Environnement : climat et santé

François Sauvageot
Maître de conférences à l'Université Paris 7
Animateur à l'IREM

Ozone

- On va s'intéresser à des problèmes issus de la modélisation de la pollution, en particulier l'ozone troposphérique (≤15km).
- Le thème choisi est celui des problèmes d'analyse numérique et nous verrons sur un exemple très simple comment amener les élèves à améliorer la méthode d'Euler.

Cinétique chimique

- La cinétique d'une réaction est donnée par une constante de réaction k. Par exemple la réaction $O + O_2 \xrightarrow{k} O_3$ est décrite, cinétiquement par l'équation

$$\frac{d}{dt}[O_3] = k[O].[O_2] = -\frac{d}{dt}[O] = -\frac{d}{dt}[O_2]$$

- Dans un modèle complexe de chimie, il y aura plusieurs équations et la cinétique sera donnée par un bilan de ces réactions.

Chimie de l'Ozone (O_3)

- Un modèle élémentaire en pollution de l'air en troposphère inclut ces trois réactions :

$$\mathbf{O + O_2 \xrightarrow{k_1} O_3}$$
$$\mathbf{NO + O_3 \xrightarrow{k_2} O_2 + NO_2}$$
$$\mathbf{NO_2 + h\nu \xrightarrow{k_3} NO + O}$$

- Par ailleurs, l'oxygène O_2 est tellement présent dans l'atmosphère qu'on peut considérer sa concentration comme constante. Quant au monoxyde d'azote, il faut tenir compte d'une source supplémentaire.

Bilan cinétique

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}[O] = k_3[NO_2] - k_1[O]$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}[NO] = k_3[NO_2] - k_2[NO].[O_3] + s$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}[NO_2] = k_2[NO].[O_3] - k_3[NO_2]$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}[O_3] = k_1[O] - k_2[NO].[O_3]$$

Ordres de grandeur

- k_1 est grand (environ 10^5), k_2 est petit (environ 10^{-16}) et k_3 dépend de la période, diurne ou nocturne (entre 10^{-2} et 10^{-40}).
- C'est parce que k_1 inclut la concentration en oxygène O_2 qu'il est nettement plus grand que les autres, et ce qui rend le système d'équations différentielles « raide ».

Limites du schéma d'Euler

- Considérons l'équation $y'=-\lambda y$, sur $[0,T]$, avec $y(0)=1$ et λ positif.
- Sa solution $y(t)=e^{-\lambda t}$, tend vers 0 en l'infini.
- Le schéma d'Euler (explicite) fournit comme approximation, avec un pas τ, $y(n\tau)\approx(1-\lambda\tau)^n$.
- Pour que cette suite converge vers 0, il faut $0<\lambda\tau<2$, ce qui limite le pas d'intégration.

Régimes transitoire et permanent.

- La solution de l'équation précédente, pour T=1, varie très rapidement pour t dans un intervalle [0,u] (régime transitoire) puis est presque nulle sur l'intervalle [u,1] (régime permanent).
- Il serait donc agréable de pouvoir prendre un pas d'intégration petit au départ puis très grand. Le schéma d'Euler (explicite) ne le permet pas.

La « raideur » au lycée

- Au lieu d'approcher $y(n\tau)$ par $y((n-1)\tau)-\tau\lambda y((n-1)\tau)$, on écrit

$$y(n\tau)\approx y((n-1)\tau)-\tau\lambda y(n\tau)$$

et il vient

$$y(n\tau)\approx 1/(1+\tau\lambda)^n.$$

- On constate qu'il n'y a plus de problème de limitation du pas !

Prédiction du temps

- Notre second thème est celui du temps.
- Depuis Lorenz on sait qu'il est utopiste de vouloir prévoir le temps très à l'avance.
- On parle de nos jours de chaos. C'est en fait un problème de « sensibilité aux conditions initiales » ainsi que l'a étudié Poincaré pour les systèmes dynamiques.

Temps et climat

- L'atmosphère est un système chaotique : toute erreur sur l'état initial induit des changements radicaux. On parle par exemple d'effet « papillon ».
- Pour cette raison il n'est pas raisonnable à l'heure actuelle d'espérer prévoir à plus de quelques jours (entre 4 et 10) le temps qu'il fera.
- En ce qui concerne le climat, on peut se contenter d'évaluations statistiques et de dégager des attracteurs du système. Mais contrairement à la prédiction du temps, il faut modéliser les interactions océan-atmosphère, les glaces et la biosphère.

Le chaos et les boules

- Imaginons une bille placée au sommet d'une colline. Une différence infiniment petite dans les conditions initiales va induire une différence de comportement qualitativement sensible : rouler d'un côté ou de l'autre de la colline. On parle de sensibilité aux conditions initiales.
- Pour comprendre l'effet sur un gaz, considérons un billard avec de nombreuses boules, toutes immobiles. L'une d'elles est poussée dans une direction, en frappe une autre, est déviée, puis va en frapper une autre etc. Une légère différence dans l'angle de départ fera qu'à terme une bille ne sera pas touchée et une autre le sera. C'est un système déterministe (au sens de la mécanique newtonienne), mais imprévisible : c'est ça qu'a compris Poincaré.
- En particulier la mécanique newtonienne n'est réversible que pour un système complètement isolé, ce qui n'est jamais le cas : c'est comme si tout système oubliait instantanément d'où il vient !

Un TPE sur le chaos

- On considère l'équation
$$x' = rx(1-x)$$
ou encore la suite
$$x_{n+1} = rx_n(1-x_n)$$
- Avec $0 \leq r \leq 4$, l'intervalle [0,1] est stable et, selon les valeurs de r, on a convergence ($r \leq 3$), des comportements périodiques ($3 < r \leq 3.57$) ou du chaos ($r > 3.57$).

Un peu de géométrie

- On peut aussi mettre des boules dans un plan, par exemple des miroirs sphériques en des points d'un réseau.
- Il faut ensuite calculer dans un exemple simple les réflexions successives d'un rayon lumineux parti de l'origine avec un angle α.
- Le calcul peut se faire à la main ou avec une calculatrice, grâce au principe de Fermat ; on peut également se contenter d'un dessin.
- C'est intéressant car on constate la sensibilité aux conditions initiales, mais aussi une certaine stabilité : les résultats sont divergents seulement à partir d'un certain nombre de rebonds … et c'est pourquoi on peut prédire le temps sur quelques jours !

Pythagore et Brown

- On peut aussi, à partir de la démonstration « optimale » du théorème de Pythagore, définir une courbe remplissant le triangle et telle que
$$||x(t)-x(u)||^2 \leq |t-u|.$$
- La construction met en jeu la représentation dyadique des nombres.
- Cette courbe permet d'avoir une construction du mouvement Brownien : c'est l'inégalité précédente qui est à la base des changements d'échelles brownien et du $\sqrt{n}$ dans le théorème Centrale-Limite.

Dynamique des populations

- Le modèle utilisé pour étudier le chaos est en fait un modèle initialement étudié dans le cadre de la dynamique des populations.
- On cherche tout simplement à prédire la population à une date donnée.

Malthus et Verlhust

- Le modèle étudié pour le chaos est en fait la réponse de Pierre-François Verlhust à Thomas Malthus.
- Pour Malthus, on a un modèle exponentiel donné par $P_{n+1}-P_n=(b-d)P_n$.
- Pour Verlhust, il faut modéliser la compétition pour les ressources :
$$P_{n+1}-P_n=kP_n-aP_n^2.$$

TP et DM en TS

- Le modèle de Malthus peut s'écrire sous forme différentielle et constitue une illustration pour introduire l'exponentielle.
- Le modèle de Verlhust est un bon exercice, pour des k bien choisis, pour étudier les suites récurrentes.

Quelques activités critiques

- En étudiant la population mondiale et en ajustant certains modèles, on est conduit à des aberrations.
- On peut ainsi trouver que la population tend vers l'infini (Doomsday model) …

Génétique des populations

- Que ce soit en épidémiologie ou en génétique, on s'intéresse à la propagation de virus, de gènes etc. pour comprendre comment des maladies se diffusent.

Propagation du VIF

- Un modèle basé sur celui de Verlhust est le suivant :

$$dX/dt = b(X+Y)-mX-a(X+Y)X-sXY/(X+Y)$$
$$dY/dt = sXY/(X+Y)-mY-a(X+Y)Y-vY$$

- On voit apparaître des termes de naissance (b), de mort naturelle (m), de compétition (a), de transmission par morsure (s) et de mort par le virus (v).
- Lorsque $b+v \geq s$, la maladie disparaît ($Y \rightarrow 0$) et la population tend vers l'équilibre de Verlhust.
- Lorsque $b+v<s$ et $bs \leq (m+v)(s-v)$, la population s'éteint.
- Enfin lorsque $b+v<s$ et $bs>(m+v)(s-v)$, la population atteint un équilibre : X et Y tendent vers des valeurs non nulles.

Loi de Hardy-Weinberg

- Quand on apparie les gènes aléatoirement d'une génération à l'autre, la proportion des allèles se stabilise dès la première génération.
- Cette loi a été établie par un mathématicien et un biologiste.

DM sur la mucoviscidose

- Le cas de la mucoviscidose peut paraître paradoxal puisqu'elle est portée par un gène récessif et devrait diminuer puis s'éteindre.
- Il n'en est rien : en fait les porteurs sains bénéficie d'un avantage dans la sélection et se reproduisent plus que les personnes non atteintes.

TP sur les petites populations

- En partant d'une simulation de la loi de Poisson, on peut étudier les phénomènes d'extinction. Ce phénomène permet également de rendre compte de la sélection naturelle des gènes via des comportements migratoires.
- La simulation est simple : chaque individu d'une génération donne naissance à un nombre aléatoire d'individus de la génération suivantes. Par exemple selon une loi de Poisson.
- La question à étudier est : combien y a-t-il de personnes à la $n^{ème}$ génération ? Y a-t-il extinction au bout d'un moment ?

Expérimentations

- Pour pouvoir « jouer » avec le variables aléatoires, il faut savoir les simuler sur une calculatrice.
- Le principe est simple : on tire au hasard un nombre en 0 et 1, selon une loi uniforme, et on utilise la fonction de répartition F pour déterminer une valeur qui, elle suivra la loi qui admet F comme fonction de répartition.
- En termes mathématiques, si

$$F^{\leftarrow}(t) = \inf\{x \in \mathbf{R} \mid F(x) \geq t\}$$

alors, si U admet une loi uniforme sur [0,1] et X admet F comme fonction de répartition :
$F^{\leftarrow}(U) \sim X$ et $F(X) \sim U$

Simulation d'une loi de Poisson

Création d'une liste « loi »

```
poisson(λ,ε)
Prgm
ClrIO
newList(0)→loi
e^(-λ)→p
p→f
0→k
While  f<1-ε
k+1→k
floor(f/ε)*ε→loi[k]
p*λ/k→p
f+p→f
EndWhile
1→loi[k+1]
EndPrgm
```

Utilisation pour la simulation d'une v.a.

```
ceiling(1/ε)→pas
rand(pas)/pas→y
0→k
While  loi[k+1]<y
k+1→k
EndWhile
Disp k
```

- **k suit une loi de Poisson de paramètre λ, à ceci près que les valeurs pour lesquelles $P(k \geq n) \leq \varepsilon$ sont « concentrées » en la valeur minimale.**
- Exemple : $\lambda=1$, $\varepsilon=0.001$
- ***X*** prend ses valeurs dans {0,1,2,3,4,5}.
- loi : 0.367, 0.735, 0.919, 0.981, 0.996, 1.
- $P(X=0) \approx 0.367$, $P(X=1) \approx 0.368$, $P(X=2) \approx 0.184$, $P(X=3) \approx 0.072$, $P(X=4) \approx 0.015$, $P(X=5) \approx 0.004$.