

Formulation de l'Algorithme de Verlet à Partir de la Dérivée Fractionnaire Conforme

Rasolomampandry G., Randriamaroson R.M., RandimbindrainibeF

Laboratoire de recherche Sciences Cognitives et Applications (LR - SCA)

Ecole Doctorale en Sciences et Techniques de l'Ingénierie et de l'Innovation (ED - STII)

Ecole Supérieure Polytechnique Antananarivo (ESPA) - Université d'Antananarivo

BP 1500, Ankatso – Antananarivo 101 – Madagascar



Résumé – Ce travail consiste à donner une nouvelle formulation de l'algorithme de Verlet dans le cas où on utilise la dérivation fractionnaire conforme à la place de la dérivée entière.

Mots clés – Dérivation fractionnaire conforme - algorithme de Verlet- accélération fractionnaire

I. INTRODUCTION

L'algorithme de Verlet est une des méthodes numériques particulièrement adaptées aux systèmes conservatifs [2]. Et à partir des dérivations d'ordre entier et la formule de Taylor qu'on a élaboré cet algorithme.[1][2]

La dérivée fractionnaire conforme est une nouvelle forme de dérivée fractionnaire publiée en 2014 [3][4].

Parmi les questions qui peuvent se poser est :

Quels sont les changements dans sur l'expression de l'algorithme si remplace les dérivations d'ordre entier par des dérivées fractionnaire conforme ?

Pour répondre à cette question, on va rappeler certains détails sur la dérivée fractionnaire conforme et sur l'algorithme de Verlet. Ainsi cet article va se diviser en quatre sections. La première section rappellera l'algorithme de Verlet classique. La partie suivante parlera de la dérivée fractionnaire conforme. La troisième partie répondra à la question posée. Ensuite , on reprendra l'exemple prise dans [1], sur la variation de la distance de la comète de Halley et le soleil dont les calculs seront faites à partir de cette nouvelle forme de l'algorithme de Verlet. Pour terminer l'article on donnera des commentaires sur les résultats obtenus de cette simulation

II. L'ALGORITHME DE VERLET [1][2]

Un des algorithmes le plus simple à mettre en œuvre et largement utilisé en dynamique moléculaire est l'algorithme de Verlet. Il repose sur le développement de Taylor du vecteur position et du vecteur vitesse. Dans notre cas on va considérer l'algorithme de Verlet à un pas

Si \vec{r} est le rayon vecteur et \vec{v} le vecteur vitesse, les développements de Taylor de ces deux vecteurs sont :

$$\vec{r}(t+h) = \vec{r}(t) + h \frac{d\vec{r}}{dt}(t) + \frac{h^2}{2} \frac{d^2\vec{r}}{dt^2}(t) + h^2 O(h^2) \quad (1)$$

$$\vec{v}(t+h) = \frac{d\vec{r}}{dt}(t+h) = \frac{d\vec{r}}{dt}(t) + h \frac{d^2\vec{r}}{dt^2}(t) + h O(h) \quad (2)$$

En posant $\vec{a}(\vec{r}(t)) = \frac{d^2\vec{r}}{dt^2}(t)$

L'algorithme de Verlet à un pas repose sur les schémas numériques suivants :

$$\vec{r}_{n+1} = \vec{r}_n + h\vec{v}_n + \frac{h^2}{2}\vec{a}_n \quad (3)$$

$$\vec{v}_{n+1} = \vec{v}_n + \frac{h}{2}(\vec{a}_{n+1} + \vec{a}_n) \quad (4)$$

Remarque :

Dans (4), on a remplacé \vec{a}_n par $\frac{1}{2}(\vec{a}_{n+1} + \vec{a}_n)$ pour avoir plus de précision dans le calcul

On procédera donc ainsi [2]:

1. Initialisation du pas h , de la durée T .
2. Initialisation des conditions initiales : $t = 0$, $r = r_0$ et $v = v_0$.
3. Définition de la fonction $\vec{a}(\vec{r})$.
4. Tant que $t \leq T$ faire :
 - a) Calcul de $\vec{a}_0 = \vec{a}(\vec{r})$.
 - b) Nouvelle position : $\vec{r} = \vec{r} + h\vec{v} + \frac{h^2}{2}\vec{a}_0$
 - c) Calcul de $\vec{a}_1 = \vec{a}(\vec{r})$.
 - d) Nouvelle vitesse : $\vec{v} = \vec{v} + \frac{h}{2}(\vec{a}_0 + \vec{a}_1)$
 - e) $t = t + h$.

III. DÉRIVÉE FRACTIONNAIRE CONFORME

Pour avoir des détails sur la dérivée fractionnaire conforme, on peut consulter [3] [4] [5] .

3.1 Définition et propriétés [4]

[6]. Dans notre cas on va prendre la définition suivante :

$$D_\alpha f(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{f(te^{\varepsilon t^{-\alpha}}) - f(t)}{\varepsilon}, \quad 0 \leq \alpha \leq 1, \text{ si } t > 0; \quad D_\alpha f(0) = \lim_{t \rightarrow 0} D_\alpha f(t) \quad (1)$$

On rappelle que :

- Une fonction f est α différentiable au point t si $D_\alpha f(t)$ existe
- $D_\alpha (af(t) + bg(t)) = aD_\alpha f(t) + bD_\alpha (g(t))$ pour tous $a, b \in \mathbb{R}$, f et g sont α différentiable

- $D_\alpha(t^n) = nt^{n-\alpha}$ pour $n \in \mathbb{N}$
- $D_\alpha(C) = 0$ pour toute constante C
- $D_\alpha(f(t)g(t)) = fD_\alpha g(t) + gD_\alpha f(t)$, f et g sont α différentiable
- $D_\alpha\left(\frac{f(t)}{g(t)}\right) = \frac{gD_\alpha f(t) - fD_\alpha g(t)}{g(t)^2}$, f et g sont α -différentiable et $g \neq 0$
- $D_\alpha((f \circ g)(t)) = f'(g(t))D_\alpha g(t)$, f et g sont α différentiable et f est différentiable sur $g(t)$
- Si f est différentiable alors $D_\alpha(f(t)) = t^{1-\alpha}f'(t)$

3.2 Formule de Taylor

3.2.1 Théorème [4]

Soit $\alpha \in]0,1[$ et $n \in \mathbb{N}$. Soient f une fonction $(n+1)$ α différentiable sur $[0, \infty[$ et $s, t \in [0, \infty[$. Alors nous avons :

$$f(t) = \sum_{k=0}^n \frac{1}{k!} \left(\frac{t^\alpha - s^\alpha}{\alpha}\right)^k D_\alpha^k f(s) + \frac{1}{n!} \int_s^t \left(\frac{t^\alpha - \tau^\alpha}{\alpha}\right)^n D_\alpha^{n+1} f(\tau) d_\alpha \tau \quad (2)$$

On note que $D_\alpha^{k+1} f(t) = D_\alpha^k (D_\alpha f(t))$. et $d_\alpha \tau = \tau^{\alpha-1} d\tau$

3.2.2 Remarque

A partir de (2) on peut écrire pour $t>0$ et $h>0$:

$$f(t+h) = \sum_{k=0}^n ((t+h)^\alpha - t^\alpha)^k \frac{1}{k!} D_\alpha^k f(t) + \frac{h^{\alpha(n+1)}}{\alpha^n} \frac{1}{n!} \int_{(1-\frac{(t+h)^\alpha - t^\alpha}{h^\alpha})^\frac{1}{\alpha}}^1 (1-s^\alpha)^n D_\alpha^{n+1} f(((t+h)^\alpha + h^\alpha(1-s^\alpha))^\frac{1}{\alpha}) d_\alpha s \quad (3)$$

En effet :

L'utilisation de (2) nous donne :

$$f(t+h) = \sum_{k=0}^n ((t+h)^\alpha - t^\alpha)^k \frac{1}{k!} D_\alpha^k f(t) + \frac{1}{n!} \int_t^{t+h} \left(\frac{(t+h)^\alpha - \tau^\alpha}{\alpha}\right)^n D_\alpha^{n+1} f(\tau) d_\alpha \tau \quad (4)$$

Si on pose

$$(t+h)^\alpha - \tau^\alpha = h^\alpha (1-\theta^\alpha)$$

$$\tau^\alpha = (t+h)^\alpha - h^\alpha (1-\theta^\alpha)$$

$$\tau^{\alpha-1} d\tau = h^\alpha \theta^{\alpha-1} d\theta$$

Nous avons

$$f(t+h) = \sum_{k=0}^n ((t+h)^\alpha - t^\alpha)^k \frac{1}{k!} D_\alpha^k f(t) + \frac{1}{n!} \int_{(1-\frac{(t+h)^\alpha - t^\alpha}{h^\alpha})^\frac{1}{\alpha}}^1 \left(\frac{h^\alpha(1-\theta^\alpha)}{\alpha}\right)^n D_\alpha^{n+1} f(((t+h)^\alpha + h^\alpha(1-\theta^\alpha))^\frac{1}{\alpha}) h^\alpha \theta^{\alpha-1} d\theta$$

$$f(t+h) = \sum_{k=0}^n ((t+h)^\alpha - t^\alpha)^k \frac{1}{k!} D_\alpha^k f(t) + \frac{h^{\alpha(n+1)}}{\alpha^n} \frac{1}{n!} \int_{(1-\frac{(t+h)^\alpha - t^\alpha}{h^\alpha})^\frac{1}{\alpha}}^1 (1-\theta^\alpha)^n D_\alpha^{n+1} f((t+h)^\alpha + h^\alpha(1-\theta^\alpha)^\frac{1}{\alpha}) d_\alpha \theta$$

On peut écrire alors

$$f(t+h) = \sum_{k=0}^n ((t+h)^\alpha - t^\alpha)^k \frac{1}{k!} D_\alpha^k f(t) + h^{n\alpha} O(h^\alpha) \text{ avec } \lim_{h \rightarrow 0} O(h^\alpha) = 0 \quad (5)$$

3.2.3 Version fractionnaire de la loi de Newton [6]

On définit respectivement la vitesse fractionnaire et l'accélération fractionnaire par :

- $v(t) = D_\alpha^1 x(t)$ (6)
- $a(t) = D_\alpha^2 x(t) = (D_\alpha^1)^2 x(t)$ (7)

Ainsi la version fractionnaire de la loi de Newton s'écrit :

$$F = ma = m D_\alpha^1 v = m (D_\alpha^1)^2 x \quad (8)$$

IV. VERSION FRACTIONNAIRE DE L'ALGORITHME DE VERLET

4.1 Développement de Taylor du rayon vecteur et du rayon vecteur

Si \vec{r} est le rayon vecteur et \vec{v} le vecteur vitesse, les développements de Taylor Fractionnaire de ces deux vecteurs s'écrit d'après (5) :

$$\vec{r}(t+h) = \sum_{k=0}^2 ((t+h)^\alpha - t^\alpha)^k \frac{1}{k!} D_\alpha^k \vec{r}(t) + h^{n\alpha} \vec{O}(h^\alpha)$$

$$\vec{r}(t+h) = \vec{r}(t) + ((t+h)^\alpha - t^\alpha) D_\alpha^1 \vec{r}(t) + ((t+h)^\alpha - t^\alpha)^2 \frac{1}{2} D_\alpha^2 \vec{r}(t) + h^{2\alpha} \vec{O}(h^\alpha)$$

C'est-à-dire : $\vec{r}(t+h) = \vec{r}(t) + ((t+h)^\alpha - t^\alpha) \vec{v}(t) + ((t+h)^\alpha - t^\alpha)^2 \frac{1}{2} \vec{a}(t) + h^{2\alpha} \vec{O}(h^\alpha)$ (9)

$$\vec{v}(t+h) = \sum_{k=0}^1 ((t+h)^\alpha - t^\alpha)^k \frac{1}{k!} D_\alpha^k \vec{v}(t) + h^\alpha \vec{O}(h^\alpha)$$

En posant $\vec{a}(\vec{r}(t)) = D_\alpha^2 \vec{r}(t) = D_\alpha^1 \vec{v}(t)$

$$\text{On a } \vec{v}(t+h) = \vec{v}(t) + ((t+h)^\alpha - t^\alpha) \vec{a}(\vec{r}(t)) + h^\alpha \vec{O}(h^\alpha) \quad (10)$$

4.2 Schéma numérique de l'algorithme de Verlet Fractionnaire

Posons $t_i = ih$ et nous avons :

$$\vec{r}(t_i + h) = \vec{r}(t_i) + ((t_i + h)^\alpha - t_i^\alpha) \vec{v}(t_i) + ((t_i + h)^\alpha - t_i^\alpha)^2 \frac{1}{2} \vec{a}(t_i) + h^{2\alpha} \vec{O}(h^\alpha)$$

$$\vec{r}((i+1)h) = \vec{r}(ih) + (((i+1)h)^\alpha - (ih)^\alpha) \vec{v}(ih) + ((i+1)h)^\alpha - (ih)^\alpha)^2 \frac{1}{2} \vec{a}(ih) + h^{2\alpha} \vec{O}(h^\alpha)$$

$$\vec{r}((i+1)h) = \vec{r}(ih) + ((i+1)^\alpha - i^\alpha) h^\alpha \vec{v}(ih) + \frac{1}{2} ((i+1)^\alpha - i^\alpha)^2 h^{2\alpha} \vec{a}(ih) + h^{2\alpha} \vec{O}(h^\alpha)$$

D'où

$$\vec{r}_{i+1} = \vec{r}_i + ((i+1)^\alpha - i^\alpha) h^\alpha \vec{v}_i + \frac{1}{2} ((i+1)^\alpha - i^\alpha)^2 h^{2\alpha} \vec{a}_i \quad (11)$$

$$\vec{v}(t_i + h) = \vec{v}(t_i) + ((t_i + h)^\alpha - t_i^\alpha) \vec{a}(\vec{r}(t_i)) + h^\alpha \vec{O}(h^\alpha)$$

$$\vec{v}((i+1)h) = \vec{v}(ih) + (((i+1)h)^\alpha - (ih)^\alpha) \vec{a}(\vec{r}(ih)) + h^\alpha \vec{O}(h^\alpha)$$

$$\vec{v}((i+1)h) = \vec{v}(ih) + ((i+1)^\alpha - i^\alpha) h^\alpha \vec{a}(\vec{r}(ih)) + h^\alpha \vec{O}(h^\alpha)$$

D'où

$$\vec{v}_{n+1} = \vec{v}_n + ((i+1)^\alpha - i^\alpha) h^\alpha \vec{a}_i \quad (12)$$

Pour avoir plus de précision on remplace \vec{a}_i par $\frac{\vec{a}_i + \vec{a}_{i+1}}{2}$ dans (11), voir [1]

L'algorithme de Verlet s'écrit :

1. Initialisation du pas h , de la durée T .

2. Initialisation des conditions initiales : $t = 0$, $r = r_0$ et $v = v_0$.

3. Définition de la fonction $\vec{a}(\vec{r})$.

4. Tant que $t \leq T$ faire :

a) Calcul de $\vec{a}_0 = \vec{a}(\vec{r})$.

b) Nouvelle position : $\vec{r} = \vec{r} + ((i+1)^\alpha - i^\alpha) h^\alpha \vec{v} + \frac{1}{2} ((i+1)^\alpha - i^\alpha)^2 h^{2\alpha} \vec{a}_0$

c) Calcul de $\vec{a}_1 = \vec{a}(\vec{r})$.

d) Nouvelle vitesse : $\vec{v} = \vec{v} + \frac{((i+1)^\alpha - i^\alpha) h^\alpha}{2} (\vec{a}_0 + \vec{a}_1)$

e) $t = t + h$.

V. EXEMPLE D'UTILISATION DE L'ALGORITHME DE VERLET FRACTIONNAIRE

On va décrire la variation de la distance entre le Soleil et la Comète de Halley en utilisant l'algorithme ci-dessus.

5.1 Propriété particulière d'un système de deux particules en interaction

Pour un système de deux particules situés en M_1 et M_2 à l'instant t , de masse respectives m_1 et m_2 , en interaction dans un référentiel galiléen $R(O, y, z)$. O est un point fixe de R . R^* est le référentiel barycentrique de centre C , en translation par rapport au référentiel R . Si $f_{2 \rightarrow 1}$ la force que subit M_1 et que $f_{1 \rightarrow 2}$ la force que subit M_2 . Alors

$$\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} (D_\alpha^2 (\overline{M_1 M_2}))_{R^*} = \vec{f}_{1 \rightarrow 2} \quad (13)$$

Si on utilise la version fractionnaire de la loi de Newton.

5.2 Paramétrisation du problème

Notons

M : la masse du soleil

m : la masse du comète de Halley

r : la distance entre le soleil et la comète de Halley

G : la constante gravitationnelle

D'après (13) et [1] et que $M \gg m$ alors

$$\frac{Mm}{M+m} D_\alpha^2 \vec{r} = f_{1 \rightarrow 2} = -GMm \frac{\vec{r}}{r^3} \quad \text{d'où} \quad D_\alpha^2 \vec{r} = -GM \frac{\vec{r}}{r^3} \quad (13)$$

5.3 Utilisation de l'algorithme de Verlet fractionnaire

On va décrire le mouvement de la comète dans plan (O, x, y) et on prend comme point de départ le point le plus éloigné (l'aphélie) comme point de départ. On a alors (voir [1]) $x_0 = r_{\max}$, $v_{x_0} = 0$, $y_0 = 0$, et $v_{y_0} = v_{\min}$. A partir des résultats bien connus, nous avons $r_{\max} = 5.28 \times 10^{12} m$ et $v_{\min} = 9.13 \times 10^2 m.s^{-1}$. L'application de l'algorithme de Verlet fractionnaire à ce problème nous donne

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= x^{(k)} + ((k+1)^\alpha - k^\alpha) \tau^\alpha v_x^{(k)} + \frac{1}{2} ((k+1)^\alpha - k^\alpha)^2 \tau^{2\alpha} g_x^{(k)} \\ v_x^{(k+1)} &= v_x^{(k)} + \frac{((k+1)^\alpha - k^\alpha) \tau^\alpha}{2} [g_x^{(k+1)} + g_x^{(k)}] \\ y^{(k+1)} &= y^{(k)} + ((k+1)^\alpha - k^\alpha) \tau^\alpha v_y^{(k)} + \frac{1}{2} ((k+1)^\alpha - k^\alpha)^2 \tau^{2\alpha} g_y^{(k)} \\ v_y^{(k+1)} &= v_y^{(k)} + \frac{((k+1)^\alpha - k^\alpha) \tau^\alpha}{2} [g_y^{(k+1)} + g_y^{(k)}] \end{aligned} \quad (14)$$

L'indice de pas du temps est donné entre parenthèses en exposant afin de le distinguer de l'indice de la composante x ou de l'indice de la composante y . Les composants de l'accélération sont donnés par

$$\begin{aligned} g_x &= -\kappa \frac{x}{r^3} \\ g_y &= -\kappa \frac{y}{r^3} \end{aligned} \quad (15)$$

avec $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ et $\kappa = GM$

Nous pouvons utiliser des unités plus spécifiques dans les calculs, par exemple, 76 ans comme unité de temps et le demi-grand axe de l'orbite $a = 2,68 \times 10^{12}$ m comme unité de longueur. Alors on a $r_{\max} = 1.97$, $v_{\min} = 0.816$, $\kappa = 39.5$

5.4 Programmation avec le langage MATLAB

Le programme suivant est la mise en œuvre de l'algorithme décrit ci-dessus pour la comète de Halley pour $\alpha = 1; 0,8; 0,7; 0,6; 0,4$

```
close all
clc
clear
n=100000 %input ('nombre de pas n=')
alpha_mat = [1 0.8 0.7 0.6 0.4];
[lg , col] = size(alpha_mat);
res = zeros(col,n);
t = zeros(1,n);
x = t;

y = t;
r = t;
vx = t;
vy = t;
gx = t;
gy = t;
h = 10/n;
k = 39.478428;
% Initialisation du problème
x(1) = 1.966843;
r(1) = x(1);
vy(1) = 0.815795;
gx(1) = -k / (r(1)^2);
for a = 1 : col
alpha = alpha_mat(a);
for i = 1 : n-1
t(i+1) = h * (i+1);
x(i+1) = x(i) + (((i+1)^alpha)-(i^alpha))* (h^alpha)*vx(i) + (((i+1)^alpha)-
(i^alpha))^2)* ((h^(2*alpha))/2)*gx(i);
```

```

y(i+1) =y(i) +(((i+1)^alpha)-(i^alpha))* (h^alpha)*vy(i) +((((i+1)^alpha)-
(i^alpha))^2)* ((h^(2*alpha))/2)*gy(i) ;
r2 = x(i+1)^2 + y(i+1)^2;
r(i+1) = sqrt(r2);
r3 = r2 * r(i+1);
gx(i+1) = -k * x(i+1) / r3;
gy(i+1) = -k * y(i+1) / r3;
vx(i+1) = vx(i) + (((i+1)^alpha)-(i^alpha))* (h^alpha)* (gx(i+1)+gx(i))/2;
vy(i+1) = vy(i) +((((i+1)^alpha)-(i^alpha))* (h^alpha) * (gy(i+1)+gy(i))/2;
end
res(a,:) =r;
end
for l = 1 : col
plot(t,res(l,:));hold all
end
legend('\alpha=1','0.8','0.7','0.6','0.4');
grid on

```

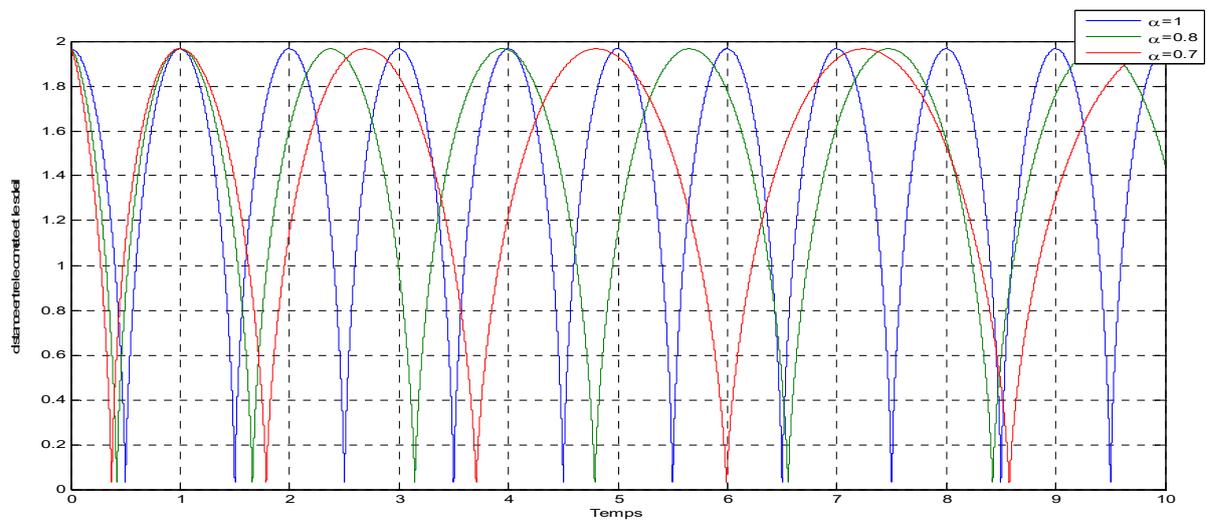


Figure1 : Variation de la distance entre le soleil et la comète de Halley ,calculée à partir de l'algorithme ci-dessus, si l'ordre de la dérivée fractionnaire $\alpha = 1; \alpha = 0,8; \alpha = 0,7$

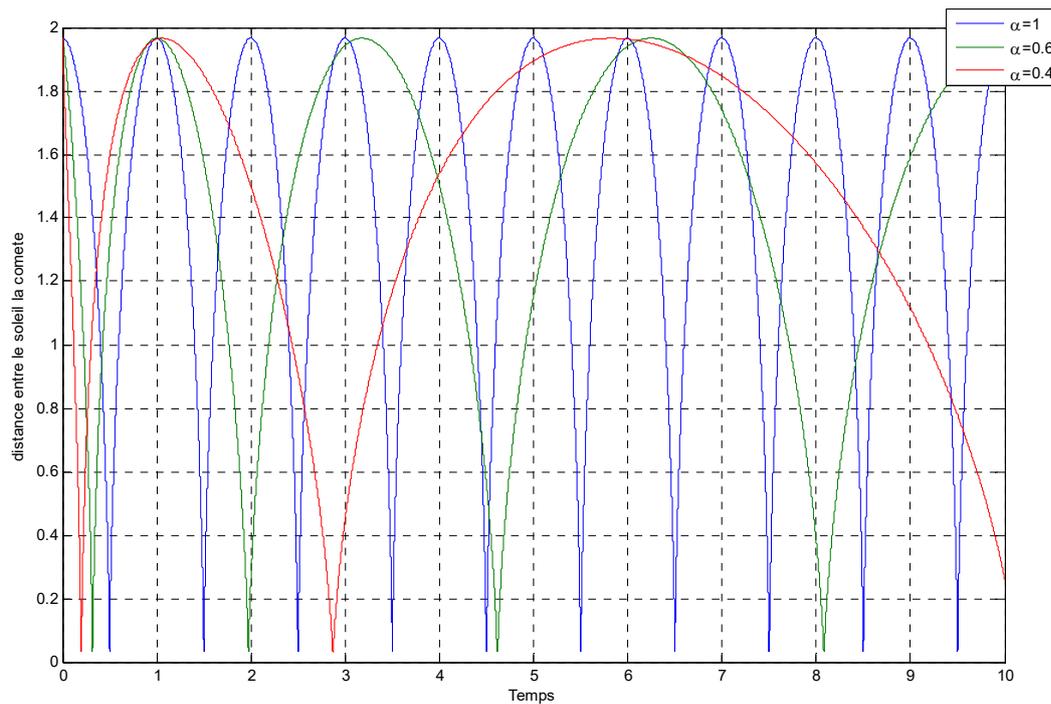


Figure 2 : Variation de la distance entre le soleil et la comète de Halley ,calculée à partir de l'algorithme ci-dessus, si l'ordre de la dérivée fractionnaire $\alpha = 1; \alpha = 0,6; \alpha = 0,4$

En observant sur les deux figures ci-dessus. On constate le temps, pour que la comète revienne près du soleil augmente lorsque l'ordre de la dérivée diminue. La convergence de cette valeur avec celle de la littérature [1] peut être ajuster par l'ordre de la dérivée qui intervient dans le calcul. Ce qui justifie partiellement notre résultat

VI. CONCLUSION

On a vu l'influence de la dérivée fractionnaire dans l'algorithme de Verlet. Dans les prochaines études, en particulier, les dynamiques moléculaires on verra son impact sur les résultats attendus.

REFERENCE

- [1] Tao Pang . An Introduction to Computational Physics Second Edition. University of Nevada, Las Vegas. Cambridge University Press . © T. Pang 2006
- [2] Jimmy RousseL . Cours d'introduction à l'analyse numérique – femto-physique.fr. Copyright © 2021 Jimmy Roussel
- [3] R. Khalil , M. Al Horani , A. Yousef, M. Sababheh. A new fractional derivative with classical properties .Department of Mathematics, The University of Jordan, Al Jubaiha, Amman 11942, Jordan- Department of Basic Sciences, Princess Sumaya University For Technology, Al Jubaiha, Amman 11941, Jordan-cDepartment of Mathematics, Sharjah University, Sharjah, United Arab Emirates
- [4] Douglas R. Anderson. Taylor's Formula and Integral Inequalities for Conformable Fractional Derivatives .Journal of American Mathematical Society. October 2017
- [5] Won Sang Chung. Fractional Newton mechanics with conformable fractional derivative
- [6] Department of Physics and Research Institute of Natural Science, College of Natural Science, Gyeongsang National University, Jinju 660-701, Republic of Korea

- [7] Thabet Abdeljawad. On conformable fractional calculus. Department of Mathematics and General Sciences, Prince Sultan University-Riyadh-KSA, Saudi Arabia. Department of Mathematics, Çankaya University, 06530, Ankara, Turkey.