Les modèles

Exemple 1 : le modèle de box pour un système environnemental

Beaucoup de parties de l'environnement peuvent être comprises, mais la complexité des systèmes nécessite des modèles. Un système est caractérisé par les conditions aux limites, les relations internes et externes. Dans un modèle, on ne tient compte que des processus internes.

On peut distinguer différents types de modèles :
- Modèle physique : représentation physique du système en question à une échelle plus petite,
- Modèle conceptuel : modèle simplifié, description abstraite du système qui définit ses limites, relations internes et externes,
- Modèle mathématique : modèle conceptuel traduit en équations mathématiques,
- Modèle numérique (sur ordinateur) – solution numérique du modèle mathématique.

On peut comparer les modèles à une carte géographique, qui peut être plane, miniaturisée, simplifiée, expliquée, mais il n'est pas possible d'utiliser la même carte à chaque but. Donc il faut choisir la bonne dans chaque cas de figure.

Exemple: Modèle physique du flux de vent dans une ville (université de Hambourg) :

Avantages des modèles

Les modèles résument notre compréhension de processus dans un certain environnement. Ils permettent de comparer le modèle avec des données et de mettre ainsi à l'épreuve notre compréhension actuelle ainsi que de tester de nouvelles idées. A partir d'une expérience locale, on peut généraliser à un domaine plus large. Des modèles 4D peuvent apporter des informations que des expériences ne peuvent pas fournir. Ils permettent des prédictions pour le futur de systèmes très complexes (temps, climat,…) et de jouer sur des scénarios possibles (que se passerait-il, si…).

On peut « allumer » ou éteindre différents facteurs dans les simulations et tester les réactions à différents facteurs (2 x CO_2, 4 x CO_2, plus ou moins d'aérosols,…).

Limites des modèles

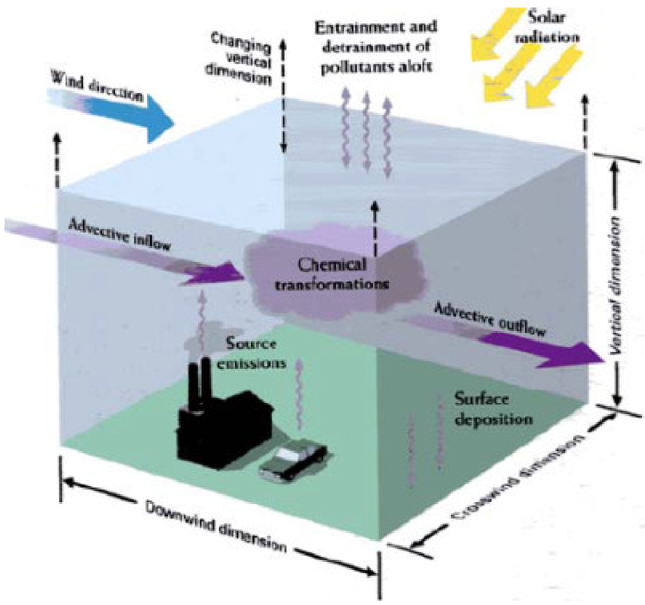
Des modèles ne sont jamais une description parfaite de la réalité. Ils ne peuvent représenter que les connaissances actuelles. Tous les processus et dépendances ne peuvent pas être tenus en compte. La résolution en temps et espace est limitée par le temps de calcul et certaines approximations sont inévitables. Les conditions aux limites et initiales sont décisives, mais souvent elles ne sont pas parfaitement connues. Il y a le risque qu'on obtient des résultats apparemment corrects, mais pour des fausses raisons. Finalement les modèles sont seulement aussi bons que la personne qui les écrit et manipule.

Différentes structures de modèles

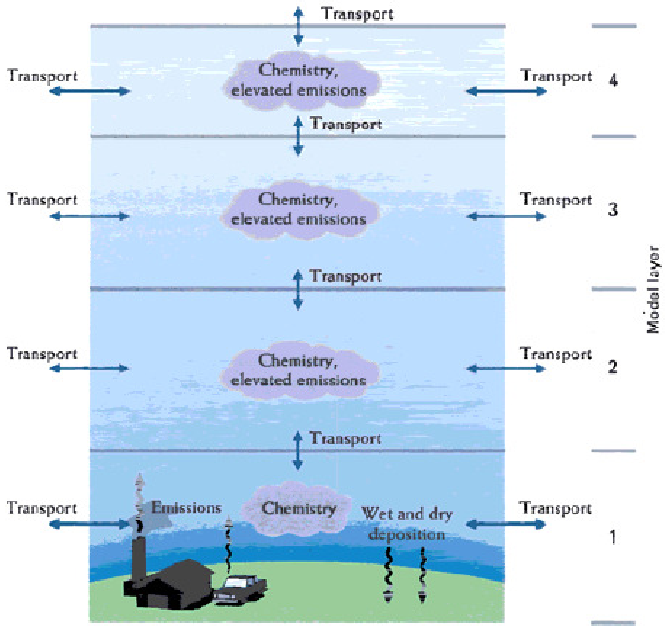
Considérons des modèles dynamiques du système environnemental, qui décrit l'évolution temporaire d'un système de variables $y_i(t)$.

Il existe alors

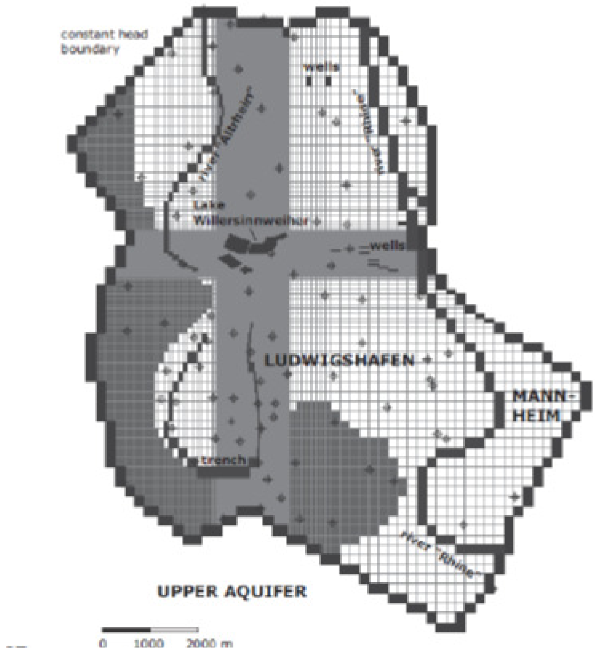
1. les modèles sans structure spatial détaillée, les modèles dans un box (0 dimension).
   - Modèle à un box (une ou plus de variables, linéaires ou non-linéaires)
     Exemple : Concentration c(t) d'un produit chimique dans un volume d'air bien mélangé en fonction du temps.



   - Modèle à n box (n modèle à un box couplés)
   - Modèle à paramètres inter-dépendants
   - Description par équations différentielles ordinaires
2. les modèles avec une extension spatiale continue
   - A 1 dimension (p.ex. modèle vertical de l'atmosphère ou de lacs)
     Exemple : Profile résolu en direction verticale de la concentration c(z,t) d'un produit chimique dans une colonne d'air (variables : temps, altitude).



- A 2 dimensions (p.ex. des couches horizontales (nuages), sections verticales)
  Exemple : le flux horizontal v(x,y,t) de la nappe phréatique transportant la concentration c(x,y,t) (coordonnées indépendantes : temps, coordonnées E et N)



- A 3 dimensions (extension spatiale complète des systèmes étudiés)
  Exemple : modèle général d'une distribution globale d'un système de variables y(x,y,z,t) dans l'atmosphère et dans les océans (variables indépendantes : temps, altitude, E et N)

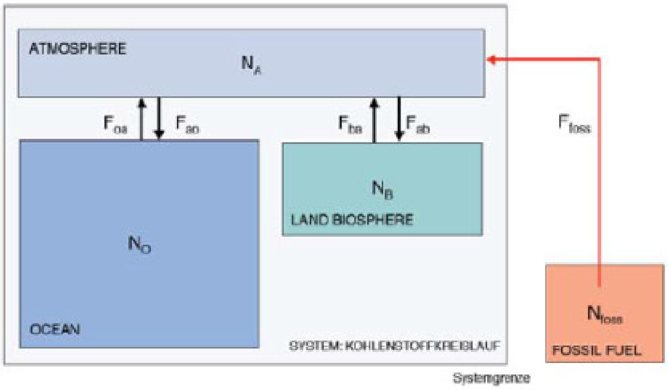
- Solution numérique sur réseau discret (connecté à un modèle de box).

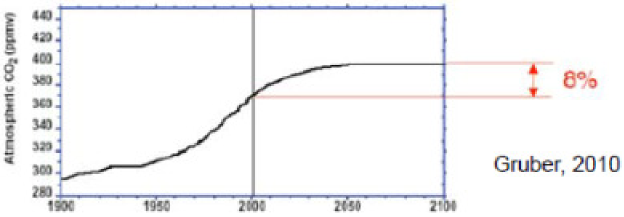
Pourquoi utiliser des modèles dans un box ?

On utilise en effet volontiers des modèles dans un box, même si un modèle complet à 3D peut fournir la description la plus complète. Ces modèles peuvent donner des idées sur le comportement caractéristique du système sans grand effort. Souvent on peut même les résoudre analytiquement et ils sont plus adaptés si seulement peu de données sont accessibles. Typiquement, les problèmes suivants peuvent être décrits par des modèles dans un box : la réaction de substances dans un compartiment simple, les produits chimiques dans un lac (contamination, nutrition, oxygène etc.), le nitrate dans la nappe phréatique (temps de résidence, concentration dans les puits), accumulation de gaz anthropogénique de trace dans l'atmosphère, le cycle carbonique (le CO_2 dans l'atmosphère, les océans et la biosphère).

Exemple : modèle à 3 box du cycle carbonique

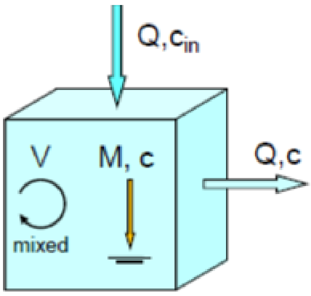
Du combustible d'origine fossile C est relâché dans l'atmosphère (box 1). L'atmosphère a des échanges avec l'océan (box 2) et la biosphère (box 3). D'où la question : si l'on veut stabiliser le niveau de CO_2 dans l'air à au maximum 8% au-dessus du niveau actuel, comment doit-on changer les émissions ?





Modèle à un box

Modèle simple pour une substance dans un système environnemental : réservoir mélangé plein avec entrée, sortie et réaction du premier ordre.



Equilibre de masse :

$$\frac{dM}{dt} = Qc_{in} - Qc - k_r M$$

$$\frac{dc}{dt} = k_f c_{in} - (k_f + k_r)c = k_f c_{in} - k_{tot} c$$

avec

V: volume du système $[L^3]$
Q: taux de flux $[L^3 T^{-1}]$
$k_f = Q/V$: taux de rinçage $[T^{-1}]$
M: Masse de la substance [M]
$c = M/V$: concentration $[ML^{-3}]$
c_{in}: concentration initiale $[ML^{-3}]$
k_r: constante de réaction $[T^{-1}]$

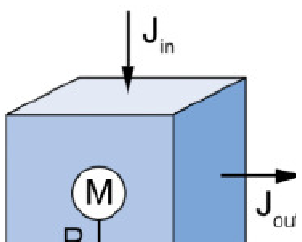
C'est une équation différentielle ordinaire linéaire et inhomogène au premier ordre. La solution générale pour des coefficients constants est (c_i, k_f, k_r = const) et $c(0) = c_0$:

$$c(t) = (c_0 - c_\infty)e^{-k_{tot}t} + c_\infty$$

avec la concentration stationnaire :

$$c_\infty = \frac{k_f}{k_{tot}} c_{in} = \frac{k_f}{k_f + k_r} c_{in}$$

Généralisation : les entrées et sorties ne sont plus liées à un flux de volume d'un fluide. L'entrée et la sortie de masses par intervalle de temps seront appelées J_{in} et J_{out} :



Equilibre de masse :

$$\frac{dM}{dt} = J_{in} - J_{out} - kM = J - kM$$

$$\frac{dc}{dt} = \frac{J}{V} - kc \qquad J = J_{in} - J_{out}$$

avec
V: volume du système $[L^3]$
M: Masse de la substance [M]
c = M/V: Concentration $[ML^{-3}]$
J_{in}: Entrée de la substance $[MT^{-1}]$
J_{out}: Sortie de la substance $[MT^{-1}]$
k: Taux total de perte du premier ordre $[T^{-1}]$.

C'est une équation différentielle ordinaire linéaire et inhomogène au premier ordre. La solution générale pour des coefficients constants est (J,k = const) et $c(0) = c_0$:

$$c(t) = (c_0 - c_\infty)e^{-kt} + c_\infty$$

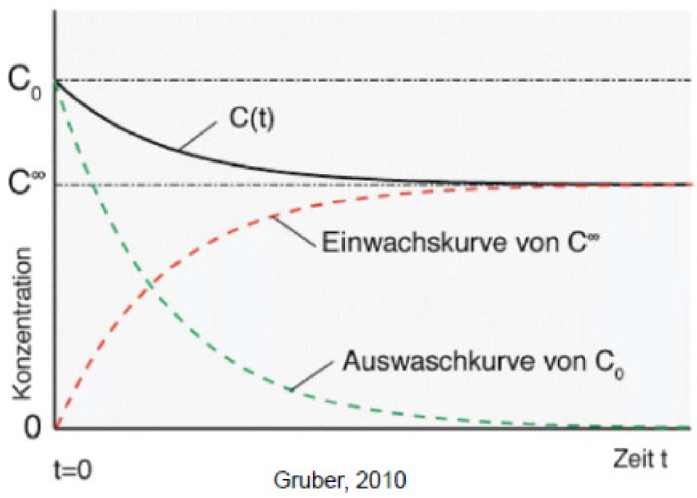
avec la concentration stationnaire :

$$c_\infty = \frac{J}{kV} = \frac{j}{k} \quad \text{with} \quad j = \frac{J}{V}\left[ML^{-3}T^{-1}\right]$$

Résultats : évolution temporaire

Solution pour une entrée constante :

$$c(t) = (c_0 - c_\infty)e^{-k_{tot}t} + c_\infty = \underbrace{c_0 e^{-k_{tot}t}}_{\text{Dilution de } c_0} + \underbrace{c_\infty\left(1 - e^{-k_{tot}t}\right)}_{\text{croissance de } c_\infty}$$

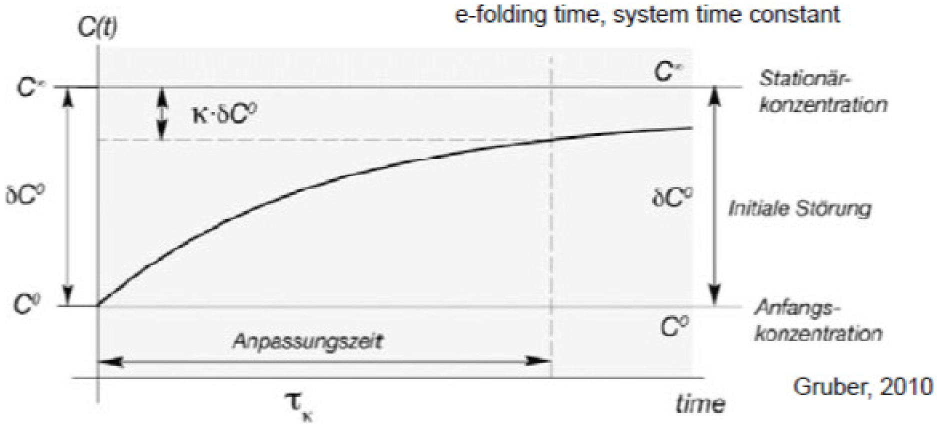


Temps d'équilibration : à quelle vitesse est-ce que le système atteint l'état stationnaire (cela dépend de la déviation par rapport à c_0) ?

$$\delta c(\tau_\kappa) = |c(t) - c_\infty| = \kappa \delta c_0 = \kappa |c_0 - c_\infty| \quad \Rightarrow \quad e^{-k_{tot}\tau_\kappa} = \kappa$$

$$\tau_\kappa = \frac{-\ln\kappa}{k_{tot}} \qquad \text{E.g.:} \quad \tau_{1/2} = \frac{\ln 2}{k_{tot}} \qquad \boxed{\tau_{1/e} = \frac{1}{k_{tot}}} \qquad \tau_{0.05} \approx \frac{3}{k_{tot}}$$

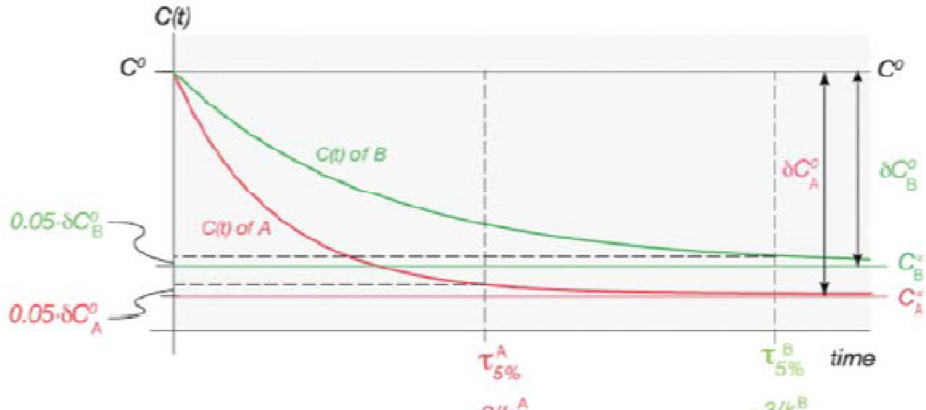
e-folding time, system time constant



Gruber, 2010

L'évolution temporaire des concentrations de la substance réactive A et de la substance inerte B (k_{rB}) peut être observée. Si le temps de 5% de B est deux fois celui de A, quelle est alors la constante de taux de réaction k_r de A ?

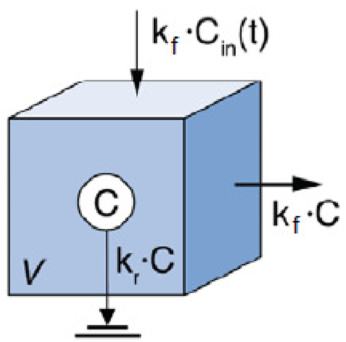
$$\tau_{0.05,A} \approx \frac{3}{k_f + k_r} = \frac{1}{2}\frac{3}{k_f} \quad \Rightarrow \quad k_r = k_f$$



3ruber, 2010

Modèle à un box avec une entrée variable

Généralisation : l'entrée externe (forcée) peut dépendre du temps



Equilibre de masse :

$$\frac{dc}{dt} = k_f c_{in}(t) - k_{tot} c$$

ec

volume du système [L^3]

= Q/V: taux de rinçage [T^{-1}]

:) = M/V: concentration [ML^{-3}]

$c_{in}(t)$: concentration initiale [ML^{-3}]
k_r: constante de réaction [T^{-1}].

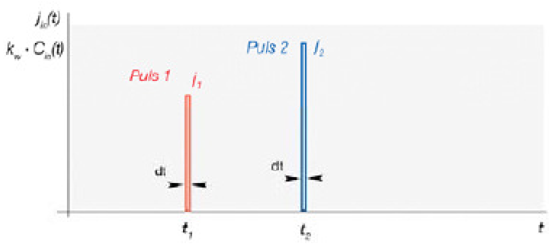
C’est une équation différentielle ordinaire linéaire et inhomogène au premier ordre. Le terme inhomogène dépend du temps. Solution générale avec des constantes de réaction constantes (k_f, k_r = const.) et $c(0) = c_0$:

$$c(t) = \underbrace{c_0 e^{-k_{tot}t}}_{\text{decay of } c_0} + \underbrace{\int_0^t k_f c_{in}(t') \cdot e^{-k_{tot}(t-t')} dt'}_{\text{ingrowth to } c_\infty(t)}$$

avec l’état « stationnaire » dépendant du temps :

$$c_\infty(t) = \frac{k_f}{k_{tot}} c_{in}(t) .$$

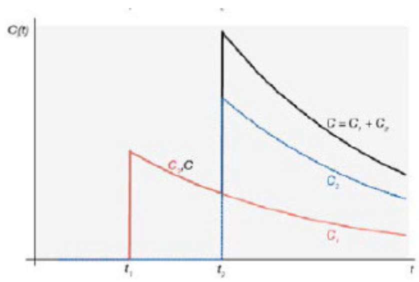
C’est la concentration d’équilibre pour une entrée momentanée.



Terme de croissance :

$$\underbrace{\int_0^t k_f c_{in}(t')}\cdot \underbrace{e^{-k_{tot}(t-t')} dt'}$$

Entrées passées, poids selon l’âge t – t’



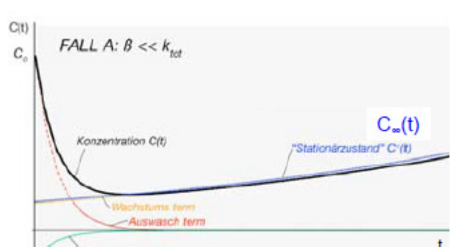
Superposition de courbes de décroissance d’une série d’évènements d’entrée

Cas d’une entrée augmentant exponentiellement : $c_{in}(t) = c_{in}^0 \cdot e^{\beta t}$ (« exponential forcing »).

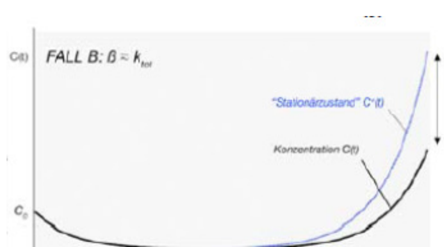
$$c(t) = c_0 e^{-k_{tot}t} + \int_0^t k_f c_{in}^0 \cdot e^{\beta t'} \cdot e^{-k_{tot}(t-t')} dt'$$

$$c(t) = c_0 e^{-k_{tot}t} + \frac{k_f c_{in}^0}{k_{tot} + \beta}\left(e^{\beta t} - e^{-k_{tot}t}\right) \quad \text{for } \beta \neq -k_{tot} .$$

Forcing lent (adiabatique) : $\beta << k_{tot}$



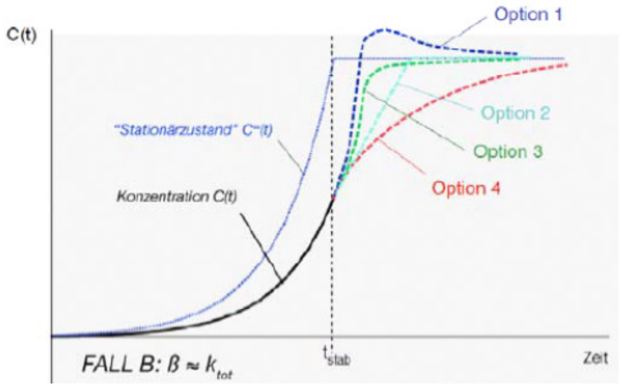
Forcing augmentant rapidement : $\beta \approx k_{tot}$



Le système suit le forcing.

Le système est en retrait derrière le forcing.

Que se passera-t-il si l'entrée se stabilise (p.ex. en gardant les émissions de CO_2 constantes) ?



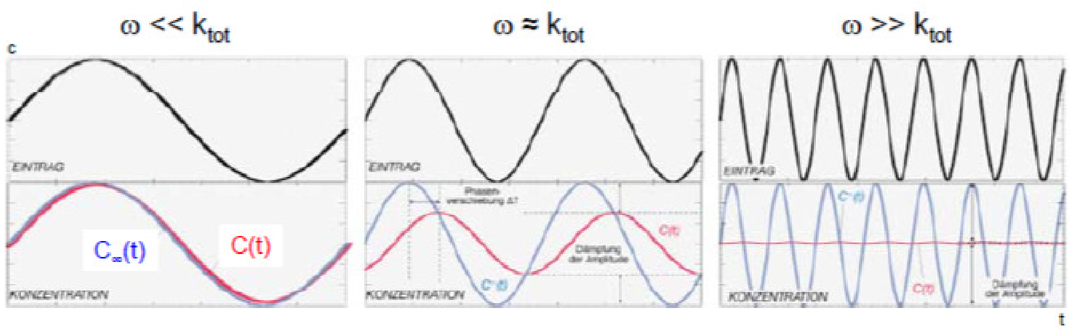
Réponse : option 4
Après le temps de stabilisation t_{stab}, on retrouve le cas d'une entrée constante, donc une croissance exponentielle jusqu'à équilibre. Une stabilisation des émissions ne stabilise donc pas immédiatement la concentration dans le système.

Cas d'un forcing périodique

Une entrée oscillant périodiquement s'écrit : $c_{in}(t) = c_{in}^0 + c_{in}^1 \cdot \sin(\omega t)$.

$$c(t) = c_0 e^{-k_{tot}t} + \int_0^t k_f \left[c_{in}^0 + c_{in}^1 \cdot \sin(\omega t') \right] \cdot e^{-k_{tot}(t-t')} dt'$$

Donc
$$c(t) = \underline{\frac{k_f c_{in}^0}{k_{tot}}} + \left(c_0 - \frac{k_f c_{in}^0}{k_{tot}} \right) e^{-k_{tot}t} + \underline{\frac{k_f c_{in}^1}{\sqrt{\omega^2 + k_{tot}^2}} \sin(\omega t - \varphi)} + \frac{k_f c_{in}^1 \omega}{\omega^2 + k_{tot}^2} e^{-k_{tot}t}$$
, avec soulignés en rouge les termes restants pour $k_{tot}\, t >> 1$ et $\phi = \arctan(\omega/k_{tot})$.



Résumé

Les modèles sont des représentations simplifiés de systèmes complexes. Il existe différents types de modèles : physiques, conceptuels, mathématiques et numériques. Les modèles numériques peuvent être à 0-D (modèle de box), 1-D, 2-D ou 3-D. Les modèles de box peuvent aider à analyser les caractéristiques d'un système.

Modèle à un box ou modèle de réacteur mélange: donne une équation différentielle ordinaire linéaire et inhomogène, approche exponentielle à la concentration stationnaire (équilibre), constante de temps du système $\tau = 1/k_{tot}$ détermine la réaction au forcing.