrégulier ; les conséquences en auraient été certainement considérables en ce qui concerne la science, la philosophie et certainement les religions...
- Figure 54 : *simulation de « du Soleil à Pluton » avec de purs mouvements circulaires uniformes (échelles linéaires)*. Notons au passage que ce chaos virtuel n'est pas lié au caractère approximativement elliptique des trajectoires, mais uniquement à la notion de mouvement relatif ainsi que l'illustre cette expérience qui n'utilise que des mouvements circulaires concentriques et uniformes.

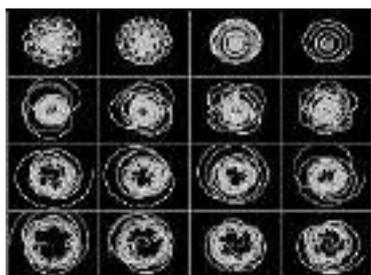


Figure 54

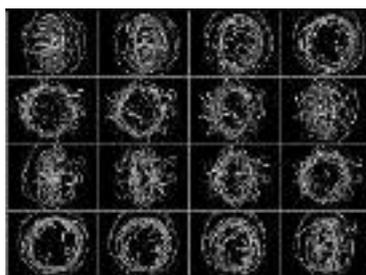


Figure 55

- Figure 55 : *du Soleil à Pluton – extrapolation –*. Enfin, dans cette dernière expérience, la planète fictive conserve une trajectoire de taille fixe, mais son plan tourne de 360 degrés dans l'espace.

4. Les difficultés et les limites de l'outil

Les quelques exemples précédents d'expériences virtuelles pourraient laisser croire que la situation est idyllique... En fait, il n'en est rien.

Au préalable, il convient de rappeler que lors d'une expérience virtuelle nous ne faisons qu'étudier le modèle d'un système et non point ce système lui-même. Confondre le système et son modèle serait identique à ne pas faire de différence entre un paysage et sa photographie. Le modèle ne peut pas, sauf cas très particuliers, représenter le système dans toute sa complexité. Les approches « réelle » et « virtuelle » sont bien évidemment complémentaires et les prédictions faites grâce aux mathématiques et à la programmation, lorsqu'elles concernent des « fragments » de réalité, doivent être validées (précisons qu'il est aussi possible de faire des expériences virtuelles dans des univers purement imaginaires, auquel cas ce risque de confusion ne se rencontre pas).

Tout reposant finalement sur l'ordinateur, la programmation sous-jacente conditionnera bien entendu (mais qui s'en souvient ?) la qualité, la valeur et la cohérence des résultats scientifiques obtenus. Mais une programmation exempte d'erreurs (sachant que, en dehors d'exemples simplistes, elle n'existe malheureusement pas...) est-elle garante de cette qualité ? Nous allons montrer qu'il n'en est rien. Trois raisons vont se conjuguer pour rendre parfois douteux nos résultats ; en effet, contrairement peut-être à certaines idées préconçues, il est difficile d'une part de calculer à l'aide d'un ordinateur, d'autre part de visualiser des résultats numériques et enfin de résister à la tentation de faire des images spectaculaires sans intérêt scientifique (ou pédagogique)...

4.1. Les développements mathématiques

Il est évident qu'au niveau de l'analyse mathématique du problème de nombreuses erreurs peuvent apparaître : de nature conceptuelle, d'utilisation d'hypothèses implicites, de mise en place d'un contexte inapproprié (par exemple, oublier les phénomènes relativistes en présence de vitesses importantes) ... et, plus « bêtement », de vulgaires fautes de signes...

D'autre part, et c'est là un point essentiel que nous détaillerons ci-après, il convient de garder présent à l'esprit en permanence qu'**un ordinateur est une machine tout à la fois finie et discrète**. Cela signifie que, sauf cas très exceptionnels, le modèle mathématique ne peut être utilisé tel quel ; il est impératif de lui appliquer des méthodes dites *numériques* afin que des résultats concrets puissent être obtenus. Cela signifie, par exemple, que le temps et l'espace doivent être échantillonnés et représentés ainsi par un ensemble fini de points. Ce processus est évidemment source d'anomalies graves.

Une fois ces deux premières étapes franchies (analyses mathématique et numérique respectivement), le modèle est théoriquement prêt à être mis en œuvre dans un ordinateur...

4.2. La programmation

S'il peut apparaître évident à beaucoup qu'il est bien plus facile de rédiger un programme qui fonctionne mal qu'un programme au comportement parfait, cela est malheureusement bien souvent oublié ; il est vrai d'ailleurs que les outils mis à notre disposition (tant au niveau logiciel qu'au niveau matériel) donnent l'illusion d'une grande (trop grande ?) facilité...

Si l'ordinateur peut aisément indiquer au programmeur qu'une parenthèse ouvrante n'est associée à aucune parenthèse fermante, ou encore qu'une suite d'opérateurs n'a aucun sens, hors de l'aspect syntaxique des programmes, l'ordinateur n'a que peu de compétences. En effet, par exemple, comment pourrait-il deviner que le « $A + B$ » que le programmeur a écrit aurait du être en fait un « $A - B$ » par rapport au problème posé ?

Certains utopistes fondent de grands espoirs sur une approche de la programmation de beaucoup plus haut niveau, où le programmeur ne ferait que spécifier son problème, laissant le soin à « quelque chose » de programmer à sa place. Deux remarques s'imposent alors : d'une part, les spécifications d'un problème complexe sont en général elles-mêmes complexes et peuvent donc contenir des erreurs, des incohérences, ... D'autre part, ce « quelque chose » est nécessairement un programme, lui-même d'une grande complexité et donc victime potentielle des mêmes maux que les autres programmes... Notons au passage que le nombre d'erreurs contenues dans un programme croît exponentiellement avec la complexité de celui-ci ; ainsi, au-delà d'un certain seuil, tout programme contient des anomalies, celles-ci pouvant d'ailleurs ne jamais se manifester, ou bien se produire au bout de nombreuses années d'utilisation sans problèmes apparents...

Imaginons malgré tout qu'un programme exempt de fautes ait été rédigé. Évidemment cette hypothèse ne concerne que les fautes de logique, puisque les fautes de syntaxe sont nécessairement détectées par l'ordinateur, puis corrigées par le programmeur. Cela est possible : il suffit, par exemple, de réaliser un programme simple et court (notons au passage que, même dans ce cas, le programmeur pourrait avoir oublié quelques cas particuliers : l'expérience peut être tentée en proposant à quelqu'un de programmer la simple résolution de l'équation du second degré...). Malgré cette perfection, le programme produira-t-il les résultats attendus ?

Malheureusement cela n'est pas toujours le cas pour une première raison liée à la **compilation**, opération qui consiste à traduire un programme écrit en langage de haut niveau (par exemple le Fortran) en une suite d'opérations élémentaires (les quatre opérations de l'arithmétique, la comparaison de deux nombres, ...) que seules les processeurs savent exécuter. Un compilateur est lui-même fait d'un ensemble de programmes complexes et même s'ils sont en général bien testés (à cause, en particulier, de l'usage intensif qui en est fait, sachant que, malgré tout, des tests

exhaustifs sont tout simplement impossibles), ils ne sont pas exempts d'erreurs (comme tout autre programme...). Ainsi, par exemple, avec la version 2.7.1 du compilateur « gcc » sur DEC VAX sous ULTRIX, l'expression :

$$\frac{0}{x}$$

est interprétée comme :

$$\frac{1}{2 \cdot x},$$

ce qui est mathématiquement peu correct !

Mais les compilateurs n'ont pas l'exclusivité des anomalies ! Les **librairies** utilisées (et dans lesquelles le programmeur pourra trouver, par exemple, les fonctions mathématiques usuelles), elles aussi, peuvent présenter des comportements aberrants. Ainsi, avec les versions 6.0.1 et 6.1 du système IRIX Silicon Graphics, il est impossible de faire confiance à la fonction « pow(...) » de la librairie « libm43 ». À titre d'exemple, le calcul des premières puissances de 2 donne :

$$2^0 = 1.000000$$

$$2^1 = 2.000000$$

$$2^2 = 4.000000$$

$$2^3 = 363031686155.843450$$

$$2^4 = -2194234532479271.800000$$

$$2^5 = -20565384119082056.000000$$

$$2^6 = -14968004282389316.000000$$

$$2^7 = -8864917391032742.000000$$

ce qui constitue, à partir de la puissance troisième, une approximation relativement grossière du résultat !

Une remarque essentielle s'impose alors : pour quelques erreurs détectées (parce que leurs conséquences étaient « visibles »), combien d'erreurs latentes sont présentes ? Ainsi, un programme peut être correct au niveau de sa source, alors que son exécutable peut, sur un certain système, ne pas l'être ! Par exemple, la Figure 19 semble correspondre visuellement à ce qui est attendu du programme géniteur, mais est-elle ce qu'elle serait si ce programme (supposé sans erreurs de logique...) était exploité sur un système parfait ?

Il faut noter au passage que, malgré tout, il est possible de développer des stratégies destinées à améliorer la situation.

Mais malheureusement l'histoire n'est pas terminée...

4.3. Le calcul

Finalement tout se ramène donc à des calculs effectués par des processeurs.

L'un des « objets fondamentaux » de la physique mathématique est le corps des nombres réels. Or la précision des opérations (exprimée en nombre de bits mémorisés et manipulés lors des calculs ; aujourd'hui, le monde scientifique utilise majoritairement les représentations sur 64 bits) est limitée pour des raisons

théoriques (que faire d'autre ?), pratiques et économiques évidentes. **Les nombres réels ne pourront donc pas, sauf cas particuliers, être représentés exactement dans un ordinateur : ils n'existent tout simplement pas pour ces machines !**

Un ordinateur (quelqu'en soit le type) est une machine tout a la fois **finie** (elle possède une capacité mémoire limitée) et « **discrète** » (l'information doit être échantillonnée et quantifiée avant tout traitement numérique). Ces deux caractéristiques sont malheureusement trop souvent oubliées, ce qui peut être alors la source de désagréments (euphémisme...).

À titre d'exemple du caractère **fini** des ordinateurs, étudions la suite définie par :

$$s_0 = 0,$$

$$s_n = s_{n-1} + 1.$$

Quelle est donc la valeur de s_n ? La réponse « mathématique » est évidemment :

$$s_n = n.$$

Malheureusement, la réponse « informatique » peut être très différente, ainsi que le montre le programme suivant, destiné à calculer numériquement cette valeur :

```
#define      N      une certaine valeur positive et entière...

main()
{
  int      n;
  float    somme=0;
  for      (n=1 ; n<=N ; n++)
  {
    somme = somme + 1.0;
  }

  printf("\n somme calculée = %f",somme);
}
```

donne systématiquement la valeur 16777216 (alors qu'il devrait évidemment donner la valeur N en l'absence de ce problème...) pour toute valeur de N supérieure ou égale à 16777216.

En ce qui concerne le caractère **discret** des ordinateurs, la conséquence immédiate est, en toute généralité, **l'impossibilité de manipuler les nombres réels**. Ces derniers n'existent tout simplement pas dans l'univers numérique. Ils sont très grossièrement approchés par les nombres dits *flottants* pour lesquels les opérations arithmétiques élémentaires ne sont en général pas internes. Lors de chacune d'entre elles, un **erreur d'arrondi** est introduite ; celle-ci est alors la cause de la **perte de la propriété d'associativité** de l'addition et surtout de celle de la multiplication (notons que, dans ces conditions, la multiplication n'est alors plus distributive par rapport à l'addition). Ainsi, par exemple, en simple précision (32 bits), le programme suivant :

```

main()
{
    float    A=3.0008,B=2.0007,C=1.0006;
    float    X,Y;

    X=(A*B)*C;
    Y=A*(B*C);

    printf("\n (%f x %f) x %f = %f",A,B,C,X);
    printf("\n %f x (%f x %f) = %f",A,B,C,Y);
}

```

donne comme résultats :

$$(3.000800 \times 2.000700) \times 1.000600 = 6.007302 = 0 \times 40C03BD2$$

et :

$$3.000800 \times (2.000700 \times 1.000600) = 6.007303 = 0 \times 40C03BD3$$

ce qui constitue deux résultats différents. On notera au passage que, d'une part, l'écriture de ce programme pourrait être bien plus concise, mais que, s'il est ainsi rédigé, c'est dans l'espoir de contrôler le plus possible le code généré par le compilateur, aucune optimisation n'étant demandée évidemment. D'autre part, l'expérience peut être refaite avec d'autres langages de programmation (par exemple **java** où le programmeur maîtrise l'ordre d'évaluation des opérations, mais est-ce bien vrai ?) ; elle produit évidemment le même phénomène...

Lorsque cette expérience est tentée et ne peut être reproduite, deux explications, au moins, peuvent être avancées :

- le compilateur utilisé transforme la *simple précision 32 bits en double précision 64 bits* à l'insu de l'utilisateur,
- le compilateur utilisé compile de façon similaire les expressions $(A \times B) \times C$ et $A \times (B \times C)$, supposant la propriété d'associativité satisfaite.

Il conviendra alors d'augmenter le nombre de décimales des trois variables « A », « B » et « C », ou encore d'essayer un autre compilateur...

Il convient de noter que la propriété d'associativité de l'addition est donc, elle aussi, perdue, mais qu'elle se manifeste plus rarement et de façon moins grave au niveau de ses conséquences. Ainsi, en simple précision (32 bits) :

$$(1.100000 + 3.300000) + 5.500000 = 9.900000 = 0 \times 411E6666$$

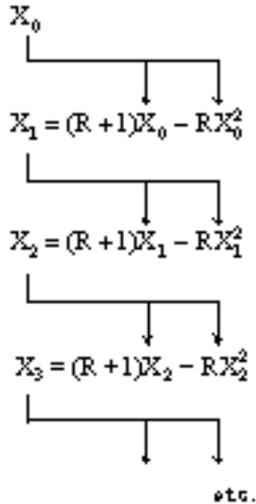
ce qui est différent de :

$$1.100000 + (3.300000 + 5.500000) = 9.900001 = 0 \times 411E6667$$

Lors de l'étude de problèmes non linéaires, tout cela peut avoir des conséquences absolument dévastatrices. À titre d'exemple, le calcul de l'itération (dite *dynamique de Verhulst*) :

$$X_n = (R+1)X_{n-1} - RX_{n-1}^2$$

qui est équivalent à la succession des calculs suivants :



peut se faire par le programme élémentaire, voire simpliste, donné de façon très détaillée ci-après (sont mises en gras, les lignes réellement essentielles) :

```
main()
{
double  R=3.0;
double  X=0.5;
int     n;
for    (n=0 ; n<=80 ; n++)
{
    if      ((n%10) == 0)
        {
            printf("\n itération(%04d) = %9.6f",n,X);
        }
    else
        {
            X = (R+1)*X - R*X*X;
        }
}
}
```

donne sur une O200 Silicon Graphics (processeur R10000), sous IRIX 6.4 et cc 7.1, les résultats suivants en fonction des options d'optimisation :

	option '-O2'	option '-O3'
X(00) =	0.500000	0.500000
X(10) =	0.384631	0.384631
X(20) =	0.418895	0.418895
X(30) =	0.046399	0.046399
X(40) =	0.320184	0.320192
X(50) =	0.063747	0.059988
X(60) =	0.271115	1.000531
X(70) =	1.328462	1.329692
X(80) =	0.817163	0.021952

Il est facile de calculer simultanément les extrema de tous les résultats de tous les calculs intermédiaires lors de chaque opération arithmétique élémentaire. Le minimum trouvé est strictement positif et inférieur à 1, sans être petit par rapport au plus petit nombre positif représentable. Le maximum, quant à lui, vaut quelques unités. Il n'y a donc jamais de calculs élémentaires au cours desquels seraient combinés deux nombres d'ordres de grandeur très différents et donc incompatibles avec la représentation flottante. Il convient de noter au passage que ce dernier problème peut être, lui aussi, la cause de phénomènes « ennuyeux » ; ainsi, à titre d'exemple, en double précision 64 bits, additionner 1 à $1e16$ (« 10 à la puissance 16 ») est sans effet, ce qui conduit à l'égalité paradoxale suivante :

$$10^{16} + 1 = 10^{16}.$$

En ce qui concerne l'influence éventuelle de la syntaxe, voici une expérience troublante effectuée (avec R = 3.0) en **Java** (langage réputé pour son caractère *write once, run everywhere*) avec des variables déclarées avec le type *double* : un même programme calcule sur deux machines différentes et de cinq façons différentes (mais équivalentes mathématiquement) l'itération précédente. Voici les résultats obtenus :

O200 Silicon Graphics (processeur R10000), sous IRIX 6.5 :

	$(R + 1)X - R(XX)$	$(R + 1) X - (RX)X$	$((R + 1) - (RX))X$
X(0000) =	0.5	0.5	0.5
X(0500) =	1.288736212247168	0.007057813075738616	1.2767485100695732
X(1000) =	1.3327294162589722	0.916560711983132	1.207710752523091
X(1500) =	1.1448646685382955	0.4481000759915065	0.3102077001456977
X(2000) =	1.0548628914440754	0.896126931497168	0.6851138190159249
X(2500) =	1.292802584458599	0.06063433547953646	1.174118726001978
X(3000) =	1.0497821908090537	0.0219606878364607	1.3287403237319588
X(3500) =	0.8115039383609847	1.3213031319440816	0.6545151597367076
X(4000) =	0.04922223042798102	1.3203298564077224	0.09243804931690679
X(4500) =	0.4745896653599724	0.32865616721789603	0.018965010461877246

	$RX + (1 - (RX))X$	$X + R(X - (XX))$
X(0000) =	0.5	0.5
X(0500) =	1.246534177059494	0.03910723014701789
X(1000) =	0.27770146115891703	0.26663342726567785
X(1500) =	0.015374092695375374	0.9841637252962943
X(2000) =	0.009229885271816535	0.3860923315999224
X(2500) =	0.6922411856638806	0.020878761210912034
X(3000) =	0.11354602472378028	0.13270749449424302
X(3500) =	0.5760786099237328	1.324039473116061
X(4000) =	0.9496284087750142	1.316597313359563
X(4500) =	0.25384661313701296	0.18512853535354462

PC (processeur Pentium II), sous LINUX Mandrake 7.0 :

	$(R + 1)X - R(XX)$	$(R + 1) X - (RX)X$	$((R + 1) - (RX))X$
X(0000) =	0.5	0.5	0.5
X(0500) =	1.2887362122471679	0.00705781307573862	1.2767485100695732
X(1000) =	1.3327294162589722	0.91656071198313205	1.207710752523091
X(1500) =	1.1448646685382955	0.44810007599150647	0.31020770014569771
X(2000) =	1.0548628914440754	0.89612693149716804	0.68511381901592494
X(2500) =	1.3328681064703032	0.06063433547953646	1.1741187260019781
X(3000) =	1.2956769824648844	0.0219606878364607	1.3287403237319588
X(3500) =	0.19193027175727995	0.37986077053509781	0.6545151597367076
X(4000) =	1.2491385720940165	0.96017143401896088	0.09243804931690679
X(4500) =	0.00644889182443986	1.3185465795235045	0.01896501046187725

	$RX + (1 - (RX))X$	$X + R(X - (XX))$
X(0000) =	0.5	0.5
X(0500) =	1.2465341770675666	0.03910723014701789
X(1000) =	0.6676224369769922	0.26663342726567785
X(1500) =	0.41049165176544455	0.98416372529629426
X(2000) =	1.0026346845706315	0.3860923315999224
X(2500) =	0.0154001182074282	0.02087876121091203
X(3000) =	0.50504896336548377	0.13270749449424302
X(3500) =	0.38299434265835819	1.324039473116061
X(4000) =	0.6565274346305322	1.316597313359563
X(4500) =	0.94966313327336349	0.18512853535354462

Ainsi, il n'est pas surprenant de constater que là-aussi les cinq formulations donnent des résultats différents. Par contre, il est étonnant de constater que trois des cinq d'entre elles produisent, sur les deux machines, des résultats incompatibles, les deux autres donnant des valeurs identiques (ou presque...).

On notera, pour la petite histoire, qu'il est essentiel, dans toutes ces expériences, de préciser sans ambiguïté les versions du système et du compilateur utilisés, au cas où ces résultats devraient être reproduits fidèlement.

Il est de plus essentiel de remarquer que d'une part, ce calcul ne fait appel à aucune méthode numérique (d'intégration par exemple) et que d'autre part, ce programme ne peut être faux (ce qui peut être prouvé formellement)... **Moralité** : ce programme ne calcule pas l'itération définie ci-dessus dans le corps des nombres réels. Oui, mais alors, qu'étudie-t-il ? Sans que la réponse soit « n'importe quoi », il faut bien dire que l'itération qui s'exécute effectivement n'est pas « réellement » connue, car elle dépend d'un trop grand nombre de paramètres non maîtrisés, voire inconnus...

Les conséquences de cela sont nombreuses ; en particulier, les résultats numériques peuvent ainsi dépendre :

- de la syntaxe utilisée pour formuler le modèle numérique (ainsi que le montre cette « expérience »),
- du compilateur employé, ainsi évidemment que de sa version et des options utilisées (ainsi que le montre cette autre « expérience »),
- du processeur sur lequel sont effectués les calculs,
- de l'hétérogénéité des systèmes, ...

Ces difficultés se rencontreront *a priori* avec tous les problèmes dits *sensibles aux conditions initiales*. En effet, tout résultat intermédiaire dans un calcul peut être considéré comme la condition initiale du calcul suivant. Une erreur d'arrondi dans une valeur constitue donc une imprécision dans les conditions initiales du calcul qui l'exploite.

Augmenter la précision des calculs (l'exemple précédent utilise la double précision – 64 bits –), ne fait que retarder quelque peu l'apparition du phénomène ainsi que le montre cette expérience faite avec **bc** (« arbitrary-précision arithmetic language »). Le tableau suivant donne le numéro d'itération n à partir duquel la partie entière est fautive, en fonction du nombre de décimales utilisées pour faire le calcul (paramètre *scale*) :

scale =	010	020	030	040	050	060	070	080	090	100
$n =$	035	070	105	136	169	199	230	265	303	335

Il est évident que le faible gain obtenu ne peut justifier le coût de cette opération.

Enfin, utiliser l'arithmétique dite *d'intervalle*, semble aussi voué à l'échec sur les problèmes sensibles aux conditions initiales (comme l'est l'exemple précédent). En effet, un intervalle $[x - \varepsilon, x + \varepsilon]$ encadrant une valeur exacte ne peut, en toute généralité, qu'« exploser » au cours des calculs suivants, puisque $x - \varepsilon$ et $x + \varepsilon$ peuvent être considérées comme deux conditions initiales très voisines l'une de l'autre...

Le problème des N-corps donne un exemple concret de ces difficultés.

Alors, ne pourrait-on pas se passer des nombres réels pour faire de la physique mathématique ?

Pour en terminer avec cette « affaire » résumons visuellement, par l'exemple, quelques-unes des conséquences des erreurs d'arrondi :

- Figure 56 : *l'irréversibilité numérique du billard bidimensionnel*. Un système réversible peut perdre cette propriété s'il est sensible aux erreurs d'arrondi. Dans cet exemple, au « milieu temporel » du calcul, tous les vecteurs vitesses sont « inversés ». L'état final obtenu est malheureusement très différent de l'état initial.

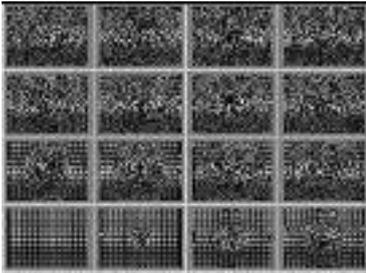


Figure 56

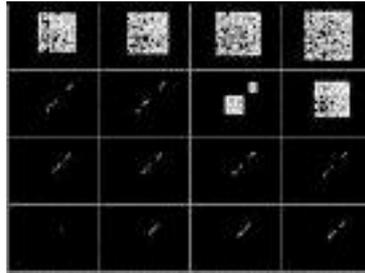


Figure 57

- Figure 57 : *visualisation bidimensionnelle des erreurs d'arrondi dans le calcul de la dynamique de Verhulst*. De la façon d'écrire un programme (et en particulier de la façon de parenthéser) peuvent dépendre les résultats.
- Figure 58 : *rotation autour de l'axe X de l'attracteur de Lorenz*.

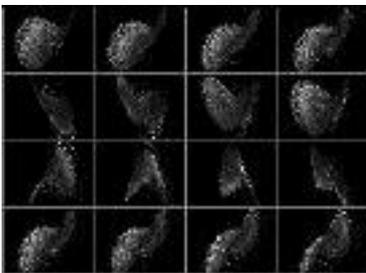


Figure 58

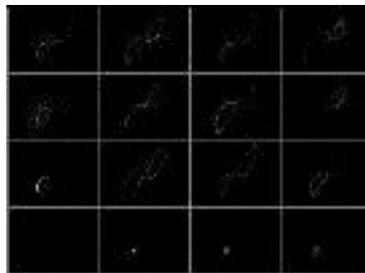


Figure 59

- Figure 59 : *l'attracteur de Lorenz – sensibilité aux conditions initiales –*.
- Figure 60 : *l'attracteur de Lorenz – sensibilité à la méthode d'intégration utilisée (Euler, Runge-Kutta/second ordre, Runge-Kutta/quatrième ordre) –*.

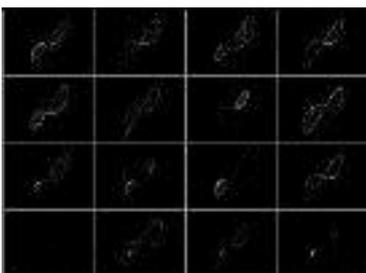


Figure 60



Figure 61

- Figure 61 : *calcul de l'attracteur de Lorenz sur trois ordinateurs différents (sensibilité aux erreurs d'arrondi)*. Ainsi un système sensible aux conditions initiales (comme l'est l'attracteur de Lorenz) est sensible aux erreurs d'arrondi (et réciproquement ?).
- Figure 62 : *rotation autour de l'axe X de l'attracteur de Lorenz (1 000 itérations), calculée sur deux ordinateurs différents*. Ce mouvement de rotation calculé conjointement par deux ordinateurs différents semble correct. En effet, le calcul ne portant que sur 1 000 itérations, l'anomalie finale n'est pas encore suffisamment importante pour être visible.

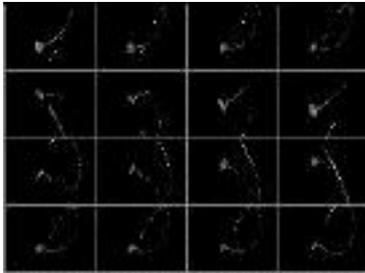


Figure 62

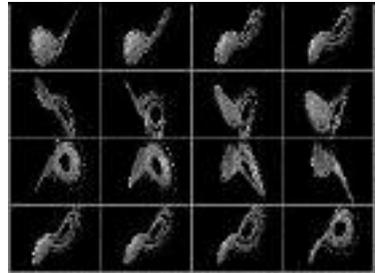


Figure 63

- Figure 63 : *rotation autour de l'axe X de l'attracteur de Lorenz (5 000 itérations), calculée sur deux ordinateurs différents*. Cette fois-ci, le mouvement de rotation semble incorrect (bien observer les saccades entre certains couples d'images). En effet, le calcul porte ici sur 5 000 itérations, ce qui laisse le temps à l'anomalie de s'amplifier suffisamment pour être visible à la fin de ce processus. Cette expérience, combinée avec la précédente, montre la difficulté de faire du calcul parallèle portant sur des modèles sensibles aux erreurs d'arrondi, à l'aide d'un ensemble de machines hétérogènes (aussi bien au niveau matériel qu'au niveau logiciel – une simple différence de version du compilateur utilisé peut suffire ! –).
- Figure 64 : *N-body problem integration (N = 4 : une étoile, une planète lourde et une planète légère avec un satellite) calculé avec trois options d'optimisation différentes (sensibilité aux erreurs d'arrondi)*.

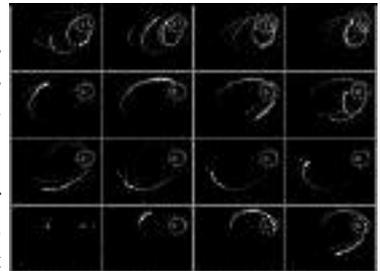


Figure 64

Heureusement, tous les problèmes traités sur ordinateur ne sont pas aussi sensibles aux erreurs d'arrondi (bien qu'elles soient évidemment toujours présentes). Mais les exemples précédents, par leur « brutalité », montrent l'existence de ce phénomène en rappelant que dans certaines circonstances les résultats obtenus peuvent être, non pas approchés, mais « tout simplement » faux...

4.4. La Visualisation



Figure 65

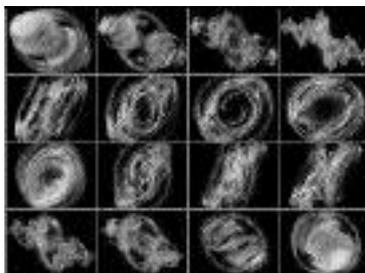


Figure 66

En ce qui concerne la visualisation, contrairement à la synthèse d'image spectaculaire telle que la figure 65, il s'agit, dans le contexte de l'expérimentation virtuelle, de montrer bien souvent des objets sans image, soit qu'ils n'existent pas dans la nature (tel cet ensemble de Julia dans les quaternions de la figure 66), soit que, bien qu'étant naturels, il soit impossible, voire interdit, de les représenter (comme l'atome d'hydrogène de la figure 67) ou encore tout simplement parce qu'ils n'ont pas d'équivalents visuels (une pression ou une température par exemple...). S'il est clair que montrer un objet à quatre dimensions est chose difficile (cf. Figure 68), il est malheureusement moins évident que toute tentative de représentation, dans ce domaine, est délicate. La difficulté vient bien entendu des espaces, en général non naturels, dans lesquels résident ces objets, mais surtout de la non-unicité des images que l'on peut en donner : même dans les cas les plus simples, des ambiguïtés et des contradictions peuvent surgir. En toute généralité, **il n'y a pas unicité de la représentation.**

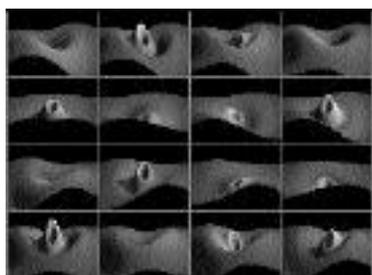


Figure 67

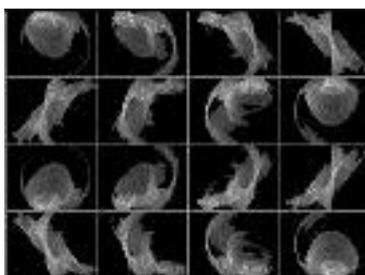


Figure 68

Ainsi, la visualisation d'un tableau de nombres pourrait être considérée, naïvement, comme une opération élémentaire et bien maîtrisée depuis de nombreuses décennies. En effet, la géographie ou la météorologie font appel à des couleurs pour représenter des altitudes, des températures ou encore des pressions. Malheureusement, cette simplicité n'est qu'apparente : les quatre images de la Figure 69

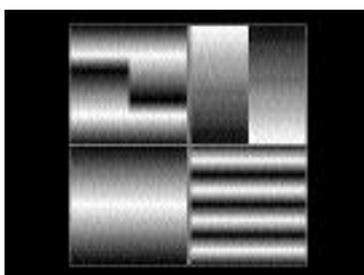


Figure 69

nous montrent le même ensemble bidimensionnel (un « tableau ») de nombres, la seule différence se situant dans le code des couleurs utilisées. En effet, pour obtenir ce type de représentation, il suffit d'associer aux nombres (ou plus généralement à des plages de valeurs numériques) des couleurs (en appelant couleur, par abus de langage, le noir, les gris et le blanc) ; par exemple, il sera décidé arbitrairement de représenter par du rouge les points associés à des valeurs numériques comprises entre 1.37 et 3.62. De cet arbitraire naissent les difficultés ici présentées. De toute évidence, dans cet exemple, la perception varie fortement d'une image à l'autre, les conclusions possibles sur l'unique tableau de nombres sous-jacent pouvant même être en contradiction les unes avec les autres ! Ces quatre représentations peuvent être qualifiées d'orthogonales... Une **sémiologie de la visualisation scientifique** reste à créer ; elle serait un lieu de rencontre privilégié entre les artistes et les scientifiques.

De plus, il est souvent tellement facile de calculer de telles images, que le risque peut être grand de confondre esthétique et valeur scientifique : une belle représentation n'est point nécessairement bonne (que vaut, par exemple, la Figure 4 ?), alors que, bien souvent, ce critère d'harmonie est utilisé pour juger une théorie scientifique (c'était, par exemple, la démarche suivie par Paul Dirac). Malgré cela, il ne faudrait pas négliger l'apport de l'Art à la Science. En effet, il est des codes culturels définis au cours des siècles passés ; ceux-ci doivent être respectés ici sous peine, dans le cas contraire, de produire des visualisations qui soient en contradiction avec nos mécanismes perceptifs. À titre d'exemple, une couleur dite froide (respectivement chaude) est en général associée à des valeurs numériques faibles (respectivement élevées) et cette convention quasi universelle doit ici s'appliquer.

Enfin, il ne faut pas oublier que, par définition, ces images sont faites pour être regardées. Or le système visuel n'est lui-même pas exempt de problèmes. Des **illusions d'optique** peuvent donc survenir et par exemple :

- Figure 70 : deux carrés gris identiques se déplaçant au-dessus d'une échelle de gris. L'illusion dite de *de contraste simultané* montre que l'analyse que nous faisons des images n'est pas locale, mais globale...

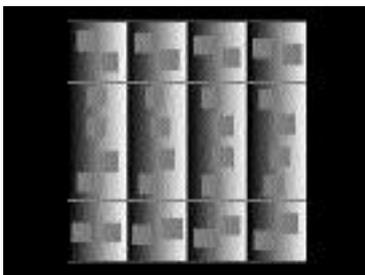


Figure 70

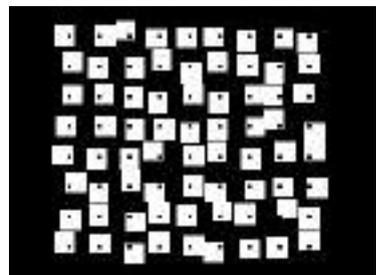


Figure 71

- Figure 71 : points noirs (à l'intérieur de carrés blancs aléatoires) sur un réseau carré.
- Figure 72 : l'illusion de Zollner.



Figure 72



Figure 73

- Figure 73 : *tas ou trou (vue aérienne)*.

5. Conclusion

Une fois avertis de ces dangers, les scientifiques et les ingénieurs ont à leur disposition un nouvel instrument dont les implications épistémologiques auront au moins l'importance qu'eut la lunette de Galilée en son temps. Tout ceci débouche sur le concept d'Expérimentation Virtuelle. Cette dernière, complémentaire de l'expérimentation réelle (le qualificatif réel étant ici utilisé, rappelons-le, dans son sens le plus intuitif et loin de tout débat sur la notion de réalité), consiste donc, tant dans les domaines scientifique qu'industriel, à faire des expériences non point sur un système réel (cela étant *stricto sensu* de plus en plus difficile : par exemple, quel physicien a déjà touché une particule élémentaire ?), mais sur son modèle mathématique (voir l'annexe 2) et à interagir avec ce dernier par l'intermédiaire d'images de synthèse. Alors, en restant – ou pas... – dans le cadre de la légalité des lois de la nature, tout nous est permis, et par exemple de créer les univers utiles à nos recherches (comme les Figures 2 ou 74).



Figure 74

Bien évidemment, de nombreuses questions surgissent de cette approche. D'une part, la science et, en particulier, les Mathématiques ont-elles droit à ces images ? Et d'ailleurs sont-elles utiles ? Le scientifique ne peut-il se contenter de la seule pensée verbale et bannir alors toute aide visuelle ? Un élément de réponse à cette interrogation fut donné par Albert Einstein dans une lettre qu'il écrivit à Jacques Hadamard : « *les mots et le langage, écrits ou parlés, ne semblent pas jouer le moindre rôle dans le mécanisme de ma pensée. Les entités psychiques qui servent d'éléments à la pensée sont certains signes ou des images plus ou moins claires qui peuvent à volonté être reproduits et combinés* ». Il convient de se souvenir que pendant plusieurs décennies, un large mouvement d'abstraction (dans l'œuvre de Nicolas Bourbaki en particulier) s'est imposé mais que, l'apparition de nouvelles techniques aidant (ordinateur et synthèse d'image en particulier), nous assistons aujourd'hui à un retour en force de la **pensée visuelle**. Bien évidemment tout

extrémisme est dangereux, ici comme ailleurs ; il ne faudrait pas qu'un mouvement inverse se déclenche et que *le je pense donc je suis* se transforme en un *je calcule et je visualise donc je suis...* À titre d'exemple, rappelons que la Géométrie fractale a très certainement pris l'essor qu'elle connaît actuellement grâce à l'image, mais que, malgré cela, il n'est jamais de certitudes visuelles et que les conjectures qui peuvent être formulées à partir d'une représentation doivent se voir confirmées ou infirmées par un théorème démontré « à l'ancienne » (voir, par exemple, l'histoire de la conjecture – démontrée fautive par la suite – de la non connexité de l'ensemble de Mandelbrot) !

L'image doit donc être vue ici simplement comme un levier intellectuel stimulant et entraînant plus loin l'imagination du chercheur, rendant ainsi toute sa noblesse au sens de la vision. D'autre part, ces univers créés dans nos ordinateurs ont-ils le statut ontologique de nouvelles réalités ? Plus personne ne contesterait aujourd'hui la réalité des objets mathématiques (les nombres, par exemple) ; alors ces « univers-jouets » avec leurs lois calquées sur celles de la nature, ou bien avec d'autres sur lesquelles il nous faut expérimenter, ne sont-ils pas aussi réels que celui que nous n'appréhendons finalement que par les modèles neuronaux créés par nos sens au cours des âges ? Enfin, ces images de science, si elles créent bien souvent la surprise chez ceux qui en ont un besoin immédiat et professionnel, interpellent fréquemment la sensibilité du profane et de l'artiste, signe certain d'un contenu beaucoup plus riche que les apparences ne le laisseraient parfois supposer. Ne sont-elles point alors à entendre comme un lieu de convergence entre l'Art et la Science, où tout reste encore à voir et à découvrir ?

Annexe 1

À titre d'exemple de modèle, examinons brièvement le problème dit des N corps. Étant donnés N objets massiques, mais supposés ponctuels, il s'agit d'étudier leurs interactions gravitationnelles à partir de certaines conditions initiales définies à l'instant 0 par l'ensemble des coordonnées et des vitesses. Cette étude doit donc nous fournir pour tout instant futur les positions et les vitesses de chacun de ces corps. Les équations du problème, dans le cadre de la mécanique newtonienne, peuvent être écrites facilement par un élève de terminale S ; mais est-il aisé d'aller ensuite plus avant ? Grâce à Johannes Kepler (*Astronomia Nova*, 1609) et à sir Isaac Newton (*Philosophiae Naturalis Principia Mathematica*, 1687) nous savons que pour N égal à 2, l'un des deux corps décrit une ellipse dont l'un des foyers est le second d'entre eux. Mais pour les valeurs de N supérieures à 2, que se passe-t-il ? Pour la réponse à cette question, il a fallu attendre deux cents ans avec les travaux de Henri Poincaré (*Les méthodes nouvelles de la Mécanique céleste*, 1892-1899) ; ce dernier a montré que, bien que les équations soient « simples » comme nous l'avons noté précédemment, ce problème n'avait pas de solution. Ainsi, nous sommes incapables d'écrire des formules exactes qui nous donneraient les informations recherchées (comme, par exemple, dans le cas de la Figure 2).

Annexe 2

Pour mettre en œuvre le concept d'expérimentation virtuelle, il nous faut construire un système informatique approprié. Il peut aujourd'hui reposer sur le concept de *méta-ordinateur*, assemblage logique (mais non physique) de machines de calcul, de stockage, de visualisation et d'interaction (pouvant utiliser, en particulier, les techniques dites de *réalité virtuelle*), mais aussi d'appareils de mesure (par exemple, le télescope spatial Hubble). Ces différentes composantes n'ont pas besoin d'être physiquement proches l'une de l'autre ; bien au contraire, elles peuvent être réparties sur la planète entière, constituant ainsi des machines, elles aussi virtuelles, d'une puissance phénoménale. Cette ubiquité électronique est aujourd'hui rendue possible par les réseaux informatiques, dont le plus connu et le plus universel est actuellement Internet ; les lecteurs sont invités à se connecter au serveur **A VIRTUAL SPACE-TIME TRAVEL MACHINE** qui présente de multiples applications opérationnelles de l'expérimentation virtuelle, ainsi que de nombreuses explications complémentaires à cet article. Son nom, *A Virtual Space-Time Travel Machine (une machine virtuelle à voyager dans l'espace-temps)*, a été choisi afin de résumer en une seule expression les possibilités de certains outils de la Science contemporaine...

Copyright (c) 2002 Jean-François Colonna.