

THÈSE PRÉSENTÉE PAR JEAN RÉMOND

le 26 mai 2023

POUR OBTENIR LE GRADE DE **DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE STRASBOURG**

Discipline/ Spécialité : **Mathématiques**

MODÉLISATION ET SIMULATION NUMÉRIQUE DES SYSTÈMES COMPLEXES PAR SOMME FINIE DE PROCESSUS ÉLÉMENTAIRES

APPLICATION AUX PHÉNOMÈNES DISCRETS PAR GÉNÉRALISATION DES ÉQUATIONS DE VERHULST

DIRECTEURS DE THÈSE

Daniel GEORGE, Professeur de mécanique, université de Strasbourg, Telecom Physique Strasbourg, Laboratoire ICube, UMR 7357 CNRS

Saïd AHZI, Professeur de mécanique, université de Strasbourg, Adj. Prof. GeorgiaTech USA, Adj. Prof. Texas A&M USA, Laboratoire ICube, UMR 7357 CNRS

RAPPORTEURS

Francisco CHINESTA, Professeur de mécanique et d'intelligence artificielle, ENSAM Paris, Membre senior de l'Institut universitaire de France, Laboratoire PIMM, UMR 8006 CNRS

Rachele ALLENA, MCF - HDR, mathématique et mécanique, Université de Nice, Membre de l'Institut universitaire de France, Laboratoire J.A. Dieudonné, UMR 7351 CNRS

EXAMINATEURS

Francesco DELL'ISOLA, Professeur de mathématique, università degli studi dell'Aquila, Italie, Int. Center of Math. & Mech. of Complex Syst. M&MoCS, Fellow CNRS – Président du jury

Marie-Christine HO BA THO, Professeur de biomécanique, université de Technologie de Compiègne, Laboratoire BMBI, UMR CNRS

Philippe CHOQUET, MCU-PH - HDR, imagerie nucléaire, Université de Strasbourg, CHU, Adj. Prof. Université de Bâle, ICube, UMR 7357 CNRS

REMERCIEMENTS

Aux membres du jury

Je souhaite adresser mes plus sincères remerciements au président du jury, le professeur Francesco DELL'ISOLA dont la hauteur de vue, scientifique ou non, me fut très précieuse.

Je remercie vivement les rapporteurs. Tout d'abord la docteur Rachele ALLENA pour l'acuité de ses questions et la pertinence de ses remarques. Ensuite le professeur Francisco CHINESTA pour la profondeur de ses idées qui ont élargi mon propre regard sur ma thèse.

Je remercie chaleureusement les examinateurs, la professeur Marie-Christine HO BA THO pour ses commentaires affutés et le docteur Philippe CHOQUET pour ses idées originales et subtiles.

Enfin, je souhaite remercier l'ensemble des membres du jury pour avoir été bienveillants et ouverts à la discussion lors de la soutenance.

A mes directeurs de thèse

Je connais maintenant le professeur Saïd AHZI depuis longtemps et il m'aura accompagné depuis le début de ma vie scientifique avec l'énergie et le talent qui le caractérisent. Avec lui, tous mes projets paraissaient simples et je ne serais jamais parti étudier aux Etats-Unis s'il n'avait pas été là. Je le remercie grandement d'avoir accepté d'être mon co-directeur de thèse.

Le professeur Daniel GEORGE fut un merveilleux co-directeur de thèse, d'une très grande disponibilité et d'une fiabilité absolue. Sa minutie alliée à sa rapidité m'ont grandement impressionné. Sans lui, cette thèse n'aurait pas pu voir le jour. Je ne saurais le remercier assez pour tout ce qu'il a fait.

A ma famille

Bien évidemment, je souhaite remercier toute ma famille, à commencer par mon père. Il est celui qui m'a convaincu de réaliser une thèse à un moment de ma vie où cela me paraissait loin, très loin de mes préoccupations du moment. Me replonger dans la science fut une cure de jouvence. Par ailleurs, j'ai en grande partie réalisé cette thèse car je souhaitais travailler avec lui sur un projet scientifique. C'est chose faite et ce fut une joie. Sa contribution et nos discussions furent plus que décisives dans l'ensemble de ces travaux. Papa, merci !

Maman, sans ton soutien moral, tes encouragements et l'énergie que tu mets chaque jour à rendre ma vie facile quand je suis à Strasbourg, je n'aurais certainement pas eu la patience et la sérénité nécessaire pour finir cette thèse. Merci mille fois !

Caroline, tu m'as toujours soutenu et écouté, je ne te remercierai jamais assez. Avec Joël, vous êtes des piliers dans ma vie.

Bien qu'Aurel et Alba ne sachent pas encore lire, ils furent une grande source de joie, j'ai hâte de les voir grandir, j'espère qu'ils liront ces lignes un jour et qu'ils sauront qu'ils m'ont beaucoup aidé malgré leur jeune âge.

La fierté et le soutien de mes grands-parents paternels m'ont beaucoup touché, je les remercie pour nos discussions passionnantes ; je regrette de ne pas répondre plus régulièrement à leurs invitations.

J'embrasse aussi ma tante Catherine, mon oncle Bertrand et mes cousins pour leur soutien et leurs encouragements.

Aux amis de la famille

Blandine, tu es ma marraine et tu as été présente à chaque étape de ma vie avec Maxime et Juliette, celle-ci ne fait pas exception. Je ne saurais tout dire en quelques lignes sinon que je vous embrasse fort tous les trois.

Patrick & Chantal, vous me connaissez aussi depuis toujours et j'ai tellement de souvenirs avec vous que je ne saurais par où commencer. Merci d'être toujours aussi chaleureux, prévenants et d'avoir été présents à la soutenance.

Eric & Sylvie, là non plus, je ne saurais par où commencer et réduire ces remerciements à quelques lignes. Merci pour nos discussions, tous vos conseils et les lectures que vous m'avez faites découvrir. J'ai été très touché que vous veniez à la soutenance.

Aux amis présents à la soutenance

Lucas, Alexandre, Ilona et Benoit merci pour votre présence à la soutenance, cela m'a véritablement beaucoup touché.

Lucas et Alexandre, votre rationalité et nos fécondes discussions autour de la science et de mille autres sujets ont achevé de me convaincre de l'importance de me replonger dans des études scientifiques.

Ilona, c'est en grande partie grâce à toi, à l'époque que j'ai pu m'inscrire en thèse. Benoit, c'est sur ta suggestion que je me suis intéressé à des modèles d'épidémiologie. Cette thèse vous doit beaucoup !

A mes amis strasbourgeois

Thomas, Jeanne et Joao merci d'avoir assisté à la soutenance à distance. Votre amitié m'est toujours aussi précieuse, plus peut-être que par le passé.

André et Emilie, merci pour toutes nos vibrantes discussions autour de la science et de mille autres sujets. Votre enthousiasme communicatif sur la recherche et la science m'a donné envie d'en faire à nouveau.

Jeremy, merci d'être présent dans tous les moments importants de ma vie, tu fais partie des rares personnes que j'appelle quand des événements graves se produisent. Merci en particulier d'avoir partagé ce moment de fête. Je vous souhaite avec Perrine une merveilleuse vie à trois.

Merci enfin à tous d'être là depuis si longtemps, notamment Flo, Hervé & Aurélie et Hubert & Mélanie.

A mes amis parisiens

Anne-Aurore, Laure, Bernard et Pierre merci d'avoir suivi la soutenance à distance.

Anne-Aurore tu l'as suivie avec une attention extraordinaire. Votre soutien à toi et Martin compte beaucoup pour moi.

Laure, tes encouragements et ton enthousiasme, qui semble ne jamais te quitter, sont toujours un bol d'air frais.

Bernard, je ne me lasse jamais de ton intelligence et ton originalité, je suis très heureux que tu aies pris le temps de m'écouter lors de cette soutenance.

Pierre, tu as été mon directeur lorsque j'étais chez Square et j'ai toujours été impressionné par ton dynamisme et tes points de vue avisés.

Nicolas, Marie, Wael et Thomas, merci pour vos encouragements. Vous avez été jadis dans mes équipes et j'ai toujours admiré vos qualités, je suis persuadé qu'elles vous porteront très haut dans vos carrières et dans vos vies personnelles.

Antoine, tu as été mon manager chez Accenture, tu es aujourd'hui un ami et tes conseils sont toujours aussi subtils et clairvoyants.

A mes amis de l'INSA

Adrien et Naoko, ce que vous réalisez à Lyon avec tant de passion est extraordinaire, à chaque fois que je vous vois, je suis enveloppé dans l'atmosphère si sereine et esthétique que vous avez créée. Je vous embrasse.

Jean-Marie, tu resteras toujours mon co-locataire quand j'étais à l'INSA, avec qui nous avons tant de fois débattu et refait le monde. Ton intelligence scientifique et ton humilité m'ont toujours semblé remarquables. Je te souhaite le meilleur pour la suite.

Merci aussi à vous Cécile, Margaux & Frédéric d'être mes amis depuis ma première année d'école à l'INSA. Je vous embrasse.

A mes amis américains

Je remercie Herbert, un véritable ami que je n'appelle pas assez mais à qui je pense très souvent. Il est celui qui m'a démontré que la science n'avait pas à être un exercice triste et monacal mais, au contraire, une activité joyeuse et pleine de vie.

Je remercie William, que j'appelle trop peu aussi, dont le courage et la résilience ont toujours été une grande source d'inspiration.

A mes collègues

Je remercie tous mes anciens collègues de Stanwell et mes collègues de Generali, notamment ceux qui à ma connaissance ont pris le temps de suivre la soutenance ou qui m'ont particulièrement encouragé : Abdallah, Aldric, Christophe, Emmanuel, Elvio, Didier, Jean-François, Nicolas T., Lamine, Sonia, Wahid et j'en oublie certainement !

Pour finir

Merci aussi à ceux qui ne sont plus là mais qui influencèrent ma vie. Je pense à Joël Meyer qui fut une source inépuisable d'inspiration conceptuelle et à Ashley Dalrymple pour sa gentillesse et son humour pendant tout mon séjour aux Etats-Unis.

J'ai enfin une pensée émue pour mes grands-parents maternels à qui je dois tant. J'espère qu'ils auraient été fiers de ce travail, ils me manquent beaucoup.

RESUME DE LA THESE

On présente une nouvelle approche de la modélisation de systèmes complexes utilisant une généralisation des équations de Verhulst. Cette équation fut initialement utilisée pour la croissance de population et permet une modélisation continue de systèmes discrets. Les systèmes complexes auxquels nous souhaitons proposer une modélisation et donc une simulation possible afin d'obtenir une capacité de prédiction, sont ceux qui sont gouvernés par des variables qui peuvent se saturer, car pilotés par des fonctions de contrôle. Par généralisation, nous entendons d'une part la possibilité d'intégrer un aspect multiéchelle dans cette modélisation, avec une étape locale (pilotée par la loi de Verhulst, et une étape globale, en considérant une somme finie de processus élémentaire de Verhulst, l'ensemble étant pilotée par des données grâce à des algorithmes de *machine learning*. C'est cette démarche qui est présentée dans cette thèse avec quatre chapitres distincts.

Dans le premier chapitre, nous tentons de répondre à deux questions importantes dans le cadre de cette thèse. La première est : qu'est-ce qu'un système complexe ? et la seconde : comment modéliser un système complexe ? Nous proposons un bref historique de la question de la complexité puis nous parcourons les liens entre la complexité et le déterminisme. Nous passons ensuite en revue des théories qui nous paraissent bien adaptées à la vision que nous proposons des systèmes complexes, en mettant en évidence en quoi ces théories permettent de les aborder et surtout, à quel type de systèmes complexes elles sont dévolues. Il s'agit principalement des systèmes dynamiques, de la théorie du chaos, des systèmes dissipatifs de Prigogine, des processus de Markov et enfin, des méthodes de réduction comme la méthode LaTin, la POD, la PGD ou la théorie des méconnaissances. Enfin, nous nous intéressons au cas particulier des systèmes complexes en mécanique avec la méthode de l'état local, et son lien avec la thermodynamique, nous décrivons ensuite brièvement les théories d'homogénéisation, qui font apparaître la notion d'échelles, spatiales ou temporelles, au sein des modèles. Enfin, nous considérons également les théories mécaniques de gradients supérieurs, capables elles-aussi, par des cinématiques plus fines, de considérer des milieux complexes, et notamment d'aller vers l'infiniment petit. Ainsi, ce chapitre donne un aperçu des systèmes complexes et des modélisations existantes, en donnant le cadre des applications possibles pour chacun de ces modèles et des simulations associées.

Dans le deuxième chapitre, nous présentons les principes fondamentaux de notre approche, en tant que généralisation de la loi de Verhulst. Ce modèle consiste donc en une décomposition d'un processus complexe en éléments simples, eux-mêmes modélisés par la loi de Verhulst. Nous présentons d'une part la loi de Verhulst en tant que fonction de densité de probabilité parmi les plus simples possibles et la situons parmi des fonctions équivalentes, et d'autre part, nous soulignons que l'équation différentielle associée est construite à partir de fonctions dont la signification est concrète et peut être rattachée au processus que l'on veut modéliser. Nous prenons en compte quatre critères, qui en dehors de la simplicité dont nous avons déjà parlé, sont : la possibilité de proposer un changement d'échelle local-global, l'interprétabilité (au sens où des équations explicites existent à l'étape locale, avec des solutions *a priori* et analytiques. Enfin, la modélisation reste utilisable pour un grand nombre

de phénomènes, dans la mesure où ceux-ci concernent des variables bornées, donc des questions de flux et de stocks. Enfin, nous situons notre modèle par rapport à l'approche générale de la PGD. Ainsi notre modélisation reste dans la famille des processus *a priori*, ce qui est moins performant. Cependant, elle reste analytique et explicitement multi échelle, ce qui la rend compétitive, notamment lorsque des processus précis à identifier sont en jeu.

Le troisième chapitre présente une première application de notre modèle de système complexe à l'épidémiologie. Nous avons choisi de l'appliquer à l'épidémie de COVID-19 lors de sa première vague. Le chapitre est organisé autour de l'articles en deux parties que nous avons publié. Après en avoir donné des résumés, la décision a été prise de les insérer tels quels dans le chapitre, avec les commentaires ad hoc. La première partie tente de modéliser la progression de l'épidémie par le nombre de cas d'infections détectées. L'étape locale utilise la loi de Verhulst simple. L'étape globale prend en compte les démarrages des confinements et la somme de ces deux phénomènes simule bien le déroulement de l'épidémie, lorsque les paramètres sont optimisés par un algorithme de Marquardt. La deuxième partie de l'article, plus récente, s'intéresse au nombre de décès dans un grand nombre de pays, censés être caractérisé par des données plus robustes. En outre, on analyse deux critères supplémentaires : la prédictibilité et le changement d'échelle. Le premier se fait par une étude de la sensibilité du modèle par rapport au nombre de données temporelles utilisées pour l'identifier, le deuxième en découpant la population en déciles et en identifiant l'évolution de l'épidémie dans chacun d'eux. Nous comparons ensuite la somme de ces modèles à celui qui est identifié sur la population totale. Les résultats sont alors présentés et commentés.

Dans le dernier chapitre, nous proposons une autre utilisation de notre modèle en vue de la construction d'une loi physique, accompagnée d'une nouvelle compréhension d'un phénomène complexe en mécanique des matériaux, ici la fragmentation d'un mono-filament par l'intermédiaire d'une loi logistique. L'essai de fracturation consiste à exercer une traction sur une ensemble constitué d'un mono filament inséré dans une matrice. La fibre se fracture alors progressivement et les résultats d'essais mettent en évidence la contrainte de cisaillement maximale à l'interface, fondamentale dans toute utilisation de matériaux composites car il pilote le transfert de charge vers les fibres. Nous utilisons notre modèle en identifiant correctement les variables de contrôle avec des variables physiques explicites. Nous en déduisons une nouvelle équation différentielle dont la solution est présentée et qui décrit très bien le cumul du nombre de fragments en fonction de la déformation dans le composite. On présente enfin différentes applications de notre modélisation pour des essais de fragmentation variés de la littérature, des fibres classiques jusqu'à des fibres dont la surface est architecturée par nanofils de ZnO, ce qui modifie fortement les contraintes de cisaillement critiques. Cette modélisation locale peut ensuite être utilisée à une échelle macroscopique pour étudier l'endommagement du matériau.

Nous concluons ce travail par un certain nombre de perspectives qui peuvent permettre la mise en pratique de notre modélisation dans des domaines très variés, autant scientifiques que dans des domaines tertiaires, économique, financiers ou autres.

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION.....	14
CHAPITRE I - MODELISER LES SYSTEMES COMPLEXES	16
1. Définir un système complexe.....	18
2. Un peu d'histoire	20
3. Quelques exemples de théories des systèmes complexes en physique.....	21
4. Conclusion.....	36
5. Bibliographie	37
CHAPITRE II - VERS UNE GENERALISATION DE LA THEORIE DE VERHULST DECOMPOSITION D'UN PROCESSUS COMPLEXE EN ELEMENTS SIMPLES.....	45
1. Présentation de notre démarche	47
2. Notre modèle fondé sur la loi de Verhulst	49
3. Insertion de notre modèle dans un contexte mathématique général	52
4. Similitude de notre approche avec la PGD	56
5. Conclusion.....	60
6. Bibliographie	61
CHAPITRE III - APPLICATION DE LA THEORIE DE VERHULST GENERALISEE A LA MODELISATION DE L'EPIDEMIE DE COVID-19	64
1. Introduction	68
2. Présentation du modèle SIR, SEIR et de ses dérivés	70
3. Présentation de nos 2 articles.....	72
4. Article 1 : On a New Virus-Centric Epidemic Modeling, 1: General Theory and machine learning simulation for 2020 SARS Cov 2 cases for Belgium, France, Italy, and Spain.....	80
5. Article 2 : On a New Virus-Centric Epidemic Modeling, 2: Simulation of deceased of SARS CoV 2 in several countries.....	102
6. Analyse des résultats et commentaires	125
CHAPITRE IV - APPLICATION DE LA THEORIE DE VERHULST GENERALISEE A L'ESSAI DE FRAGMENTATION DES FIBRES.....	134
1. Introduction	136
2. L'essai de fragmentation	139
3. Modélisation de l'évolution du nombre de fragments	151
4. Perspectives	160
5. Bibliographie	161
CONCLUSION ET PERSPECTIVES	166

LISTE DES FIGURES ET DES TABLEAUX

Figure 1 : Représentation schématique de la méthode LaTin, d’après [40].....	27
Figure 2 : Un exemple de convergence vers un cycle de traction compression d’un milieu viscoélastique viscoplastique avec la méthode LaTin, on a le premier cycle à gauche, représenté dans un diagramme contrainte déformation. Le deuxième cycle est représenté au centre. A droite, on a représenté le 4ème cycle, d’après [43].....	28
Figure 3 : Tableau des dualités entre variables internes et variables associées (à gauche) et entre les variables flux et les variables associées (à droite) d’après [73], exprimées lors de couplages avec la chimie, ici la variable flux correspondante est associée au gradient des potentiels chimiques massiques μk^*	32
Figure 4 : Les modèles de systèmes complexes de la mécanique des milieux continus généralisés, d’après S. Forest [93]	35
Figure 5 : Présentation des différentes fonctions de densité de probabilité associées aux variables aléatoires définies par les quatre variables p, q, P et Q	54
Figure 6 : Illustration des différentes méthodes de résolution PGD selon A. Dumon, [18].....	58
Figure 7 : Présentation de notre modèle et mise en situation par rapport aux grandes méthodes de résolution, ici la PGD.	60
Figure 18 : Raw data and smoothed data over 7 days of the number of detected cases of COVID-19 in Belgium in 2020 according to [19].....	87
Figure 9 : Raw data and smoothed data over 7 days of the number of detected cases of COVID-19 in France in 2020 according to [19].....	87
Figure 10 : Raw data and smoothed data over 7 days of the number of detected cases of COVID-19 in Italy in 2020 according to [19].....	88
Figure 11 : Raw data and smoothed data over 7 days of the number of detected cases of COVID-19 in Spain in 2020 according to [19].....	88
Figure 12 : Graph of functions $E_1(t)$ and $E_2(t)$ for Belgium, E_1 describing the epidemic without a lockdown, E_2 with a lockdown from the start.	89
Figure 13 : Graph of functions $E_1(t)$ and $E_2(t)$ for France, E_1 describing the epidemic without a lockdown, E_2 with a lockdown from the start.	90
Figure 14 : Graph of functions $E_1(t)$ and $E_2(t)$ for Italy, E_1 describing the epidemic without a lockdown, E_2 with a lockdown from the start.	90
Figure 15 : Graph of functions $E_1(t)$ and $E_2(t)$ for Spain, E_1 describing the epidemic without a lockdown, E_2 with a lockdown from the start.	91
Figure 16 : Comparison of the functions $q(t)$ for Belgium, France, Italy, and Spain. The parameters were optimized by machine learning.....	91
Figure 17 : Comparison between the smoothed data of the number of detected cases of COVID-19 in Belgium and our model.....	92
Figure 18 : Comparison between the smoothed data of the number of detected cases of COVID-19 in France and our model.....	92

Figure 19 : Comparison between the smoothed data of the number of detected cases of COVID-19 in Italy and our model.....	93
Figure 20 : Comparison between the smoothed data of the number of detected cases of COVID-19 in Spain and our model.....	93
Figure 21 : Comparison between the smoothed data of the number of detected cases of COVID-19 in Belgium (orange : smoothed data available up to the 18st of April, green : up to the 30th of April) and our model (blue curve) based on the smoothed data of the 18th of April.....	94
Figure 22 : Comparison between the smoothed data of the number of detected cases of COVID-19 in France (orange : smoothed data available up to the 18st of April, green : up to the 30th of April) and our model (blue curve) based on the smoothed data of the 18th of April.....	95
Figure 23 : Comparison between the smoothed data of the number of detected cases of COVID-19 in Italy (orange : smoothed data available up to the 18st of April, green : up to the 30th of April) and our model (blue curve) based on the smoothed data of the 18th of April.	95
Figure 24 : Comparison between the smoothed data of the number of detected cases of COVID-19 in Spain (orange : smoothed data available up to the 18st of April, green : up to the 30th of April) and our model (blue curve) based on the smoothed data of the 18th of April.	96
Figure 25 : Model simulations for 6 countries with a moderate number of deaths (Ireland, Netherlands, Russia, Sweden, Switzerland, Turkey).....	109
Figure 26 : Model simulations for 10 countries with a small number of deaths (Armenia, Austria, Denmark, Finland, Hungary, Kosovo, Norway, Poland, Portugal, Romania).....	110
Figure 27 : Variation of the simulations of the deaths number in Belgium, from March to July 2020. The orange dots represent the experimental data. Each graph uses the data given at the left of the green vertical line. Then the model simulates the whole duration of the epidemic time, before and after the green vertical line (Blue points).....	112
Figure 28 : Variation of the simulations of the deaths number in France, from March to July 2020. The orange dots represent the experimental data. Each graph uses the data given at the left of the green vertical line. Then the model simulates the whole duration of the epidemic time, before and after the green vertical line (Blue points).....	113
Figure 29 : Variation of the simulations of the deaths number in Italy, from March to July 2020. The orange dots represent the experimental data. Each graph uses the data given at the left of the green vertical line. Then the model simulates the whole duration of the epidemic time, before and after the green vertical line (Blue points).....	114
Figure 30 : Variation of the simulations of the deaths number in Spain, from March to July 2020. The orange dots represent the experimental data. Each graph uses the data given at the left of the green vertical line. Then the model simulates the whole duration of the epidemic time, before and after the green vertical line (Blue points).....	115
Figure 31 : Variation of the simulations of the deaths number in Germany, from March to July 2020. The orange dots represent the experimental data. Each graph uses the data given at the left of the green vertical line. Then the model simulates the whole duration of the epidemic time, before and after the green vertical line (Blue points).....	116
Figure 32 : Variation of the simulations of the deaths number in United Kingdom, from March to July 2020. The orange dots represent the experimental data. Each graph uses the data given at the left of	

the green vertical line. Then the model simulates the whole duration of the epidemic time, before and after the green vertical line (Blue points)	117
Figure 33 : Simulation of the death Numbers in France when considering each age group as an independent epidemic. The first graph concerns people between 40 and 49 years old because the number of deaths below 40 years is very low. Then we represent the death numbers among the range 50-59, 60-69, 70-79, 80-89 and above 90 years old.....	119
Figure 34 : Comparison of the death number in France. The blue curve represents the simulation when using as data the death Numbers in France. The orange curve represents the sum of the simulations of the death Numbers in France when considering each age group as an independent epidemic. The green curve represents the death Number in France (data smoothed over 7 days). .	120
Figure 35 : Evolution du nombre de pays selon la valeur de R^2 pour les 22 pays modélisés dans le second article – pour une valeur de R^2 variant de 0,26 à 1,00	128
Figure 36 : Evolution du nombre de pays selon la valeur de R^2 pour les 22 pays modélisés dans le second article – pour une valeur de R^2 variant de 0,90 à 1,00	128
Figure 37 : Représentation de la fragmentation progressive de la matrice dans un essai de traction d’une fibre insérée dans une matrice céramique, d’après Chengzheng Zhu, 2020, à gauche [3], et d’après J.P. Favre et al., à droite [4].....	136
Figure 38 : Exemple de rupture de fibres en traction dans un composite unidirectionnel de fibres de verre (diamètre 20 μ m) renforçant une matrice poly-époxyde, le matériau est sollicité dans la direction des fibres, c’est-à-dire la direction horizontale sur la photo, d’après A. Chateauminois [5], document ESPCI. Les ruptures des fibres sont clairement visibles, des segments sombres au voisinage des ruptures fragiles des fibres sont la signature de la rupture locale des interfaces. https://www.simm.espci.fr/sites/www.simm.espci.fr/IMG/pdf/ptes_rupture.pdf	137
Figure 39 : Modes de rupture d’un composite unidirectionnel en fatigue, mélange de rupture de fibres, de rupture des interfaces fibre-matrice, et fissuration de la matrice, d’après F. Pagano, thèse de doctorat de l’université PSL, Mines ParisTech, 2019, [6].....	138
Figure 40 : Procédure de réalisation d’un essai de traction sur fibre seule, selon la norme ISO 11566, d’après Zwick-Roell, https://www.zwickroell.com/fr/secteurs-dactivite/composites/essais-de-traction/ , [7].....	138
Figure 41 : Principe de l’essai de fragmentation d’une fibre. Le nombre de fragments augmente progressivement jusqu’à saturation lorsque les contraintes de cisaillement intégrées sur la longueur restante ne sont plus suffisantes pour casser de nouveau le fragment, d’après W. Wu et al. [18] ...	140
Figure 42 : Exemple d’éprouvettes en résine thermodurcissable utilisée pour réaliser un essai de fragmentation d’une fibre en traction, la fibre n’est pas représentée à gauche, d’après [8], et avec une fibre de chanvre dans une matrice époxy à droite [9].	140
Figure 43 : Exemple d’isochrones observées au voisinage des ruptures de la fibre de chanvre au cours d’un essai de fragmentation d’une éprouvette Chanvre /époxy d’après C. Bonnafous, [9].....	141
Figure 44 : Evolution du nombre de fragments pour une fibre de « verre E » insérée dans une matrice polyester d’après [8]	142
Figure 45 : Comparaison des densités de rupture pour deux fibres, la fibre de carbone AS4 et la fibre de « verre E » d’après [10].....	142

Figure 46 : Résultats de tests de fragmentation sur des éprouvettes comportant une fibre de carbone seule (courbe bleue), ou présentant une greffe d'interphase de nanofils de ZnO (courbe rouge) d'après [20].....	143
Figure 47 : Observation des interphases de ZnO greffées sur des fibres de carbone d'après P. Marashizadeh et al., 2019, [20]. Selon les conditions expérimentales, la longueur des nanofils varie de 15 à 30nm, et leur épaisseur de 7 à 15nm.....	143
Figure 48 : Effet renforçant d'une fibre (bleue) insérée dans une matrice cylindrique, les lignes verticales noires ne sont que des marqueurs de l'effet renforçant et on peut observer la déformation interne de la matrice, très variable en espace. Illustration également du volume élémentaire représentatif (VER) du modèle de H.L. Cox [15], d'après A. Chateauminois, ESPCI [14].	144
Figure 49 : Comparaison du modèle de Cox (shear-lag) avec la solution exacte pour un carbone-epoxy, donnée par J.A. Naim (1992) [17] et rappelé par D.Rouby en [16]	146
Figure 50 : Evolutions des contraintes normales et de cisaillement interfacial le long de la surface extérieure de la fibre avec le modèle de Kelly et Tyson [14].....	146
Figure 51 : Evolutions de la contrainte normale dans la fibre, ici σ_f , contrainte normale dans la matrice, ici σ_m , et contrainte de cisaillement interfaciale, ici τ_i , avec le modèle de Kelly & Tyson, d'après D. Rouby, document INSA de Lyon [16].....	148
Figure 52 : Evolution de la contrainte normale dans la fibre lors de multiples fragmentations, la première rupture apparaissant en A, on indique dans le texte la signification des ruptures potentielles successives, d'après D. Rouby, document INSA de Lyon, [16]	149
Figure 53 : Calcul du champ de déformations lors d'une fragmentation progressive d'une fibre, et comparaison avec le résultat d'une fibre recouverte de nanofils de ZnO, d'après [20].....	150
Figure 54 : Graphes de la fonction de densité de probabilité et de la fonction de répartition de Weibull, d'après [52].....	151
Figure 55 : Evolution de la fragmentation d'après [24], en fonction de la contrainte de cisaillement	158
Figure 56 : A gauche, données expérimentales d'après les auteurs de [24] ; à droite, comparaison des points expérimentaux rouges et bleus issus de [24] avec notre modèle de Verhulst généralisé (lignes continues rouges et bleues) appliqué à la fragmentation d'une fibre de carbone avec ou sans interphase de nanofils de ZnO	159
Figure 57 : Evénements acoustiques lors de l'endommagement d'un composite en fluage d'après [55], l'endommagement est enregistré en fonction du temps, à gauche on observe l'analyse en composantes principales de chaque événement acoustique, séparé en fonction de sa nature ; à droite, la chronologie d'apparition des différents types d'endommagement. On notera ici que la rupture des fibres ne fait pas partie de phénomènes majeurs, s'agissant d'un composite stratifié [+ - 62°]12S.....	161

Tableau 1 : List and definition of the model parameters. * Note that the inflection point of the sigmoid corresponds to the maximum value of its derivative, which is often called "peak of the epidemic"	84
Tableau 2 : input values of the model parameters, i.e. before supervised learning	85
Tableau 3 : Lockdown dates used in the COVID-19 epidemic	86
Tableau 4 : Final values of the model parameters for the four countries, and analysis of the corresponding errors (standard deviation error) - t_i and t_s in days.....	96
Tableau 5 : Values of the number of cases y_0 at t_0 measured with the raw and smoothed data, comparing to the number of cases y_0 at t_0 given by the model.....	98
Tableau 6 : R^2 coefficient of quality of simulations compared to raw data and smoothed data.	98
Tableau 7 : List and definition of the model parameters. * Note that the inflection point of the sigmoid corresponds to the maximum value of its derivative, which is often called "peak of the epidemic"	106
Tableau 8 : input values of the model parameters, i.e. before supervised learning. Please note that those input values can be changed up into the same order of magnitude with no significant consequences on the final results after using the algorithm.	107
Tableau 9 : R^2 value of the simulation for each country.....	111
Tableau 10 : Evolution of the values of R^2 for each country in function of the selected amount of data available for the model	118
Tableau 11 : Comparison of the R^2 for each group category model. The R^2 values before 40 years are not significant because of the too low number of deaths.....	120
Tableau 12 : Comparison of the R^2 when using the some of the models for each age group or when considering the whole country.....	120
Tableau 13 : Valeurs des coefficients de la courbe de densité de fragmentation en fonction de la déformation appliquée, relatifs aux essais donnés Figure IV.9, d'après Kim et Nairn [10]	152
Tableau 14 : Définitions des principaux paramètres du modèle de fragmentation d'une fibre	157

INTRODUCTION

De plus loin que me revienne l'ombre de mes souvenirs, la science et les scientifiques me fascinent. La figure paternelle n'y est sans doute pas étrangère. Je me rappelle lorsque je fus rentré en France, après une expérience à l'université de Londres (University College London ou UCL), mon parrain de l'INSA de Lyon, Daniel Ernst, me questionna sur ma famille, je lui parlai alors des professions de mes parents, son visage dessina un sourire espiègle avant de déclarer : « Je comprends mieux la thèse ». Nature ou Culture ? Goût de naissance ou héritage socio-culturel ? Il m'est impossible d'y répondre, je peux en revanche raconter en quelques mots le parcours qui m'amena à ce doctorat.

Au-delà de la science, mon rapport au monde fut très largement porté par le concept, tempérament encouragé par le système scolaire ; nous sommes après tout le pays de Descartes. En particulier, j'admirais les mathématiciens et leur promesse d'une vie monacale. Je trouvais rassurant que mon goût pour cette activité dont l'utilité ne me paraissait alors guère évidente n'avait pas à être justifié par une quelconque application. Il m'a d'ailleurs toujours semblé regrettable que notre système scolaire ne réussisse pas toujours à démontrer l'utilité première de cet outil crucial pour les sciences et l'ingénierie.

Si mon tropisme pour les sciences était indéniable, il n'était pas, loin s'en faut, mon seul centre d'intérêt et je crois que j'avais aussi une grande passion pour l'histoire et la littérature. Néanmoins, après un baccalauréat scientifique avec une mention Très Bien, je décidais de me lancer dans une formation d'ingénieur, d'abord par des classes préparatoires aux grandes écoles qui me parurent cruelles, il faut dire que mes aspirations à la vie monacale s'étaient estompées et appartenaient au passé. Entendons-nous, le contenu de la formation était extraordinaire et l'esprit de camaraderie exceptionnel mais j'avais trouvé difficile de devoir m'enfermer et de travailler jour et nuit à une époque où j'aspirais à découvrir le monde. S'il est absolument nécessaire de passer par un travail intensif afin d'acquérir une culture scientifique digne de ce nom, je reste persuadé que le faire subir à des jeunes gens qui sortent de terminal tient du rituel et ne me semble pas nécessairement le moment opportun. Toujours est-il que j'entrais en MPSI au lycée Kléber puis en PSI*, loin de donner le meilleur de moi-même mais travaillant néanmoins trop pour sortir, j'intégrais finalement l'INSA Lyon ou j'obtenais mon diplôme d'ingénieur en 2009.

J'avais réalisé dans le cadre de mes études une année d'échange à l'université de Clemson près d'Atlanta où la rencontre avec Herbert Boeckels changea mon regard sur la recherche ; sa joie de vivre, ses envies épicuriennes finirent de me convaincre qu'on pouvait faire de la science sans être condamné à une vie austère. Toutefois, lors de mes études à l'INSA, personne ne me voyait poursuivre par une thèse, on m'imaginait davantage m'épanouir dans le conseil que dans la recherche.

Je n'étais pas convaincu. Si mon goût pour la vie monacale était passé, mon goût pour les concepts et la théorie était toujours bien présent. D'un autre côté, je ne connaissais pas l'entreprise qui me semblait être un monde bien mystérieux ce qui attisait ma curiosité.

Je fis mon stage de fin d'étude à Dublin dans le conseil où je restai 6 mois, oscillant entre l'un et l'autre. Je candidatai pour une thèse à Cambridge et à UCL. Je choisis en bout de course d'entrer en thèse à UCL pour de très mauvaises raisons, je voulais écumer les bars de Londres. D'ailleurs les raisons de cette première inscription tenaient davantage au souhait de poursuivre ma vie étudiante et d'entrer dans une institution prestigieuse qu'une passion immodérée pour la recherche. Toutefois, UCL l'emporta aussi car le sujet était à la fois très théorique avec une application très concrète (application des problèmes inverses mal posés à l'imagerie médicale).

Je restais une année pendant laquelle j'appris beaucoup sur l'algorithmie et les soirées londoniennes avec l'aide notable de quelques amis. Mais il devint vite évident que l'activité de thèse, dans cette configuration, ne me plaisait pas. J'avais d'autres aspirations que de m'enfermer dans un laboratoire avec des gens aussi brillants et passionnés qu'au mode de vie éloigné du mien.

La mort dans l'âme, je finis par rentrer en France où je fus très rapidement engagé par Accenture et où commença alors ma carrière de consultant. Carrière qui fut rapidement rattrapée par des problèmes de méthodes, d'algorithmie et de modélisation. En effet, les entreprises, comme toute activité humaine, cherche à prédire et use ainsi beaucoup de modèle, la disponibilité de la donnée ces dernières années amplifiant d'ailleurs le phénomène. De même le conseil utilise beaucoup des méthodes et des canevas de pensée. Aussi la capacité à produire un raisonnement fiable et éprouvé par l'expérience, comme en science, devient, de nos jours, primordial en entreprise.

Par exemple, l'exercice le plus commun du consultant, le business plan, n'est rien d'autre qu'un modèle, utilisant d'ailleurs souvent des outils mathématiques très rudimentaires. La définition d'un processus est largement lui aussi interprétable comme un modèle d'une activité grâce à de la logique et de la théorie des graphes.

Ainsi, après m'être éloigné de la science pour m'orienter vers le monde économique, voilà que celle-ci revenait dans ma vie, certes sous une forme très différente, camouflée. C'est devant ce constat de synergies de plus en plus grandes entre le monde de l'entreprise et la recherche, y compris sur la manière de définir des stratégies et de les valider, qu'est née l'idée de cette thèse. Elle est aussi née d'une grande constance humaine, la joie après avoir beaucoup œuvré dans le tumulte du *negotium* de prendre un brin de recul et, à défaut de vie monacale, de goûter à la joie d'un certain retrait peut-être même d'une forme d'*otium* lors de ces travaux.

CHAPITRE I

-

MODELISER LES SYSTEMES COMPLEXES

Sommaire

1. Définir un système complexe
2. Un peu d'histoire
3. Quelques exemples de théories de systèmes complexes en physique
 - 3.1. Les systèmes dynamiques, Poincaré, Lorenz, chaos et catastrophes
 - 3.2. Les systèmes dissipatifs, Prigogine
 - 3.3. Les modèles de Markov pour les processus aléatoires
 - 3.4. Les réductions des simulations de systèmes complexes
 - 3.4.1. Méthode LaTin (Large Time Increment)
 - 3.4.2. Méthodes de décomposition, POD et PGD
 - 3.4.3. Théorie des méconnaissances
 - 3.4.4. Conclusion sur les méthodes de réduction
 - 3.5. Les systèmes complexes en mécanique des solides
 - 3.5.1. La méthode de l'état local
 - 3.5.2. Les méthodes d'homogénéisation
 - 3.5.3. Les approches de la mécanique des milieux continus généralisés
4. Conclusion
5. Bibliographie

RESUME DU CHAPITRE I - MODELISER LES SYSTEMES COMPLEXES

Dans ce premier chapitre, nous tentons de répondre à deux questions importantes dans le cadre de cette thèse. La première est : qu'est-ce qu'un système complexe ? et la seconde : comment modéliser un système complexe ? ou en tout cas, quelles sont les modélisations existantes dans ce domaine et quel est leur degré de généralité ? Ont-elles des domaines d'applications spécifiques ?

A la première question, nous proposons un bref historique de la question de la complexité et nous nous montrons intéressé mais circonspect par rapport au concept même de système complexe, et dont la pertinence telle que définie par le Santa Fe Institute en 1984, est très discutée.

Puis nous parcourons, avec notre point de vue, les liens entre la complexité et le déterminisme. Partant du fameux « démon de Laplace », nous indiquons en quoi ce déterminisme a été exagérément associé à la mécanique newtonienne, puis à la mécanique classique.

Nous passons ensuite en revue des théories qui nous paraissent bien adaptées à la vision que nous proposons des systèmes complexes, en mettant en évidence en quoi ces théories permettent de les aborder et surtout, à quel type de systèmes complexes elles sont dévolues. Il s'agit principalement des systèmes dynamiques, de la théorie du chaos, des systèmes dissipatifs de Prigogine, des processus de Markov et enfin, des méthodes numériques originales, conçues pour aborder des systèmes d'une complexité numérique extrême et capable de les réduire d'une façon impressionnante. Il s'agit ici de la méthode LaTin, de la POD et de la PGD, actuellement très développées, mais aussi de la théorie des méconnaissances, capable de prendre en compte les incertitudes, ou même l'absence d'informations que nécessiterait la résolution du problème posé.

Enfin, nous nous intéressons au cas particulier des systèmes complexes en mécanique. Dans ce domaine, nous mettons en évidence trois approches totalement différentes, qui ont permis de prendre en compte la complexité dans des registres spécifiques : tout d'abord la méthode de l'état local, et son lien avec la thermodynamique, qui propose une méthodologie rigoureuse et thermodynamiquement admissible, pour tout problème multiphysique. Ensuite, nous décrivons brièvement les théories d'homogénéisation, qui font apparaître la notion d'échelles, spatiales ou temporelles, au sein des modèles. Enfin, nous considérons également les théories mécaniques de gradients supérieurs, capables elles-aussi, par des cinématiques plus fines, de considérer des milieux complexes, et notamment d'aller vers l'infiniment petit.

Ainsi, ce chapitre donne un aperçu des systèmes complexes et des modélisations existantes, en donnant le cadre des applications possibles pour chacun de ces modèles et des simulations associées.

MODELISER LES SYSTEMES COMPLEXES

1. Définir un système complexe

Ce travail s'inscrit aux confluent de vastes domaines que sont les mathématiques appliquées et l'informatique, la modélisation et la simulation numérique, avec des applications en mécanique, en physique ou en épidémiologie, développées uniquement à titre d'exemples. Il s'agit évidemment de modéliser des phénomènes, des processus qui par nature sont compliqués, afin de justifier un travail de recherche et donc une thèse de doctorat. Toutefois, nous verrons par la suite que la complexité dont il est question ici ne se généralisent pas aux problèmes compliqués ou difficiles, car toute la recherche scientifique serait concernée. Il nous faudra donc définir cet objet d'étude, la complexité, aborder sa modélisation et sa simulation, et définir les limites du champ qui nous intéressera.

Dans son habilitation à diriger les recherches de 2004, intitulée « Modéliser des systèmes complexes, quelques pistes pour relever le défi » [1], Guillaume Deffuant considère les méthodes de l'apprentissage statistique pour définir des comportements de modèles individus-centrés dans des espaces de paramètres. Nous verrons dans la suite de ce travail que nous pouvons faire nôtre cette définition. Il développe d'ailleurs avec ses co-auteurs dans un article de 2015 [2], une description plus fine de ce champ particulier de la complexité grâce à une référence bien connue : le Démon de Laplace [3], pour distinguer trois visions différentes. Rappelons tout d'abord la phrase de Pierre Simon Laplace qui motive ces catégories : « Une intelligence qui, à un instant donné, connaîtrait toutes les forces dont la nature est animée et la situation respective des êtres qui la compose embrasserait dans la même formule les mouvements des plus grands corps de l'univers et ceux du plus léger atome ; rien ne serait incertain pour elle, et l'avenir, comme le passé, serait présent à ses yeux ». Il s'agit donc du pilier de la philosophie déterministe, fruit de la mécanique newtonienne. A partir de cette pensée, les auteurs classent trois visions successives de la complexité.

La première vision consiste à se rendre compte qu'il existe des systèmes physiques relativement simples qui ont « brisé » le rêve de Laplace. Il s'agit donc d'une complexité mathématique, au sens où des conditions initiales infiniment peu différentes peuvent conduire à des trajectoires totalement divergentes, comme dans les problèmes à plus de deux corps. Il peut s'agir aussi d'une complexité dite « de Von Neumann » avec la machine de Turing et le théorème de Gödel [3], ou d'une complexité physique dont nous parlerons plus tard. Dans tous les cas, cette première vision rompt la prévision de Laplace de multiples façons et engendre donc un système « complexe ».

La deuxième de leur vision génère une définition différente de la complexité. Dans ce cas, on prend bien en compte les limites de la vision précédente, mais on considère comme pertinent de caractériser chaque élément du problème avec ses propres conditions initiales et sa dynamique de façon déterministe, pour simuler un système plus vaste mais restant toutefois

« dans des échelles spatiales et temporelles bien identifiées ». En outre, la possibilité nouvelle d'avoir accès à un très grand nombre de données et à leur traitement génère un nouvel objet complexe maîtrisable en ce sens. Les auteurs en donnent de nombreux exemples en génétique, en climatologie ou en théorie des réseaux. Ce sera davantage dans cette catégorie que se classera notre approche, mais de nombreuses possibilités existent, nous les détailleront plus tard.

Enfin, leur troisième catégorie de complexité rejoint des problèmes qui sont davantage philosophiques, bien décrits par exemple par le fameux problème de la causalité descendante : « Existe-t-il des propriétés émergentes engendrant des lois causales qui contraignent les éléments dont elles émergent ? ». Cette question peut nous entraîner loin et il n'est pas question ici de décrire davantage cet univers dans lequel la pensée peut agir sur la matière. Contentons-nous de citer là encore une des phrases de cet article qui fait sentir le registre de complexité dont nous parlons : « nous ressentons tous une capacité à prendre des décisions qui sont la cause de nos actions ». Nous ne nous placerons pas dans ce registre, mais il était utile de le nommer au sein de ces catégories.

Revenons à la première vision décrite plus haut ainsi qu'à la seconde qui en découle. Il nous semble que la perte du déterminisme laplacien à la base de ces complexités peut être décrite d'une façon plus précoce que celle qui est associée à la prise en compte de conditions aux limites générant des divergences de trajectoires par exemple. Pour en avoir une preuve, nous pourrions citer les phrases de Paul Germain, dans l'avant-propos de son cours de mécanique de l'Ecole polytechnique (Polycopié, Ed. 1982) [4] :

"Peut-être aurait on moins fermement considéré le principe du déterminisme comme vérité absolue et métaphysique (il parle du choc de la relativité pour les savants au début du XXème siècle dans le contexte de la mécanique classique), s'il on avait clairement réalisé à l'époque de Laplace qu'une fonction $X(t)$, solution d'une équation différentielle du second ordre, n'est pas toujours définie de façon unique par les données de sa valeur et de sa dérivée pour $t=0$. Si un point matériel pesant M est astreint à glisser sans frottement sur une courbe fermée C , située dans un plan vertical, et si on place ce point M au point le plus haut A , les équations laissent prévoir au moins 3 solutions si A est un point de C où le rayon de courbure est nul : équilibre, mouvement vers la droite, mouvement vers la gauche. Poser le déterminisme en mécanique classique, c'est éliminer a priori et par avance toute loi de force, toute liaison qui n'assurent pas l'unicité pour des conditions initiales données."

Aussi, si nous partageons les catégories précédentes de G. Deffuant & al., si nous pensons avoir contribué à une exploration supplémentaire de la deuxième catégorie comme on le verra au cours de la présentation de ce travail, la description de Paul Germain nous montre bien que ce déterminisme laplacien fut principalement une construction par élimination des solutions qui le contredisait. Certes, et c'est toujours Paul Germain qui parle, [4], « Comment ne pas être émerveillé en songeant qu'à la suite de fort laborieuses études analytiques et numériques – ces dernières conduites avant l'apparition des ordinateurs – on était parvenu à rendre compte de tous les mouvements des corps du système solaire avec une précision telle que

l'erreur la plus importante restante était une différence de 43 secondes par siècle sur la position du périhélie de mercure ».

On pouvait légitimement croire en l'existence du démon de Laplace.

2. Un peu d'histoire

Même si Fabrizio Li Vigni [5, 6], nous dit que la science des systèmes complexes est une agglomération trop hétéroclite de disciplines variées pour avoir apporté des éclairages vraiment construits et organisés sur son objet d'étude. Il nous semble qu'un bref rappel historique sur le sujet n'est pas inutile et mérite l'attention, au moins pour définir les principaux concepts, les principales écoles de pensées qui s'y sont risquées.

On trouve de façon récurrente dans les études de la complexité, une définition de leur existence par un grand nombre d'éléments interconnectés, possédant des interactions complexes entre elles, des systèmes sensibles aux conditions initiales, on l'a déjà dit, capable de produire des résultats surprenants, capables d'évoluer et de s'adapter, et même de produire des structures complexes à l'échelle de l'ensemble du système étudié. Il s'agit là d'évidences mais il ajoute qu'au bilan, les sciences de la complexité sont toujours restées ancrées dans leur propre discipline, trop pour constituer une vraie discipline à part entière, malgré le discours « interdisciplinaire, post-laplacien, holiste et antiréductionniste » de ses auteurs ».

On apprend que les sciences des systèmes complexes sont ainsi nées aux Etats-Unis en 1984, avec le *Santa Fe Institute* [7], qui a disséminé sa structure au travers de plusieurs dizaines d'instituts dans le monde. Ainsi trouve-t-on le Réseau National des Systèmes Complexes français, ainsi que le Groupement d'Intérêt Scientifique associant plusieurs organismes de recherche français. F. Li Vigni décrit bien, nous semble-t-il [5], les principales caractéristiques et les axes qui gouvernent scientifiquement ces organisations :

- « Une vision computationnelle de la nature et de la société, ... »
- « Une unification des théories des systèmes complexes, en suivant la tendance de la physique à chercher des intégrations théoriques générales ou locales »
- « Une formalisation des sciences de la vie et des sciences sociales par le biais du langage mathématique et algorithmique »

Ce discours nous paraît particulièrement pertinent, et même si l'auteur en présente une vision assez critique en parlant de « l'omniprésence du poncif de la complexité », nous ne ferons pas mieux que lui en le citant encore une fois : « Les sciences de la complexité apparaissent comme une coalition de sous-disciplines afférentes à plusieurs domaines des savoirs, qui trouvent les raisons de leur alliance dans au moins trois éléments : une vision commune des sciences, des institutions scientifiques, de la nature et de la société, inspirée des réseaux computationnels ; un intérêt partagé pour des techniques numériques, jugées hautement performantes et particulièrement pertinentes pour le type de systèmes étudiés (multi-échelles, hétérogènes, évolutifs, etc.) ; et le fait d'occuper, chacune à sa manière, une place

relativement marginale dans le plus vaste champ disciplinaire qui leur est propre. Les représentants de ce domaine trouvent leur langage commun en s'inspirant principalement des théories mathématiques des systèmes dynamiques, qui vont de Poincaré à la « théorie du chaos » [5, 8].

En ce qui nous concerne, n'ayant pas la prétention de fonder une nouvelle discipline, nous reconnaissons bien volontiers appartenir à cette approche mathématique et computationnelle, et espérons simplement par cette contribution, avoir montré qu'il était possible de réintégrer dans le champ du « modélisable » ou du « simulable », des phénomènes qui échappaient auparavant à ces descriptions, comme on le verra plus loin.

Il est impossible de résumer ici les nombreux autres travaux et analyses, souvent remarquables, qui ont compté dans ce domaine depuis plusieurs décennies. On se contentera de citer l'ouvrage de Jean-Louis Le Moigne, La modélisation des systèmes complexes [9], dans lequel l'auteur, qui a développé l'épistémologie constructiviste et la systémique, ainsi qu'une approche des systèmes complexes qui les inscrit finalement en parenté des sciences de l'ingénierie, « ces sciences qui ont pour but de construire des artefacts évolutifs et contingents aux finalités pour lesquels ils ont été conçus par l'esprit humain ».

Nous voudrions citer également l'approche des systèmes complexes par la pratique, développée par Philippe Collard, Sébastien Vérel et Manuel Clergue [10] qui, bien qu'étendue à des domaines très variés comme les systèmes biologiques, restent dans la même mouvance de celle de Jean-Louis Lemoigne. Ils y ajoutent la conviction que toute compréhension des systèmes complexes doit passer par l'expérience.

Toujours dans le même domaine et compatible avec notre compréhension des systèmes complexes même si les applications vont ici jusqu'à la sociologie et l'économie, nous nous sommes intéressés à la vision mathématique des systèmes complexes d'Hervé Zwirn [11], et d'Hervé Zwirn avec Gérard Weisbuch [12]. Hervé Zwirn a en outre développé avec Jean-Paul Delahaye [13] plusieurs concepts nouveaux sur *l'imprédictibilité* et l'irréductibilité computationnelle.

3. Quelques exemples de théories des systèmes complexes en physique

Il n'est évidemment pas simple de choisir parmi l'ensemble des travaux de recherche en physique, ceux qui relèveraient d'une signature de « systèmes complexes » et il est certainement impossible d'être exhaustif. Finalement, à chaque époque, les thèmes de recherche les plus visibles et les plus importants ou ceux pour lesquels on ne comprenait que la question sans avoir de pistes précises pour d'éventuelles solutions pouvaient être considérés de cette façon. Toutefois, parmi les grandes théories ou les méthodes qui ont bouleversé l'histoire des sciences en incluant une part de réflexion sur la complexité, nous pouvons citer et décrire succinctement ci-dessous :

- Les systèmes dynamiques, Lorenz, Poincaré, chaos et catastrophes
- Les systèmes dissipatifs de Prigogine
- Les modèles de Markov pour les processus aléatoires

- Les algorithmes de simulation de systèmes complexes (dont la PGD)

3.1. Les systèmes dynamiques, Poincaré, Lorenz, chaos et catastrophes

Parmi les approches qui ont inclus une vision de système complexe compatible avec celle que l'on a décrite déjà plus haut, on peut certainement citer les systèmes dynamiques au sens de Poincaré [14]. Rappelons qu'un système dynamique est un espace des phases, espace de tous les états possibles d'un système ainsi que son évolution dans le temps. On cherche d'ailleurs à connaître (prédire) le comportement à long terme du système.

Les lois d'évolution de ces systèmes dynamiques sont souvent décrites par des équations différentielles, par exemple un système différentiel du premier ordre du type $\frac{d(x(t))}{dt} = f(x(t), t)$ ou des équations aux dérivées partielles. Un système dynamique sera alors dit « à temps continu » si l'espace des phases est de dimension infinie. Si le système dynamique est décrit par une transformation de l'espace des phases dans lui-même, afin de décrire le pas suivant, le système dynamique sera dit « à temps discret », comme la fonction logistique de $[0, 1]$ dans lui-même, et donnée par :

$$x_{n+1} = rx_n(1 - x_n) \quad (I.1)$$

Initialement abordé par Henri Poincaré dans le problème des trois corps [15], l'étude des systèmes dynamiques a connu un développement très important depuis. Ainsi en 1963, Edward Lorenz montre que l'on peut obtenir un comportement apériodique avec un système dynamique de dimension 3, à partir d'une étude du mouvement d'un fluide dans une convection de Rayleigh-Bénard [16], le système est le suivant :

$$\begin{cases} \frac{dx(t)}{dt} = \sigma(y(t) - x(t)) \\ \frac{dy(t)}{dt} = \rho x(t) - y(t) - x(t)z(t) \\ \frac{dz(t)}{dt} = x(t)y(t) - \beta z(t) \end{cases} \quad (I.2)$$

Où σ , ρ et β sont des réels positifs. L'espace des phases conduit à la visualisation de ce qui fut appelé des attracteurs étranges, caractérisant à la fois la très grande sensibilité aux conditions initiales, et une certaine forme de démarrage du chaos.

C'est aussi E. Lorenz qui, en 1972, présentera une conférence au 139^{ème} congrès de l'association américaine pour le progrès des sciences, et qui sera renommée par l'organisateur de la conférence lui-même, Philipp Merilees, en « *Predictability: Does the Flap of a Butterfly's Wings in Brazil Set off a Tornado in Texas?* » [17]. Ce n'est finalement qu'une autre forme, imagée, de définition d'un système complexe !

Parallèlement à ces travaux, Jurgen Möser fait également partie des fondateurs de la dynamique des systèmes non-linéaires. On lui doit des travaux remarquables sur la stabilité des mouvements en dimension 2, et notamment une preuve complète de cette stabilité. Parallèlement, il a apporté des preuves de régularité des solutions des équations aux dérivées

partielles paraboliques et elliptiques [18, 19], qui sont toujours largement d'actualité [20]. Il est évidemment connu pour son rôle dans la création de la théorie de Kolmogorov – Arnold – Moser (KAM) sur les perturbations de systèmes hamiltoniens. Il nous apprend que les perturbations d'un système intégrable ne conduit pas toujours à un système ergodique [21-23].

Dans cette description succincte des systèmes complexes que sont les systèmes dynamiques et la naissance du chaos, on comprendra que l'on n'a cité que les travaux des précurseurs et des fondateurs, ou de certains auteurs de résultats majeurs. Il en est beaucoup d'autres d'importants. Nous n'avons retenu que ceux qui pouvaient avoir un lien avec les travaux de cette thèse.

Parmi les quelques-uns qui doivent être cités sans aucun doute en complément, on pourra mentionner James Yorke. On lui doit, avec plusieurs de ses collègues [24] à partir des années 1975, d'avoir utilisé régulièrement le mot « chaos » et d'avoir largement développé des résultats importants dans ce domaine. A la même époque, O.E. Rössler a notamment particulièrement étudié l'attracteur qui portera son nom et qui est toujours très étudié aujourd'hui et dont le comportement est périodique ou chaotique, selon la valeur des paramètres [25]. Son expression est donnée ci-dessous par le système :

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = -y(t) - z(t) \\ \dot{y}(t) = x(t) + ay(t) \\ \dot{z}(t) = b + z(t)(x(t) - c) \end{cases} \quad (I.3)$$

Nous citerons également, dans un domaine voisin, les travaux de David Ruelle [26], à la fois dans le champ de la mécanique statistique de l'équilibre, mais aussi dans la théorie du chaos vue sous l'angle hydrodynamique. Il décrit notamment l'équilibre statistique par des densités de probabilité invariantes au cours du temps, appelées « états de Gibbs » et montre que des états de Gibbs invariants par translation sont des états d'équilibre. Les travaux de Gibbs seront également généralisés par Jean-Marie Souriau [27].

Enfin, on ne peut pas ne pas citer dans cette brève introduction aux systèmes dynamiques, ceux qui nous intéressent le plus en tout cas, les travaux de René Thom, qui fut professeur à l'université de Strasbourg jusqu'en 1963, et qui est le fondateur de la théorie des catastrophes [28]. Ses travaux nous ont intéressés au sens où il a cherché le modèle dynamique continu le plus simple possible qui génèrent des singularités.

C'est bien dans cet esprit de recherche de modèles les plus simples possibles que nous établirons également des résultats de modélisation de systèmes complexes. Toujours à Strasbourg et pour terminer cette présentation, nous devons de citer les travaux remarquables de clarté de Claude Godbillon, dans sa description mathématique, en géométrie différentielle, de la mécanique analytique [29].

Note sur l'adaptation des systèmes dynamiques aux systèmes complexes : les théories décrites ci-dessus sont très fondamentales, elles permettent de fonder des concepts de base qui sont utilisables dans tout système pour lequel la complexité provient de l'apparition d'instabilités par sensibilité aux conditions aux limites des équations.

3.2. Les systèmes dissipatifs, Prigogine

Nous voudrions tout d'abord citer un bref paragraphe d'Ilya Prigogine dans « Temps et Devenir » [30], qui explique sa présence particulière ici. On comprendra rapidement en le lisant, sa vision très originale des systèmes complexes en lien avec les états d'équilibre. Autant l'étude des systèmes dynamiques et du chaos ont montré que les recherches pouvaient se focaliser sur les conditions initiales, au sens où une variation infinitésimale de certaines de ces conditions pouvaient générer des différences très importantes des solutions au temps longs, autant Ilya Prigogine prend le parti opposé et étudie les états très éloignés de l'équilibre. On pourra s'en rendre compte dans cet extrait :

« On a découvert que quand vous allez loin de l'équilibre, par exemple, en considérant une réaction chimique, que vous empêchez d'arriver à l'équilibre, se produisent des phénomènes extraordinaires que personne n'aurait cru possibles ; par exemple, des horloges chimiques. Une horloge chimique, qu'est-ce que c'est ? Prenons un exemple : vous avez des molécules qui de rouges peuvent devenir bleues. Comment imaginez-vous voir ce phénomène ? Si vous pensez que les molécules vont au hasard, vous allez voir des flashes de bleu, puis de flashes de rouge. Mais il se produit, loin de l'équilibre, dans d'importantes classes de réactions chimiques, des phénomènes rythmiques. Tout devient bleu, puis tout devient rouge, puis tout devient bleu, c'est-à-dire qu'une cohérence naît, qui n'existe que loin de l'équilibre. (...) Donc, loin de l'équilibre, se produisent des phénomènes ordonnés qui n'existent pas près de l'équilibre. Si vous chauffez un liquide par en-dessous, il se produit des tourbillons dans lesquels des milliards de milliards de molécules se suivent l'une l'autre. De même, un être vivant, vous le savez bien, est un ensemble de rythmes, tel le rythme cardiaque, le rythme hormonal, le rythme des ondes cérébrales, de division cellulaire, etc. Tous ces rythmes ne sont possibles que parce que l'être vivant est loin de l'équilibre. Le non-équilibre, ce n'est pas du tout les tasses qui se cassent ; le non-équilibre, c'est la voie la plus extraordinaire que la nature ait inventée pour coordonner les phénomènes, pour rendre possibles des phénomènes complexes. Donc, loin d'être simplement un effet du hasard, les phénomènes de non-équilibre sont notre accès vers la complexité. Et des concepts comme l'auto-organisation loin de l'équilibre, ou de structure dissipative, sont aujourd'hui des lieux communs qui sont appliqués dans des domaines nombreux, non seulement de la physique, mais de la sociologie, de l'économie, et jusqu'à l'anthropologie et la linguistique. »

Il s'agit d'un contrepoint à la théorie du chaos qui a motivé le paragraphe précédent. Entrons rapidement dans cette théorie. Lorsqu'un système thermodynamique isolé est en équilibre stable, on peut écrire, à volume et énergie interne constante, que l'équilibre entraîne $\delta S = 0$ et la stabilité entraîne $\delta S < 0$ et $\delta^2 S < 0$, où S est l'entropie du système. Prigogine montre alors que, lorsqu'on est loin de l'équilibre, la grandeur qui caractérise la stabilité n'est pas $\delta^2 S$ mais $\frac{\partial}{\partial t}(\delta^2 S)$.

En choisissant un système globalement loin de l'équilibre mais en supposant que localement, un volume élémentaire dv de ce système est en équilibre, alors $\delta^2 s \leq 0$, avec s la densité d'entropie massique du volume élémentaire. En intégrant, on peut alors former la fonction de Liapounoff : $\delta^2 S = \int_V \delta^2 s(\rho, s) dv \leq 0$. Il établit alors le critère de stabilité d'un système dans un état loin de l'équilibre grâce à la réciproque du théorème de Liapounoff :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\delta^2 S) \geq 0, \text{ c'est-à-dire } \int_V \frac{\partial}{\partial t}(\delta^2 s(\rho, s)) dv \geq 0 \quad (I.4)$$

Ainsi, comme l'exprime très bien J.M. Giovannoni [31] : pour un système P loin de l'équilibre, qui évolue au cours du temps, et une perturbation Δ , on peut distinguer trois cas :

- La perturbation Δ diminue, alors le système est stable et $\frac{\partial}{\partial t}(\delta^2 S) > 0$
- La perturbation Δ croît, le système est instable et $\frac{\partial}{\partial t}(\delta^2 S) < 0$, mais le système peut évoluer vers un nouvel état faisant apparaître des structures ordonnées.
- Si $\frac{\partial}{\partial t}(\delta^2 S) = 0$, alors le système est asymptotiquement stable.

Note sur l'adaptation des théories des systèmes dissipatifs aux systèmes complexes : Prigogine a pu montrer que des systèmes situés loin d'un état d'équilibre pouvait évoluer vers un nouvel état présentant des structures ordonnées. Cet état sera alors caractérisé par une structure dissipative d'énergie ou de matière. Prigogine, au travers de ce nouveau concept de l'ordre par les fluctuations, a construit une nouvelle façon de comprendre et modéliser certains systèmes complexes par la thermodynamique des processus irréversibles [32]. Son approche, très fondamentale également a généré de nombreuses et nouvelles modélisations dans tous les domaines de la science.

3.3. Les modèles de Markov pour les processus aléatoires

Les modèles de Markov utilisés pour caractériser des systèmes complexes sont définis par des « processus de Markov », c'est-à-dire des processus stochastiques possédant la propriété de Markov. Cette dernière peut être définie par le fait qu'à un instant t , le modèle n'a pas de mémoire, toute l'information utile pour prédire les états du système à l'instant $t' > t$, sont dépendants de l'état du système à l'instant t et pas des états antérieurs.

De très nombreux systèmes complexes stochastiques sont modélisables par des processus de Markov, les travaux à ce sujet sont importants tout comme les applications sont nombreuses. Il n'est pas réaliste de vouloir résumer les principales. On pourra par exemple se référer à la thèse de W. Lair en 2011 [33], dans laquelle l'auteur applique un modèle de Markov pour modéliser la maintenance des installations de signalisation et du matériel roulant de la SNCF.

Notons simplement comme information supplémentaire, utile pour la lecture de la suite de ces travaux, qu'un certain nombre d'auteurs ont pu associer des modèles de croissance de population de type modèle de Verhulst, avec des modèles de Markov. Le modèle de Verhulst sera beaucoup utilisé dans cette thèse, on en trouvera une présentation détaillée dans la

partie II qui suit, ainsi que l'utilisation pratique d'une version généralisée dans les chapitres III et IV. On trouvera quelques exemples de cette association dans les travaux suivants [34-36].

Note sur l'adaptation des processus de Markov à la modélisation des systèmes complexes : Les modèles de Markov sont bien adaptés aux approches probabilistes de systèmes discrets évolutifs. Bien que très généraux, ils ont connu un développement particulier et récent dans les domaines de l'imagerie, du traitement automatique des langages et d'une manière globale, de l'intelligence artificielle. En théorie de la décision, on le retrouve dans tous les domaines applicatifs, de l'économie à la santé, ainsi que dans la prévision et la description de nombreux processus industriels.

3.4. Les réductions des simulations de systèmes complexes

Parmi les approches théoriques et numériques qui permettent de modéliser et simuler les systèmes complexes, des théories récentes ont montré des résultats très impressionnants. On parle ici par exemple, de la méthode LaTin de Pierre Ladevèze [37], des méthodes de décomposition orthogonale (POD) et de décomposition propre généralisée (PGD) notamment de Francisco Chinesta [38], et de l'intérêt de la Γ -convergence de Ennio de Giorgi [39] ou de la théorie des méconnaissances, Pierre Ladevèze [40]. Nous en présentons les grandes lignes ci-dessous, la PGD quant à elle sera également citée dans la partie II, évidemment succinctement, et d'ailleurs nous mettrons en évidence en quoi notre travail peut s'en rapprocher et en quoi il peut être différent.

3.4.1. Méthode LaTin (Large Time Increment)

Cette méthode peut concerner tout modèle piloté par un système d'équations aux dérivées partielles, ou a fortiori différentielles. L'idée de base [41, 42], consiste à séparer le système en deux groupes d'équations selon leurs propriétés, d'un côté les équations linéaires, de l'autre les non-linéaires. La solution du problème est alors à l'intersection des deux groupes. Les difficultés sont ainsi séparées et c'est la clé de l'efficacité des algorithmes de ce type. En conséquence, une procédure itérative en deux étapes est mise en place, consistant en une succession de projections d'un de ces deux groupes (sous-espaces), sur l'autre. Le schéma se répète jusqu'à la convergence vers une solution comportant une erreur acceptable. Prenons un exemple décrit dans [43].

Soit un milieu continu décrit par une loi de comportement simple, donnée par $\dot{\varepsilon}(M, t) = A(\sigma(M, \tau), \tau \leq t)$. Ce milieu occupe un domaine Ω de frontière $\partial\Omega$ et est soumis à des forces de surface sur une partie de la frontière ainsi qu'à des forces de volume, sur un intervalle $[0, T]$. Appelons s la variable « champ » représentant l'état de contrainte $\sigma(M, t)$ et le taux de déformation correspondant $\dot{\varepsilon}(M, t)$: $s = (\sigma(M, t), \dot{\varepsilon}(M, t))$, $\forall M \in \Omega$. Cette variable « champ » doit vérifier trois relations : les conditions aux limites, la conservation de la quantité de mouvement (équation d'équilibre) et la loi de comportement ci-dessus, en chaque point du domaine. Dans la méthode LaTin, ces trois relations peuvent être associées en deux groupes distincts, le groupe A_d des champs admissibles, qui comprend les conditions aux

limites et les équations d'équilibre, ce groupe comprend des équations linéaires et concerne tout le domaine Ω , ce sont donc des conditions globales, et le groupe Γ des champs vérifiant la loi de comportement, qui comprend des équations non-linéaires, mais locales. Il va donc s'agir de construire un algorithme à deux phases qui consiste dans un premier temps à projeter un champ depuis A_d sur Γ , puis dans un deuxième temps de projeter le champ obtenu après la première étape depuis Γ sur A_d , comme indiqué sur la Figure 1.1 ci-dessous.

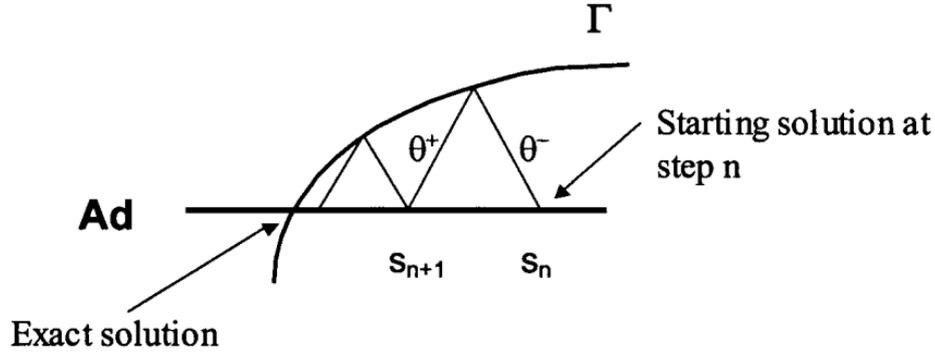


Figure 1 : Représentation schématique de la méthode LaTin, d'après [40]

Appelons $s_n(\sigma_n, \dot{\epsilon}_n)$, le champ appartenant à A_d , et $\hat{s}(\hat{\sigma}, \hat{\epsilon})$, le champ appartenant à Γ . La recherche du champ s_{n+1} , plus proche de la solution que s_n , se conduit en deux étapes. Une étape locale, dans laquelle on projette $s_n(\sigma_n, \dot{\epsilon}_n)$ sur Γ selon la direction θ^- , permettant d'obtenir $\hat{s}(\hat{\sigma}, \hat{\epsilon})$ appartenant à Γ , vérifiant ainsi les équations de comportement, en résolvant le système d'équations différentielles :

$$\begin{aligned} \hat{\epsilon}(M, t) - \dot{\epsilon}_n(M, t) &= \theta^-(M, t)(\hat{\sigma}(M, t) - \sigma_n(M, t)) \quad (I.5) \\ \hat{\epsilon}(M, t) &= A(\hat{\sigma}(M, \tau), \tau \leq t) \end{aligned}$$

Puis une étape globale permettant d'obtenir s_{n+1} en projetant \hat{s} sur A_d selon la direction θ^+ par :

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_{n+1}(M, t) - \hat{\epsilon}(M, t) &= \theta^+(M, t)(\sigma_{n+1}(M, t) - \hat{\sigma}(M, t)) \quad (I.6) \\ s_{n+1}(\sigma_{n+1}, \dot{\epsilon}_{n+1}) &\in A_d \end{aligned}$$

On voit que la méthode LaTin génère dès la première itération, une solution sur l'intervalle temporel complet de travail. Le choix des directions de projection est évidemment important sur l'efficacité de l'algorithme et de la convergence.

On trouvera d'autres détails par exemple dans [44-46], y compris dans ses liens possibles avec la PGD [47]. Cette méthode est remarquable et en rupture avec l'algorithmique classique.

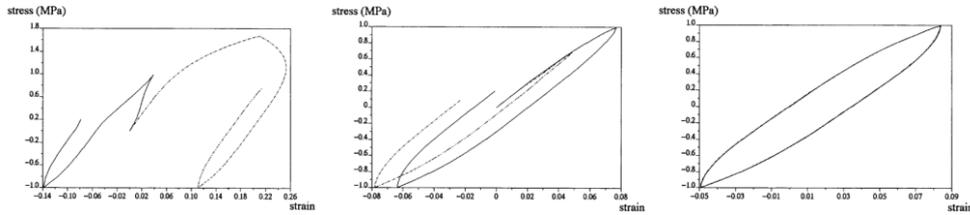


Figure 2 : Un exemple de convergence vers un cycle de traction compression d'un milieu viscoélastique viscoplastique avec la méthode LaTin, on a le premier cycle à gauche, représenté dans un diagramme contrainte déformation. Le deuxième cycle est représenté au centre. A droite, on a représenté le 4ème cycle, d'après [43]

Elle fait partie de la classe de ce que l'on a appelé « la réduction de modèles », bien que l'appellation ait, à notre sens, été mal choisie car laissant croire qu'un modèle pouvait préexister et qu'on devait alors le simplifier, ce qui n'est bien sûr pas le cas.

3.4.2. Méthodes de décomposition POD et PDG

La décomposition propre orthogonale (POD), ou décomposition orthogonale aux valeurs propres, est une autre méthode numérique susceptible de modéliser des problèmes complexes de nature très variée, et qui permet de diminuer considérablement la complexité d'un système d'équations aux dérivées partielles. Elle a été initiée à partir des travaux de Kari Karhunen en 1946 sur une théorie spectrale de processus stochastiques [48] et est à relier avec l'analyse en composantes principales (ACP), bien connue, et que nous ne développerons pas ici. Les premiers articles l'ont établie en mécanique des fluides pour l'analyse de la turbulence en remplaçant l'équation de Navier-Stokes par un système simplifié [49]. La présentation générale est particulièrement bien faite dans le document de cours de Bérengère Podvin [50]. Il s'agit d'extraire de façon statistique une certaine organisation présente dans un signal stochastique.

Si on considère un champ (ou plus généralement un tenseur) $u(x, t)$, il pourra être approximé par la décomposition :

$$u(x, t) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i(t) \phi^i(x) \quad (I.7)$$

Les fonctions $\phi^i(x)$ étant déterminées et leurs amplitudes temporelles (de moyenne nulles), inconnues. Il s'agit d'avantage d'une idée que d'une présentation, les travaux sur la POD ont, et sont toujours, très importants. Mais l'on constate qu'il s'agit principalement d'une modélisation *a priori* si l'on veut résoudre le problème directement, par exemple en choisissant pour fonctions des polynômes de Legendre ou des polynômes de Chebychev.

En revanche, si l'on souhaite connaître la base réduite des éléments qui ont le plus d'influence sur le champ, la méthode POD se rapprochera davantage d'une méthode *a posteriori*. Par

exemple, en considérant la méthode des échantillons (ou des instantanés), dite *snapshots method*, (il y en a d'autres), on pourra considérer l'échantillonnage de la variable champ en n variables spatiales et p variables temporelles, ce qui conduit à la matrice suivante :

$$U = \begin{bmatrix} u(x_1, t_1) & \dots & u(x_n, t_1) \\ \vdots & \dots & \vdots \\ u(x_1, t_p) & \dots & u(x_n, t_p) \end{bmatrix} \quad (I.8)$$

Il reste ensuite à calculer les valeurs propres et les vecteurs propres de la matrice de covariance C définie par : $C = \frac{1}{p-1} U^T U$. Ces valeurs et vecteurs propres seront alors reliés aux fonctions à choisir.

La décomposition propre orthogonale a été fortement développée, et couplée à d'autres techniques, particulièrement en mécanique des fluides et en sciences de l'imagerie [51, 52], où de nouveaux résultats sont régulièrement obtenus.

Quant à la méthode PGD, décomposition propre généralisée, nous l'avons rapidement comparée à notre proposition de modélisation simplifiée dans le chapitre II. Cette méthode très connue a été initiée par Francisco Chinesta et ses collègues, [53-55], et il s'agit clairement d'une méthode *a posteriori*. La construction de la solution approchée se fait sans aucune information initiale. Cette méthode peut être considérée comme une généralisation de la méthode LaTin que l'on a présentée plus haut. On rappelle simplement que si A est un opérateur différentiel dépendant de u : $A(u) = f$, la solution PGD sera exprimée de façon séparée comme une somme sur m de d produits de fonctions :

$$u(x_1, \dots, x_m) = \sum_{i=1}^d \prod_{j=1}^m F_j^i(x_j) = \sum_{i=1}^d F_1^i(x_1) \dots F_m^i(x_m) \quad (I.9)$$

On trouvera dans les références suivantes de nombreux éléments justifiant la très forte réduction de calcul obtenue par cette théorie. Pour aller plus loin, cette méthode permet de résoudre des systèmes dont la forte complexité rendait les solutions jusqu'à présent inaccessibles.

La preuve peut être faite [53, 56] de la réduction par le traitement PGD, d'un problème initial par éléments finis de dimension 10^{40} , en un problème PGD de dimension 10^5 . D'autres éléments importants montrent plus généralement qu'il est possible de remplacer un problème comportant n^d nœuds, par son équivalent après réduction par la PGD de $n \times d$ nœuds, toujours d'après [56], puis d'autre part, dans [57-59] des éléments sur la résolution d'équations aux dérivées partielles stochastiques par la PGD. De même, une vision de la PGD associée à la théorie de l'homogénéisation est utilisée en [60, 61] ou de la séparation des variables et applications en rhéologie, thermique, [62-64] et en simulation en temps réel [65-69].

Note sur l'adaptation des méthodes LaTin, POD et PGD, aux modélisations de systèmes complexes : les méthodes numériques exposées, qui permettent de réduire fortement les

dimensions d'un problème, sont très bien adaptées aux systèmes décrits par une série d'équations au dérivées partielles ou d'équations différentielles. Plus généralement, elles permettent de modéliser des problèmes qui ne sont même pas envisageables avec des méthodes classiques, tant le rang du système est élevé. Dans tous les cas, ces méthodes, et en particulier la PGD, sont particulièrement bien adaptées aux simulations de systèmes complexes en temps réel.

3.4.3. Théorie des méconnaissances

Parmi les différentes formes de complexité, il en est une dont l'importance industrielle est très forte, il s'agit de la gestion des incertitudes, de la prise en compte de données partielles, incomplètes ou présentant une fiabilité discutable. Il revient à Pierre Ladevèze d'avoir formaliser cet aspect de la conception réel en ingénierie dans ce qu'il a appelé, la théorie des méconnaissances.

Cette théorie permet d'évaluer une enveloppe de solutions d'un problème dont les données sont incertaines. Il s'agit alors d'associer à la sous-structure E du problème dans laquelle une méconnaissance apparaît, un couple de variable qu'il note (m_E^-, m_E^+) , appelé méconnaissances de base, et qui va pondérer le problème, soit sous la forme d'une loi de probabilité, soit sous la forme d'une variable stochastique, [68-70].

Adaptation aux système complexes : Cette théorie est d'un intérêt pratique majeure dans tous les domaines puisqu'elle permet de traiter des problèmes incomplets ou de prendre en compte les problèmes de fiabilité des données. Elle est applicable aux situations de conception pour lesquelles des incertitudes variées sont à prendre en compte.

3.4.4. Conclusion sur les méthodes de réduction

Après cette brève présentation qui n'a aucune prétention à l'exhaustivité, il est clair que les approches de la complexité sont nombreuses, très performantes, et montrent des qualités variées qui les rendent plus ou moins adaptées aux types de complexité auxquels on s'attachera. La suite de ce premier chapitre sera consacrée d'une part à quelques personnalités scientifiques qui ne pouvaient guère être présentées auparavant, malgré leur apport indéniable aux modèles complexes. Enfin, nous reviendrons dans le giron de la mécanique afin de parcourir rapidement les différentes façons de prendre en compte les problèmes complexes en mécanique.

3.5. Les systèmes complexes en mécanique des solides

Dans ce paragraphe, nous nous attacherons à savoir si les problèmes complexes possèdent une signature particulière en mécanique des solides, d'autant que l'une de nos applications (voir la partie IV) concernera précisément cette discipline. Trois théories nous paraissent relever ce défi de pouvoir les résoudre ou en tout cas, d'en donner une description et une

solution approchées, en dehors des méthodes numériques précédentes qui possèdent bien sûr aussi des applications mécaniques. Il s'agit de la méthode de l'état local en mécanique des matériaux, des méthodes d'homogénéisation, appelées aussi méthodes de changement d'échelles, et enfin de l'ensemble des mécaniques de gradients élevés, ou des mécaniques fondées sur des cinématiques plus fines que la cinématique habituelle de premier gradient. Nous en donnons quelques éléments ci-dessous.

3.5.1. *La méthode de l'état local*

Il s'agit ici d'utiliser une généralisation de la thermodynamique des processus irréversibles, avec toute sa puissance, pour modéliser les phénomènes les plus divers, en particulier leurs dissipations, dans un cadre formel bien défini compatible avec les grandes lois et principes de la physique, mais aussi, dans une certaine mesure, de comprendre l'insatisfaction associée à son côté phénoménologique. Donc, parmi les méthodes que nous balayons rapidement dans ce chapitre pour décrire les possibilités de modéliser un système complexe, la méthode de l'état local fait figure de poids lourd en mécanique et même plus généralement en physique. Elle a été, et est toujours très utilisée comme une vraie méthode de construction de modèles multiphysiques dans un cadre rigoureux.

On trouve une présentation de la méthode de l'état local dans les ouvrages de Paul Germain comme dans ses cours de l'école polytechnique, bien sûr, initiée par l'énoncé des puissances virtuelles [39, 71,-7]. Mais nous reprendrons le petit paragraphe de l'ouvrage de mécanique des matériaux de Jean Lemaitre et al. [73] pour la présenter, pourquoi mal paraphraser ce qui est clair et concis ! :

« La méthode de l'état local postule que l'état thermomécanique d'un milieu matériel, en un point et à un instant donné, est complètement défini par la connaissance à cet instant des valeurs d'un certain nombre de variables ne dépendant que du point considéré. Les dérivées temporelles de ces variables n'intervenant pas pour définir l'état, cette hypothèse implique que toute évolution puisse être considérée comme une succession d'états d'équilibre. On exclut ainsi du champ d'application de cette théorie les phénomènes ultrarapides pour lesquels les échelles de temps des évolutions seraient de l'ordre des temps de relaxation de retour à l'équilibre thermostatique (vibrations atomiques). C'est par le choix de la nature et du nombre des variables d'état que l'on décrit plus ou moins finement les phénomènes physiques.

Les processus ainsi définis seront thermodynamiquement admissibles si, à chaque instant de l'évolution, l'inégalité de Clausius-Duhem est satisfaite. Les variables d'état, appelées aussi variables thermodynamiques ou variables indépendantes, sont les variables observables et les variables internes. » On trouvera d'autres compléments dans [74-76].

Brièvement, le cadre de la méthode classe d'abord les variables, en variables d'état, dont les variables observables imposées par le cadre de la physique, et variables internes qui vont caractériser les dissipations. C'est ici que l'insatisfaction peut s'exprimer car le choix de ces

variables reste libre au modélisateur, et donc à sa compréhension plus ou moins intuitive des phénomènes.

On postule alors l'existence d'un potentiel thermodynamique duquel dérivent les lois d'état, on peut par exemple choisir l'énergie libre de Gibbs. L'ensemble des lois d'état permet de définir les variables associées (les forces thermodynamiques), en dualité avec les variables d'état.

Pour les variables internes qui caractérisent les dissipations, ces lois d'état les définissent, mais ne donnent pas leur évolution. Il faudra pour cela introduire un deuxième potentiel, le pseudo-potentiel de dissipation et les lois complémentaires qui en découlent qui décrivent les dissipations. L'inégalité de Clausius-Duhem assurera la positivité de cette dissipation et on constate que les variables associées sont en dualité avec les variables d'état observables et internes.

Ainsi, des choix judicieux des variables et des potentiels, et de leur forme (convexité), découleront la rigueur globale de la modélisation, et permettra de vérifier d'une façon quasi automatique le deuxième principe de thermodynamique (Figure 3).

Variables d'état		Variables associées	Variables flux	Variables associées
Observables	Internes			
ϵ		σ	$-\dot{\mathbf{V}}_K$	\mathbf{A}_K
T		s	\vec{q}	$-\frac{\mathbf{g} \vec{\text{rad}} T}{T}$
	\mathbf{V}_K	\mathbf{A}_K	$\vec{J}_{\chi_k}^*$	$T \mathbf{g} \vec{\text{rad}} \left(-\frac{\mu_k^*}{T} \right)$

Figure 3 : Tableau des dualités entre variables internes et variables associées (à gauche) et entre les variables flux et les variables associées (à droite) d'après [73], exprimées lors de couplages avec la chimie, ici la variable flux correspondante est associée au gradient des potentiels chimiques massiques μ_k^* .

Note sur l'adaptation de la méthode de l'état local à la modélisation des systèmes complexes : La méthode de l'état local est surtout adaptée à la modélisation de systèmes complexes multiphysiques pour rendre compte des dissipations dans un cadre thermodynamique rigoureux. Elle a été adaptée à de nombreuses situations en particulier en physique et mécanique des matériaux.

3.5.2. Les méthodes d'homogénéisation

Les méthodes d'homogénéisation font clairement partie de celles qui sont utilisées pour modéliser des systèmes complexes. Ceux-ci doivent présenter une particularité, finalement assez générale : disposer de plusieurs échelles spatiales ou temporelles au sein desquelles certains phénomènes peuvent apparaître, et entraîner une répercussion sur une variable ou

un processus d'une autre échelle. Dans ce cas, savoir changer d'échelle devient une nécessité pour le modélisateur. Prenons un exemple, lors d'un choc crânien, un hématome sous-dural peut survenir. Le choc a clairement lieu à une échelle macroscopique, la tête, l'objet qui vient l'impacter, l'hématome sous-dural quant à lui, intervient après la rupture d'une veine corticale entre le sinus sagittal supérieur et le cerveau, l'échelle de la paroi de ces veines (leur épaisseur) est infra millimétrique, [77-79]. On voit bien que s'il faut prendre en compte les quantités physiques qui s'expriment lors du choc à l'échelle macroscopique, et les transposer à l'échelle de la paroi veineuse, ou au contraire, prévoir les effets macroscopiques d'une modification à l'échelle locale de la veine, dans tous les cas, il y aura plusieurs échelles à franchir. De nombreux outils ont été mis au point et existent dans ce domaine [80-84]. Leurs différences viennent de la nature des microstructures à homogénéiser, leurs géométries, leur répartition. On trouve par exemple des méthodes très bien adaptées à des milieux périodiques, [85-88], [57]. D'autres méthodes donnent des solutions exactes pour les milieux aléatoires. D'autres enfin privilégient des approches statistiques [89-91]. La littérature est très dense sur le sujet, on peut également voir des liens entre ces approches, comme dans [92], où les auteurs développent les articulations de l'homogénéisation avec la Γ -convergence, dont nous dirons un mot plus loin. On présente ci-dessous quelques résultats sur les méthodes asymptotiques, qui ont été initiées en France principalement, pour les milieux périodiques en élasticité linéaire.

Le point principal de cette méthode consiste à constater que pour une structure périodique, si L représente la dimension caractéristique de la structure, et si η est un petit paramètre, ηL définira la dimension du volume élémentaire représentatif (VER). On appelle alors X , variable lente, la variable décrivant les variations des propriétés à l'échelle de la structure. On appelle Y , variable rapide, la variable locale d'espace décrivant les variations de propriétés à l'échelle du VER avec $\eta = \frac{X}{Y}$. Les variables "champ" peuvent donc s'exprimer en fonction de ces deux variables, et être développés par rapport à η :

$$u(X, Y) = u_0(X, Y) + \eta u_1(X, Y) + \eta^2 u_2(X, Y) + \dots \quad (I. 10)$$

d'où également pour le champ de déformation :

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{Xij} + \frac{1}{\eta} \varepsilon_{Yij} \text{ ou } \varepsilon = \varepsilon_X + \frac{1}{\eta} \varepsilon_Y \quad (I. 11)$$

où ε_X et ε_Y sont les tenseurs relatifs aux variables lente et rapide, respectivement. De même pour les opérateurs différentiels : si $\sigma = C : \varepsilon$ représente la loi de Hooke du milieu, le champ de contrainte dépendra aussi des variables X et Y . On pourra alors écrire :

$$\text{div}(C : \varepsilon) = \text{div}_X(C : \varepsilon) + \frac{1}{\eta} \text{div}_Y(C : \varepsilon) \quad (I. 12)$$

où div_X et div_Y sont les divergences par rapport aux variables lente et rapide. Alors, on peut réécrire en la développant, l'équation d'équilibre

$$\text{div } \sigma(X, Y) + f = 0 \quad (I. 13)$$

pour obtenir trois équations indépendantes en fonction des puissances successives de η :

$$\text{div}_Y(C: \varepsilon_Y(u_0)) = 0 \quad (I.14)$$

$$\text{div}_Y(C: \varepsilon_Y(u_1)) + \text{div}_Y(C: \varepsilon_X(u_0)) + \text{div}_X(C: \varepsilon_Y(u_0)) = 0 \quad (I.15)$$

$$\text{div}_Y(C: \varepsilon_Y(u_2)) + \text{div}_Y(C: \varepsilon_X(u_1)) + \text{div}_X(C: \varepsilon_Y(u_1)) + \text{div}_X(C: \varepsilon_X(u_0)) + f = 0 \quad (I.16)$$

u_0, u_1 , et u_2 , sont les solutions du problème variationnel suivant :

$$\begin{aligned} \text{Trouver } \vartheta \in \mathcal{D}_{per}, \forall \vartheta^* \in \mathcal{D}_{per}, \int_M \text{Tr}[C: \varepsilon_Y(\vartheta): \varepsilon_Y(\vartheta^*)] d\Omega = \int_M g \vartheta^* d\Omega \quad (I.17) \\ \text{avec } g = -\text{div}(C: \varepsilon_Y(u)) \text{ et } \mathcal{D}_{per} = \{u, u^+ = u^-\}, \end{aligned}$$

où u^+ et u^- représentent les valeurs du déplacement u sur deux faces opposées du VER, et sont égales.

Les principaux résultats utiles que l'on obtient sont alors :

- u_0 ne dépend que de la variable X : $u_0 = u_0(X)$, c'est donc le déplacement moyen.
- u_0 et u_1 sont linéairement dépendants et il existe donc un tenseur symétrique du 4^{ème} ordre H tel que $C: \varepsilon_Y(u_1) = H: \varepsilon_X(u_0)$

A partir de ce résultat, on peut obtenir l'équation d'équilibre du milieu périodique :

$$\text{div}_X \int_M (H + C) \varepsilon_X(u_0) d\Omega + f \int_M d\Omega = 0 \quad (I.18)$$

On notera que u_0 représente le déplacement homogénéisé sur le VER pendant que u_1 représente la perturbation de ce déplacement. M représente le VER.

Finalement, si la loi de Hooke homogénéisé s'écrit $\sigma^* = C^*: \varepsilon^*$, reliant le tenseur des contraintes macroscopique σ^* à la déformation macroscopique ε^* , on en déduit l'expression du tenseur d'élasticité effective :

$$C^* = \frac{1}{\text{vol}(M)} \int_M (H + C) dM \quad (1.19)$$

Sans rentrer dans davantage de détails, on constate que l'expression ci-dessus est le résultat exact de la rigidité macroscopique d'un milieu parfaitement périodique. On peut également trouver l'expression de la contrainte locale dans le VER par $\sigma_{loc} = (H + C) \varepsilon_X(u_0)$. On voit que cet exemple illustre bien les capacités de changement d'échelle que permettent les techniques d'homogénéisation (sens micro \rightarrow macro) ou de localisation (sens macro \rightarrow micro).

Note sur l'adaptation des méthodes d'homogénéisation à la modélisation des systèmes complexes multi échelles : L'homogénéisation est une méthode fondamentale pour modéliser les systèmes complexes multi échelles, que ce soit en espace ou en temps, et peut les simplifier par « moyennisation » en passant à une échelle plus macroscopique, sans pour autant négliger les phénomènes locaux.

3.5.3. Les approches de la mécanique des milieux continus généralisés

Nous adaptions ci-dessous le schéma de Samuel Forest, voir Figure 1.4 page suivante, dans son cours de l'école des mines de Paris [93], qui décrit bien selon nous la position relative de ces modélisations. Si la méthode de l'état local décrite plus haut, s'attache aux comportements complexes de milieux matériellement simples, les milieux continus généralisés concernent le comportement de milieux matériellement complexes. On peut évidemment aussi y attacher des comportements complexes.

On retrouve dans cette figure les quatre principales catégories des modèles existant, depuis les travaux des frères Cosserat en 1909 [94], et les milieux micromorphes d'Eringen et Mindlin [95-97], la théorie du second gradient [98-100] et les modèles à gradient de variables internes, qui prennent en compte les effets de voisinage d'un point par des gradients d'ordre supérieur des déformations et des variables internes [101]. Naturellement, de nombreux travaux plus récents et des généralisations existent [102-104], mais sortent du cadre de ce rappel.

Pour le second gradient, disons simplement que la densité volumique de puissance des efforts intérieurs peut s'écrire :

$$p_i(v) = -\{\sigma \cdot \nabla v + \sigma_{\nabla} \cdot \nabla \nabla v\} \quad (I.20)$$

Où σ représente le tenseur des contraintes usuelles, et σ_{∇} , le tenseur du 3^{ème} ordre des contraintes complémentaires et v le champ des vitesses.

On retiendra de ces modèles qu'il se fondent sur une cinématique enrichie par rapport à celle du premier gradient. Ces modèles permettent également d'introduire une distance caractéristique interne au milieu et permettent également de conserver une approche continue à de très petites échelles, de l'ordre de quelques distances atomiques.

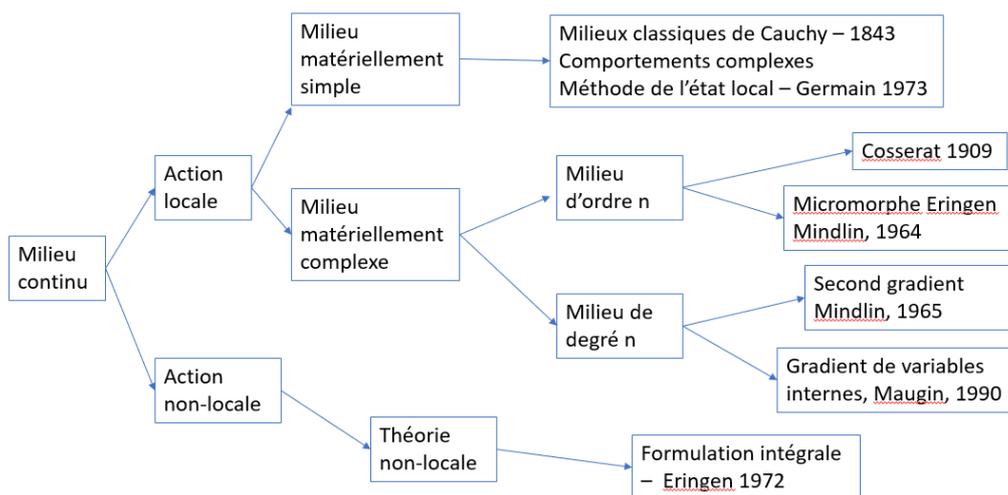


Figure 4 : Les modèles de systèmes complexes de la mécanique des milieux continus généralisés, d'après S. Forest [93]

Note sur l'adaptation des théories de gradients supérieurs aux systèmes complexes : On a vu dans ce résumé, tout l'intérêt des approches de milieux continus généralisés. L'idée de prendre en compte le comportement d'un milieu complexe en enrichissant la cinématique est naturelle et riche de modèles intéressants. En particulier, cela conduit à des modèles qui simulent des comportements inaccessibles aux modèles classiques, on pense par exemple à la nanomécanique, avec la prise en compte des tensions de surface, de forces surfaciques, etc.. Ils restent cependant relativement complexes à mettre en œuvre.

4. Conclusion

Nous avons tenté dans ce premier chapitre, de donner notre propre définition de ce que pouvait être un système complexe, puis de donner une idée, certes bien incomplète, des modélisations possibles qui en ont été faites dans la littérature. Cela nous a permis de classer de façon plus pratique les différents types de modèles complexes et de montrer en quoi les modélisations présentées succinctement ici sont plus ou moins bien adaptées à tel ou tel type de système complexe.

Tout n'est pas abordé et ce n'était ni possible, ni notre objectif. Nous pensons par exemple à la modélisation continue de systèmes biologiques particulièrement complexes, qui ont fait l'objet de modélisations dans lesquels les effets cellulaires sont pris en compte dans des stimulus multiphysiques [105-106]. De même et toujours dans le domaine de la biomécanique, des analyses systématiques des simulations en temps réel de systèmes macroscopiquement complexes comme le système musculaire ou le système squelettique, sont construites dans un esprit translationnel, intégrant les dispositifs expérimentaux et les validations cliniques [107-108].

De même, de nouveaux métamatériaux apparaissent, ils peuvent être considérés comme de nouveaux systèmes complexes au comportement originaux qu'il faut pouvoir modéliser. C'est par exemple le cas des matériaux pantographiques qui font l'objet de nombreuses recherches au cœur de nos préoccupations, intégrant parfois les outils de Γ -convergence et d'homogénéisation [109-110].

Enfin, nous nous sommes intéressés à des recherches qui sont encore plus macroscopiques, sur les systèmes de systèmes technologiques, tels qu'on les étudie à l'université de technologie de Compiègne dans le cadre du Labex MS2T [111]. Leur modélisation pose des défis encore plus difficiles, même si certains de nos items les recouvrent en partie, puisqu'il s'agit notamment :

- D'étudier les interactions et les coopérations entre les systèmes : gestion des flux d'information dans les réseaux, traitement distribué de l'information.
- D'étudier la gestion des incertitudes, leur modélisation et leur robustesse
- D'étudier leur conception, leur optimisation multiniveau et multi-physique, leur synchronisation et leur sûreté de fonctionnement
- D'étudier la dynamique particulière des systèmes de systèmes.

Il n'était pas dans notre objectif de nous porter à ce niveau macroscopique mais le défi existe. Dans ce cadre, nous avons porté notre effort dans une voie qui nous paraît encore à creuser, celle de la simplification à l'extrême des modélisations des systèmes complexes que nous présenterons dans le chapitre II, puis nous passerons aux applications, notamment dans le cadre de l'épidémie où ces sujets font déjà l'objet d'idées nouvelles [112-114], puis dans le domaine des matériaux.

5. Bibliographie

- [1] G. Deffuant, Modéliser des systèmes complexes : quelques pistes pour relever le défi, mémoire d'habilitation à diriger les recherches, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand, 3 mars 2004
- [2] G. Deffuant, A. Banos, D. Chavalarias, C. Bertelle, N. Brodu, P. Jensen, A. Lesne, J.-P. Müller, E. Perrier, F. Varenne, Visions de la complexité. Le démon de Laplace dans tous ses états, *Natures Sciences Sociétés*, 23, pp. 42-53, 2015
- [3] P.S. Laplace, *Essai philosophique sur les probabilités*, Paris, Courcier, 1814
- [4] P. Germain, cours de l'école polytechnique, Introduction, Tome 1, édition 1982
- [5] F. Li Vigni, Le projet épistémique des sciences des systèmes complexes, *Philosophia Scientiae*, 24, 1, pp. 181-200, 2020
- [6] F. Li Vigni, Histoire et sociologie des sciences de la complexité, Collection Modélisations, Simulations, Systèmes Complexes, Ed. Editions Matériologiques, 2022
- [7] Voir à ce sujet leur site, www.santafe.edu, 2022
- [8] D. Aubin, A. Dahan Dalmedico, Writing the history of dynamical systems and chaos: Longue Durée and revolution, disciplines and cultures, *Historia Mathematica*, 29, 3, pp. 273–339, 2002
- [9] J.-L. Le Moigne, *La modélisation des systèmes complexes*, Dunod, 1990
- [10] P. Collard, S. Verel, M. Clergue, *Systèmes complexes : une introduction par la pratique*, Presses polytechniques et universitaires romandes, EPFL Press, Lausanne, 2013
- [11] H. Zwirn, *Les systèmes complexes : Mathématiques et biologie*, Odile Jacob, 2006
- [12] G. Weisbuch, H. Zwirn, Qu'appelle-t-on aujourd'hui les sciences de la complexité ? Ouvrage collectif, Philosophie des sciences, Edition Vuibert, 2010
- [13] H. Zwirn, J.-L. Delahaye, Impredictability and computational irreducibility, arxiv.org/abs/1111.4121v2, 2012
- [14] J. Barrow-Green, Poincaré and the Three-Bodies Problem, *History of Mathematics*, Vol. 11, Ed. American Mathematical Soc., 1997

- [15] H. Poincaré, *Les méthodes nouvelles de la mécanique céleste*, Tome 3, Paris, Gauthier-Villars, 1997
- [16] E.N. Lorentz, *Deterministic Nonperiodic Flow*, *Journal of the Atmospheric Sciences*, 20, 2, pp. 130-141, 1963
- [17] E.N. Lorenz, *The butterfly effect, The essence of Chaos*, Appendix 1, University of Washington Press, Seattle, pp. 181-184, 1993
- [18] J. Moser, *New results on the stability of periodic motions*, *Proceedings of the international congress of mathematicians*, 14, Stockholm, 1962
- [19] R. Thom, *Travaux de Moser sur la stabilité des mouvements périodiques*, *Séminaire N. Bourbaki*, Exposé 264, pp. 297-309, 1964
- [20] G. Archambeau, *Etude de la dynamique autour des points de Lagrange*, thèse de doctorat, université de Paris-Sud XI, Faculté des Sciences d'Orsay, 2008
- [21] A. N. Kolmogorov, *On the Conservation of Conditionally Periodic Motions under Small Perturbation of the Hamiltonian*, *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 98, 1954
- [22] V.I. Arnold, *Proof of a Theorem by A. N. Kolmogorov on the invariance of quasi-periodic motions under small perturbations of the Hamiltonian*, *Russian Math. Survey*, 18, pp. 13-40, 1963
- [23] J. Moser, J.K. Moser, *On invariant curves of area-preserving mappings of an annulus*, *Nach. Akad. Wiss. Göttingen, Math. Phys. Kl. II* 1, pp 1-20, 1962
- [24] Tien-Yien Li, J. A. Yorke, *Period three implies chaos*, *American Mathematical Monthly*, 82, pp. 985-992, 1975
- [25] O. E. Rössler, *An equation for continuous chaos*, *Physics Letters A*, 57, 5, pp.397-398, 1976
- [26] D. Ruelle, *Statistical Mechanics, Rigorous Results*, New York, Benjamin, 1969
- [27] J.M. Souriau, C. Cushman. *Structure of dynamical systems: a symplectic view of physics*, T. 149, Springer Science & Business Media, 1997
- [28] R. Thom, *Paraboles et catastrophes*, Flammarion, Paris, 1983
- [29] C. Godbillon, *Géométrie différentielle et mécanique analytique*, Paris, Herman, 1969
- [30] I. Prigogine, *Temps et devenir, A propos de l'histoire du temps*, Ed. Clinamen, 1993
- [31] J.M. Giovannoni, *Quelques aspects de la thermodynamique des processus irréversibles*, communication de la chaire de la mécanique de la turbulence de l'EPFL, *Bulletin technique de la Suisse Romande*, 103, 23, pp. 301, 305, 1977
- [32] I. Prigogine, *Introduction to Thermodynamics of Irreversible Processes*, 3rd Ed. John Wiley, 1967

- [33] W. Lair, Modélisation dynamique de systèmes complexes pour le calcul de grandeurs fiabilistes et l'optimisation de la maintenance, thèse de doctorat de mathématiques, université de Pau et des pays de l'Adour, 2011
- [34] I. Nasell, Extinction and quasi-stationarity in the Verhulst Logistic Model, *Journal of Theoretical Biology*, 211, 1, pp. 11-27, 2001
- [35] G.H. Weiss, M. Dishon, On the asymptotic behavior of the stochastic and deterministic model of an epidemics, *Mathematical Biosciences*, 11, 3-4, pp. 261-265, 1971
- [36] A.A. Dubkov, A.A. Kharsheva, Transient and stationary characteristics of the Malthus-Verhulst-Bernoulli model with non-gaussian fluctuating parameters, *Phys. Rev. E Stat. Nonlin. Soft Matter Phys.*, 89, 5, 052146, 2014
- [37] P. Ladevèze, *Nonlinear Computational Structural Mechanics*, New York, Springer-Verlag, 1998
- [38] F. Chinesta, E. Cueto, *PGD-Based Modeling of Materials, Structures and Processes*, Ed. Springer, 2015
- [39] P. Germain, *Cours de mécanique des milieux continus*, Masson, 1973
- [40] P. Ladevèze, G. Puel, T. Romeuf, Lack of knowledge in structural model validation, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195, 37-40, pp.4697-4710, 2006
- [41] P. Ladevèze, Sur une nouvelle famille d'algorithmes en mécanique des structures, *Comptes Rendus, Académie des Sciences Paris*, 300, 2, pp.41-44, 1985.
- [42] P. Ladevèze, *Mécanique Non Linéaire des Structures: Modélisation et Calcul*, Hermes, Paris, 1995.
- [43] M. Stehly, Y. Rémond, On numerical simulation of cyclic viscoplastic and viscoelastic constitutive laws with the large time increment method, *Mechanics of Time-Dependent Materials*, 6, pp. 147-170, 2002
- [44] P. Boisse, P. Ladevèze, P. Rougee, A large time increment method for elastoplastic problems, *European Journal of Mechanics, A/Solids* 8, 4, pp.257–275, 1989
- [45] P. Boisse, P. Bussy, P. Ladevèze, A new approach in non linear mechanics: The large time increment method, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 29, pp.647–663, 1990
- [46] J.Y. Cognard, P. Ladevèze, A large time increment approach for cyclic viscoplasticity, *International Journal of Plasticity* 9, pp.141–157, 1993
- [47] R. Scanff, S. Nachar, P.-A. Boucard, D. Néron, A study on the LATIN-PGD Method: Analysis of some variants in the light of the latest développements, *Archives of Computational Methods in Engineering*, 28, pp. 3457–3473, 2021
- [48] K. Karhunen, Zur Spektraltheorie Stokastischer Prozesse, *Annales Academiae scientiarum Fennicae, A. 1, Mathematica-physica*, 34, 1946

- [49] G. Berkooz, P. Holmes, J.L. Lumley, The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flow, *Annual Review of Fluid Mechanics*, 25, 1, pp. 539-575, 1993
- [50] B. Podvin, Introduction à la décomposition orthogonale aux valeurs propres ou P.O.D., polycopié CNRS, LIMSI, Orsay, 2001, <https://perso.limsi.fr/podvin/intropod.pdf>
- [51] S. Fresca and A. Manzoni. Real-time simulation of parameter-dependent fluid flows through deep learning-based reduced order models. *Fluids*, 6, 7, 259, 2021
- [52] C. Gräßle, M. Hinze, J. Lang, and S. Ullmann. POD model order reduction with space-adapted snapshots for incompressible flows. *Adv. Comput. Math.*, 45, pp. 2401–2428, 2019
- [53] A. Ammar, B. Mokdad, F. Chinesta, R. Keunings, A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered in kinetic theory modeling of complex fluids, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 139, pp. 153–176, 2006
- [54] A. Ammar, B. Mokdad, F. Chinesta, R. Keunings, A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered in kinetic theory modeling of complex fluids. Part II : transient simulation using space-time separated representations, *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 144, pp. 98–121, 2007
- [55] P. Ladevèze, J.C. Passieux, D. Néron, The LATIN multiscale computational method and the Proper Generalized Decomposition, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199, pp. 1287-1296, 2010
- [56] M. Saleh, Etude mathématique et numérique des méthodes de réduction dimensionnelle de type POD et PGD, thèse de doctorat, université de La Rochelle, 2015
- [57] A. Nouy, A generalized spectral decomposition technique to solve a class of linear stochastic partial differential equations. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg*, 196, pp. 4251-4537, 2007
- [58] A. Nouy, Generalized spectral decomposition method for solving stochastic finite element equations : invariant subspace problem and dedicated algorithms. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg*, 197, pp. 4718-4736, 2008
- [59] A. Nouy, O. Le Maître, Generalized spectral decompositions for stochastic nonlinear problems, *J. Comput. Phys*, 8, pp. 283-288, 2007
- [60] P. Ladevèze, A. Nouy, On a multiscale computational strategy with time and space homogenization for structural mechanics, *Comput. Methods Appl. Mech.*, 192, pp. 3061–3087, 2003
- [61] A. Nouy, P. Ladevèze, Multiscale computational strategy with time and space homogenization: a radial-type approximation technique for solving micro problems. *Int. J. Multiscale Comput. Engrg*, 170, 2, pp. 557–574, 2004
- [62] A. Ammar, M. Normandin, F. Daim, D. Gonzalez, E. Cueto, F. Chinesta, Non incremental strategies based on separated representations: Applications in computational rheology. *Communications in Mathematical Sciences*, 8, (3, Sp. Iss. SI), pp. 671-695, 2010

- [63] C. Ghnatios, F. Chinesta, E. Cueto, A. Leygue, P. Breitkopf, P. Villon, Methodological approach to efficient modeling and optimization of thermal processes taking place in a die: application to pultrusion. *Composites Part A : Applied Science and Manufacturing*, 42, pp. 1169-1178, 2011
- [64] D. Gonzalez, A. Ammar, F. Chinesta, E. Cueto, Recent advances on the use of separated representations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 81, pp. 637-659, 2010
- [65] S. Niroomandi, I. Alfaro, E. Cueto, F. Chinesta, Model order reduction for hyperelastic materials, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 81, pp. 1180-1206, 2010
- [66] N. Lauzeral, D. Borzacchiello, M. Kugler, D. George, Y. Rémond, A. Hostettler, F. Chinesta, Computer methods and programs in biomedicine, 170, pp. 95-106, 2019
- [67] N. Lauzeral, D. Borzacchiello, M. Kugler, D. George, Y. Rémond, A. Hostettler, F. Chinesta, Shape parametrization of bio-mechanical finite element models based on medical images, *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering: Imaging & Visualization*, 7, 5-6, pp. 480-489, 2019
- [68] I. Niroomandi, E. Alfaro, F. Cueto, F. Chinesta. Accounting for large deformations in real-time simulations of soft tissues based on reduced-order models, *Comput. Methods Programs in Biomed.*, 105, 1, pp.1-12, 2010.
- [69] P. Ladevèze, A. Chouaki, Application of a posteriori error estimation for structural model updating, *Inverse Problems*, 15, pp. 49–58, 1999
- [70] D. Barthe, A. Deraemaeker, P. Ladevèze, S. Le Loch, Validation and updating of industrial models based on the constitutive relation error, *AIAA Journal*, 42, 7, pp. 1427–1434, 2004
- [71] P. Germain, The method of virtual power in continuum mechanics, II. Application to continuous media with micro-structure, *SIAM J. Appl.*, 25, pp. 556–575, 1973
- [72] G. Maugin, The method of virtual power in continuum mechanics: application to couple fields, *Acta Mech.*, 35, pp. 1–70, 1980
- [73] J. Lemaitre, J.L. Chaboche, A. Benallal, R. Desmorat, *Mécanique des matériaux solides*, 3^{ème} édition, Dunod, 2020
- [74] J. Kestin, J.R. Rice, *A critical review of thermodynamics*, Stuart Ed. Mono book, 1970
- [75] S. Nemat-Nasser, *Mechanics today*, Vol. I, II, III, IV, V. Pergamon Press, 1972-1980
- [76] C. Truesdell, *The elements of continuum mechanics*, Springer Verlag, 1966
- [77] R. Abdel Rahman, D. George, D. Baumgartner, M. Nierenberger, Y. Remond, S. Ahzi, An asymptotic method for the prediction of the anisotropic effective elastic properties of the cortical vein: superior sagittal sinus junction embedded within a homogenized cell element, *Journal of Mechanics of Materials and Structures*, 7, 6, pp.593-611, 2012

- [78] M. Nierenberger, Y. Rémond, S. Ahzi, A new multiscale model for the mechanical behavior of vein walls, *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 23, pp. 32-43, 2013
- [79] M. Kazempour, M. Baniassadi, H. Shahsavari, Y. Remond, M. Baghani, *Biomechanics and modeling in Mechanobiology* 18, pp. 969-981, 2019
- [80] L. Tartar, *The General Theory of Homogenization*, Springer, 2009
- [81] G.A. Francfort, P.M. Suquet, Homogenization and mechanical dissipation in thermo viscoelasticity, *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 96, pp.265-293, 1986
- [82] S. Nemat-Nasser, M. Hori, *Micromechanics: overall properties of heterogeneous materials*, Elsevier, 1999
- [83] M. Baniassadi, M. Baghani, Y. Remond, *Applied Micromechanics of Complex Microstructures, Computational Modeling and Numerical Characterization*, Elsevier, 2023
- [84] H. Moulinec, P. Suquet, A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 157 ,1-2, pp. 69-94, 1998
- [85] A. Bensoussan, J.-L. Lions et G. Papanicolaou, *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*, Amsterdam, North-Holland, 1978
- [86] E. Sanchez-Palencia, J. Sanchez-Hubert, *Introduction aux méthodes asymptotiques et à l'homogénéisation - Application à la mécanique des milieux continus*, Elsevier Masson, 1992
- [87] F. Devries, H. Dumontet, G. Duvaut, F. Lene, Homogenization and damage for composite structures, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 27, 2, pp. 285–298, 1989
- [88] J.P. Dumont, P. Ladeveze, M. Poss, Y. Rémond, Damage mechanics for 3-D composites, *Composite structures*, 8, 2, pp. 119-141, 1987
- [89] A. Molinari, G.R. Canova, S. Ahzi, A self-consistent approach of the large deformation polycrystal viscoplasticity, *Acta Metallurgica*, 35,12, pp. 2983-2994, 1987
- [90] A. Molinari, S. Ahzi, R. Kouddane, On the self-consistent modeling of elastic-plastic behavior of polycrystals, *Mechanics of materials*, 26, 1, pp. 43-62, 1997
- [91] Y. Rémond, S. Ahzi, M. Baniassadi, H. Garmestani, *Applied RVE Reconstruction and Homogenization of Heterogeneous Materials*, Wiley-ISTE, 2016
- [92] J.J. Alibert, A. Della Corte, Homogenization of nonlinear inextensible pantographic structures by Γ -convergence, *Mathematics and Mechanics of Complex Systems*, 7, 1, pp. 1-24, 2019
- [93] S. Forest, Second and third gradient theories in continuum mechanics, cours de l'école des mines de Paris, disponible en ligne, 2023

<https://matperso.minesparis.psl.eu/Donnees/data05/540-secondgrad08.pdf>

- [94] E. Cosserat, F. Cosserat, *Théorie des corps déformables*, Paris, Librairie scientifique, A Hermann et Fils, 1909
- [95] R.D. Mindlin, Micro-structure in linear elasticity. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 16, pp. 51–78, 1964
- [96] A.C. Eringen, Nonlinear theory of simple micro-elastic solids, *International Journal of Engineering Science*, 2, 2, pp. 189-203, 1964
- [97] S. Forest, Micromorphic approach for gradient elasticity, viscoplasticity, and damage, *Journal of Engineering Mechanics*, 135, 2, pp. 117-131, 2009
- [98] P. Germain, La méthode des puissances virtuelles en mécanique des milieux continus, première partie : théorie du second gradient, *Journal de Mécanique*, 12, pp. 235–274, 1973
- [99] F. Dell’Isola, P. Seppecher, A. Della Corte, The postulations *à la D’Alembert* and *à la Cauchy* for higher gradient continuum theories are equivalent: a review of existing results, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 471, 2183, p. 415, 2015
- [100] F. dell’Isola, S.R. Eugster, R. Fedele, P. Seppecher, Second-gradient continua: From Lagrangian to Eulerian and back, *Mathematics and Mechanics of Solids*, 27, 12, pp. 2715-2750, 2022
- [101] G.A. Maugin, Internal variables and dissipative structures. *J. Non-Equilib. Thermodyn.* 15, 2, pp. 173–192, 1990
- [102] S. Forest, *Milieux continus généralisés et matériaux hétérogènes*. Presses de l’Ecole des Mines, Paris, 2006
- [103] S.R. Eugster, F. Dell’Isola, R. Fedele, P. Seppecher, Piola transformations in second-gradient continua, *Mechanics Research Communications*, 120, 103936, 2022
- [104] I. Giorgio, F. Hild, E. Gerami, F. Dell’Isola, A. Misra, Experimental verification of 2D Cosserat chirality with stretch-micro-rotation coupling in orthotropic metamaterials with granular motif, *Mechanics Research Communications*, 126, 104020, 2022
- [105] D. George, R. Allena, Y. Rémond, Multiphysics stimulus for continuum mechanics bone remodeling, *Mathematics and Mechanics of Complex Systems*, 6, 4, pp. 307-319, 2018
- [106] D. George, R. Allena, C. Bourzac, S. Pallu, M. Bensidhoum, H. Portier, Y. Rémond, A new comprehensive approach for bone remodeling under medium and high mechanical load based on cellular activity, *Mathematics and Mechanics of Complex Systems* 8, 4, 287-306, 2020
- [107] T. N. Nguyen, M. C. Ho Ba Tho, T. T. Dao, A systematic review of real-time medical simulations with soft-tissue deformation: Computational approaches, interaction devices, system architectures, and clinical validations, *Applied Bionics and Biomechanics* Vol. 2020, Article ID 5039329, 2020

- [108] T. T. Dao, M. C. Ho Ba Tho, A systematic review of continuum modeling of skeletal muscles: current trends, limitations, and recommendations, *Applied bionics and biomechanics*, Vol. 2018, Article ID 7631818, 2018
- [109] J. Alibert, A. Della Corte, Homogenization of nonlinear inextensible pantographic structures by Γ -convergence, *Mathematics and Mechanics of Complex Systems*, 7, 1, pp. 1-24, 2019
- [110] F. Dell'Isola, P. Seppecher, J. Alibert, T. Lekszycki, R. Grygoruk, et al.. Pantographic metamaterials: an example of mathematically driven design and of its technological challenges. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 31, 4, pp.851-884, 2019
- [111] Site du Labex MS2T, université de technologie de Compiègne, UTC, <https://www.utc.fr/recherche/les-projets-du-programme-dinvestissements-davenir/ms2t-un-labex-dans-la-maitrise-de-systemes-de-systemes-technologiques/> , disponible en 2023
- [112] P. Steinmann, Analytical mechanics allows novel vistas on mathematical epidemic dynamics modeling, *Mathematics and Mechanics of Complex Systems*, 8, 4, pp. 321-343, 2020
- [113] M. Pulvirenti, S. Simonella, A kinetic model for epidemic spread, *Mathematics and Mechanics of Complex Systems*, 8, 3, pp. 249-260, 2020
- [114] N. Bessonov, G.A. Bocharov, C. Leon, V. Popov, V. Volpert, Genotype-dependent virus distribution and competition of virus strains, *Mathematics and Mechanics of Complex Systems*, 8, 2, pp. 101-126, 2020

CHAPITRE II

-

VERS UNE GENERALISATION DE LA THEORIE DE VERHULST DECOMPOSITION D'UN PROCESSUS COMPLEXE EN ELEMENTS SIMPLES

Sommaire

1. Présentation de notre démarche
 - 1.1. La genèse dans mon expérience professionnelle
 - 1.2. Et la science ?

2. Notre modèle fondé sur la loi de Verhulst
 - 2.1. Présentation de la loi de Verhulst
 - 2.2. Construction générale du modèle

3. Insertion de notre modèle dans un contexte mathématique général
 - 3.1. La loi de Verhulst local comme une densité de probabilité
 - 3.2. Généralisation de la loi de Verhulst
 - 3.3. Etude des fonctions de probabilité élémentaires

4. Similitude de notre approche avec la PGD
 - 4.1. Présentation de la PGD
 - 4.2. Convergence et différence avec la PGD

5. Conclusion

6. Bibliographie

RESUME DU CHAPITRE II - VERS UNE GENERALISATION DE LA THEORIE DE VERHULST : DECOMPOSITION D'UN PROCESSUS COMPLEXE EN ELEMENTS SIMPLES

Dans ce chapitre, nous présentons les principes fondamentaux de notre approche, en tant que généralisation de la loi de Verhulst, en ce sens que cette loi sera considérée comme modélisant un des processus élémentaires, constitutifs d'un processus complexe. La démarche générale est présentée avec ses principales caractéristiques. Elle consiste donc en une décomposition du processus en éléments simples, eux-mêmes modélisés par la loi de Verhulst. L'intérêt principal de cette loi est double. D'une part il s'agit d'une fonction de densité de probabilité relativement simple d'autre part, l'équation différentielle qui la régit est construite à partir de fonctions dont la signification est concrète et peut être rattachée au processus que l'on veut modéliser. La démarche générale permettant d'aboutir à ces choix est expliquée, elle prend en compte quatre critères, qui en dehors de la simplicité dont nous avons déjà parlé, sont : la possibilité de proposer un changement d'échelle local-global, l'interprétabilité (au sens où des équations explicites existent à l'étape locale, avec des solutions *a priori* et analytiques. Enfin, la modélisation reste utilisable pour un grand nombre de phénomènes, dans la mesure où ceux-ci concernent des variables bornées, donc des questions de flux et de stocks.

Dans un deuxième temps, on situe la loi de Verhulst parmi l'ensemble des fonctions de densité de probabilité, afin de montrer comment elles s'articulent entre elles, justifiant ainsi notre choix de la loi la plus simple. En particulier, on montre que les lois de type Gompertz, Gumbel, Frechet ou Weibull, ne satisfont pas à l'ensemble de ces propriétés.

Enfin, nous proposons de situer notre modèle par rapport à l'approche générale de la PGD. Après avoir rappelé les principales caractéristiques de cette décomposition, nous situons les arguments qui intègrent notre modèle dans ce cadre, mais aussi ceux qui l'en distinguent. Ainsi notre modélisation reste dans la famille des processus *a priori*, ce qui est moins performant. Cependant, elle reste analytique et explicitement multi échelle, ce qui la rend compétitive, notamment lorsque des processus précis à identifier sont en jeu. Pour terminer, nous rappelons que notre modèle est particulièrement bien adapté aux systèmes complexes dont les variables bornées sont caractéristiques de flux.

1. Présentation de notre démarche

1.1. La genèse dans mon expérience professionnelle

J'ai pu constater dans ma carrière dans le conseil la fascination que provoquait les mots « IA », « *machine learning* » et « *deep learning* » dans les entreprises.

Cette fascination m'a immédiatement rappelé celle provoquée par l'avènement du digital, qui ne fut, in fine, que l'appropriation des dernières révolutions technologiques (en particulier informatiques) dans les stratégies de distribution des entreprises. Celle-ci eut ensuite de nombreuses répercussions et est allée très au-delà. L'informatique – en tout cas une partie – passa alors d'un service transverse vu avec condescendance, au cœur de la création de valeur pour de nombreuses entreprises.

De ce point de vue, la révolution de ce qui est nommé « IA » est très similaire, il s'agit – de mon point de vue - de l'appropriation par les entreprises de :

- L'exploitation de quantités phénoménales de données disponibles
- L'utilisation de capacités de calcul toujours plus puissantes
- De la prise en compte d'importants progrès en algorithmie, notamment sur l'utilisation des réseaux neuronaux depuis les années 2000 [1]

Tout scientifique ou ingénieur remarquera au travers de cette fascination une certaine méconnaissance des entreprises, notamment des instances dirigeantes, pour l'algorithmie et la modélisation, méconnaissance que l'on peut d'ailleurs parfois élargir à toute la science.

On pourra ainsi être surpris de voir que tout processus itératif d'ajustement de paramètres dans une modélisation numérique est aujourd'hui distingué en « *machine learning* », aussi la régression linéaire est souvent l'un des premiers exemples cités pour illustrer le *machine learning* dans les livres spécialisés [1].

Qu'un processus aussi simple puisse être qualifié de « *machine learning* » ou « d'IA » pourrait faire sourire les professeurs qui m'ont enseigné les éléments finis en école d'ingénieur ou mes anciens collègues en *computer science & medical physics* de UCL (*University College London*).

La promotion d'objets scientifiques ne m'a cependant jamais gêné, je pense même qu'elle manque cruellement dans le paysage français alors que tout notre quotidien est entouré par des objets dont le fonctionnement est ignoré par une majorité de personnes. La culture scientifique et technique n'a peut-être même jamais été aussi faible au sein de la population.

Toutefois, le phénomène devient rapidement gênant, en effet en entreprise on oublie rapidement qu'un modèle – aussi sophistiqué soit-il et fut-il un réseau neuronal – ne dispense jamais de comprendre le phénomène étudié.

Au contraire même, meilleure sera la compréhension du phénomène, meilleure sera la modélisation, meilleure sera notre compréhension du modèle, de ses limites et des données à lui fournir. Il pourra ainsi être plus efficace, être mieux utilisé et créer davantage de valeurs.

C'est donc à la synergie entre le savoir-faire d'une entreprise et la modélisation qu'on peut réellement créer de la richesse dans ce domaine.

1.2. Et la science ?

Jean Dieudonné cite dans les premières pages de son livre « Pour l'honneur de l'esprit humain : Les mathématiques aujourd'hui » [2], une lettre de Jacobi adressée à Legendre :

« M. Fourier avait l'opinion que le but principal des mathématiques était l'utilité publique et l'explication des phénomènes naturels ; mais un philosophe comme lui aurait dû savoir que le but unique de la science, c'est l'honneur de l'esprit humain, et que sous ce titre, une question de nombres vaut autant qu'une question du système du monde. »

Cette phrase m'avait beaucoup marqué quand je l'avais lu au début de l'adolescence, j'étais en total accord avec celle-ci. Elle m'amuse d'autant plus aujourd'hui que je crois bien être en profond désaccord avec Jacobi et me ranger derrière l'avis de Legendre.

La science est, selon moi, une activité qui cherche à comprendre les phénomènes naturels. Par comprendre, j'entends ici que la science cherche à décrire, c'est-à-dire qu'elle répond à la question du *comment* et non pas du *pourquoi*. Par phénomène naturel, j'entends ici que le phénomène peut être étudié indépendamment d'un truchement humain, c'est-à-dire que la donnée récoltée n'est pas déjà déformée par une interprétation humaine.

Pour comprendre ces phénomènes, une méthode a été définie, la méthode scientifique et la science dispose pour la description des phénomènes d'un outil et d'un langage, les mathématiques. De cette compréhension découle des progrès techniques.

Toutes ces caractéristiques me semblent essentielles pour définir la science. On me pardonnera ces digressions, mais elles me semblent importantes à une époque où tout semble qualifié de scientifique¹.

Toujours est-il que la compréhension du phénomène observé doit être au cœur de la science et j'ai souvent constaté dans les lectures et les contacts que j'ai pu avoir avec les milieux scientifiques, que les efforts se concentraient parfois beaucoup sur la sophistication des modèles au détriment de la compréhension de leur objet d'étude.

1.3. Une approche fondée sur la simplicité du modèle plutôt que sa sophistication

Si je devais résumer en une phrase mon sentiment, je dirais que les trésors de sophistication mathématiques des modèles camouflent parfois notre méconnaissance des phénomènes étudiés.

Pourtant assez porté par goût intellectuel sur la modélisation, j'ai néanmoins souhaité réaliser des travaux qui prouverait qu'un modèle relativement simple, facilement interprétable et

¹ Le rapport des français à la science et au progrès scientifique, Enquête IFOP, 19/10/2022

avec des paramètres ajustables ou non par un des algorithmes qualifiés de « *machine learning* » peuvent modéliser des systèmes complexes.

Je rejoins par là ce que l'on a appelé le « rasoir d'Ockham », au sens du principe de raisonnement philosophique de ce concept, que l'on doit au savant Guillaume d'Ockham de l'école d'Oxford au XIV^{ème} siècle [3] : *Pluralitas non est ponenda sine necessitate*, principe de parcimonie qui précise que la meilleure théorie est celle qui sera construite avec le minimum d'hypothèses ou de paramètres, que l'on retrouve en mathématiques avec le célèbre : « il faut et il suffit.. ».

Bien sûr, le fait que le modèle soit simple ne signifie pas que la modélisation soit aisée, au contraire même, le détournement de la compréhension du phénomène et la clarification des hypothèses en deviennent d'autant plus importants.

Il nous fallait donc trouver un modèle qui répondait à plusieurs contraintes :

- Un modèle sans inutile complexité, i.e. qui possède un nombre restreint de paramètres
- Un modèle qui permet le changement d'échelle, i.e. qu'il soit possible de passer du local au global ou inversement
- Un modèle interprétable, i.e. un modèle aux équations explicites et avec une solution a priori
- Un modèle général, i.e. qui s'applique à un grand nombre de phénomènes

Le choix d'une modélisation à partir des lois logistiques de Verhulst n'est donc pas le fruit du hasard. Il s'agit d'une tentative d'exploration systématique de modélisation de phénomènes complexes par les outils les plus simples, dont ils dérivent. Nous présentons en quelques lignes ci-dessous, les généralisations admises des modèles de Verhulst au sens des fonctions de densité de probabilité, en particulier celles qui ont été remarquablement synthétisées par F. Brilhante & al. [4] dans le journal *Chaotic Modeling and Simulation* en 2012. Nous verrons que la proposition que nous faisons s'inscrit bien dans un cadre général et que les choix proposés sont les plus simples qui permettent de conserver une généralisation adaptable aux phénomènes complexes, sans trop réduire les choix.

Par ailleurs, les deux applications qui seront proposées dans les chapitres suivants permettront de mieux comprendre les possibilités du modèle, et leurs liens avec les fonctions de densité de probabilité ainsi qu'avec les méthodes de réduction de modèle ; Nous présenterons une application dont la variable est principalement le temps et une autre application pour laquelle la ou les variables sont des variables physiques.

2. Notre modèle fondé sur la loi de Verhulst

2.1. Présentation de la loi de Verhulst

La fonction de Verhulst est une fonction logistique élémentaire, connue depuis 1838 comme une loi classique d'évolution des populations et d'épidémiologie [5], [6].

Elle se fonde sur l'approche suivante : soit $y(t)$ la fonction numérique d'une variable réelle décrivant l'évolution d'une population donnée en fonction du temps. On admettra ici sans plus de justification la possibilité de simuler la dimension d'une population, forcément un nombre entier, par une fonction réelle. On peut écrire très simplement l'évolution de cette population par :

$$\frac{dy}{dt} = y(N(y) - M(y)) \quad (\text{II.1})$$

Avec $N(y)$ une fonction décrivant le taux de naissances et $M(y)$ une fonction décrivant le taux de mortalité.

En faisant l'hypothèse que $N(y)$ et $M(y)$ sont des fonctions linéaires, on obtient :

$$\frac{dy}{dt} = ry \left(1 - \frac{y}{K}\right) \quad (\text{II.2})$$

Avec r et K des réels strictement positifs. On appelle généralement K la capacité d'accueil ou la capacité de charge et r le taux de croissance logistique.

On pourra facilement remarquer que pour :

- $y(0) = y_0 < K$, la solution $y(t)$ sera croissante
- $y(0) = y_0 > K$, la solution $y(t)$ sera décroissante
- $y(0) = y_0 = K$, la solution $y(t)$ reste constante

On obtient, in fine, par la résolution de cette équation différentielle ordinaire la solution suivante qui définit la fonction logistique de Verhulst :

$$y(t) = K \left[1 + \left(\frac{K}{y_0} - 1\right) e^{-rt}\right]^{-1} \quad (\text{II.3})$$

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} y(t) = K$$

Avec $y(t)$ définie sur $[0, +\infty[$ et $y(0) = y_0$ pour l'équation $y' = ry(1 - \frac{y}{K})$.

2.2. Construction générale du modèle

Nous avons ainsi un outil, la fonction logistique de Verhulst, qui est un outil simple car il ne contient que deux paramètres.

Pour construire notre modèle, nous allons ici partir de l'hypothèse qui consiste à décrire un processus élémentaire (ou local) y , d'un système complexe Y via l'équation différentielle (II.1) :

$$\frac{dy}{dt} = y(N(y) - M(y)) \quad (\text{cf. II.1})$$

Il est clair que cette équation différentielle peut très bien décrire des processus élémentaires bornés et en particulier des phénomènes assimilables à des dynamiques de flux et de stock. C'est le cas bien sûr de l'évolution des populations mais d'autres exemples existent, L. David Roper de *Virginia State University* [7] avait par exemple modélisé l'exploitation de minerais grâce à cette équation.

On entend bien évidemment ici flux et stock dans un sens général, la dérivée partielle n'étant pas toujours effectuée par rapport à la variable temps, comme cela sera le cas dans la partie IV de cette thèse.

Par la suite, en faisant l'hypothèse que le système complexe Y étudié peut être assimilable à un nombre fini de processus élémentaires ou locaux, on peut écrire :

$$Y(t) = \sum_j q_j(t) y_j(t) \quad (\text{II.4})$$

Avec $q_j(t)$ des fonctions de transitions entre les processus élémentaires, en posant comme hypothèse que $\sum_j q_j = 1$, c'est-à-dire que les fonctions $q_j(t)$ permettent de définir le poids relatif de chaque processus élémentaire à un instant t .

En faisant l'hypothèse d'un cas particulier où $N(y)$ et $M(y)$ sont assimilables à des fonctions linéaires, on obtient directement grâce à (II.3) :

$$Y(t) = \sum_j q_j(t) K_j \left[1 + \left(\frac{K_j}{y_{0,j}} - 1 \right) e^{-r_j t} \right]^{-1} \quad (\text{II.5})$$

Avec $y_j(0) = y_{0,j}$

On voit bien ici qu'un tel modèle, qu'on utilise (II.4) ou (II.5) selon les cas, correspond à la majorité de nos critères :

- Le modèle élémentaire est fondé sur un outil simple avec 2 paramètres
- Le modèle est conçu pour permettre de passer d'un processus élémentaire à un système complexe, donc de réaliser un changement d'échelle
- Le modèle est facilement interprétable, les équations sont explicites avec une solution à priori si on se place dans les hypothèses permettant d'obtenir (II.5)

Le modèle s'applique de plus à tous les phénomènes bornés assimilables à des phénomènes de flux dans le temps, dans l'espace ou par rapport à des variables quelconques. Toutefois, en

l'insérant dans un contexte mathématique plus large, nous allons voir que notre modèle peut même être interprété comme un cas particulier d'équations bien plus générales, pouvant être élargies à bien d'autres natures de phénomènes.

3. Insertion de notre modèle dans un contexte mathématique général

3.1. La loi de Verhulst locale comme une densité de probabilité

D'une façon générale, si l'on appelle $n(t)$ la valeur d'une population à l'instant t , Verhulst impose des conditions de régularités à cette fonction $n(t)$, qui sont très bien présentées dans [4] et que nous reprenons partiellement ici pour justifier les choix de notre généralisation. En particulier, on peut écrire l'équation différentielle de Verhulst sous une forme générale :

$$V(t) = \frac{d}{dt}n(t) = \sum_{k=0}^{\infty} A_k [n(t)]^k \quad (II.6)$$

Avec $A_0 = 0$, car rien ne peut apparaître d'une population nulle, $A_1 > 0$, un paramètre de croissance de la population, et $A_2 < 0$, un paramètre de contrôle de la croissance en fonction des ressources.

L'approximation du second ordre de $V(t)$ donne

$$\frac{d}{dt}n(t) = A_1 n(t) + A_2 [n(t)]^2 \quad (II.7)$$

qui peut être réécrit en :

$$\frac{d}{dt}n(t) = rn(t) \left[1 - \frac{n(t)}{K} \right] \quad (II.8)$$

où r représente classiquement le taux de croissance de la population, et K son équilibre limite. La solution générale est alors donnée par :

$$n(t) = \frac{Kn_0}{n_0 + (K - n_0)e^{-rt}} \quad (II.9)$$

Avec n_0 la population initiale à $t = 0$.

La discrétisation de cette approche classique peut être approchée en posant r^* tel que :

$$n(t+1) - n(t) = r^* n(t) \left[1 - \frac{n(t)}{K} \right] \quad (II.10)$$

En posant $\alpha = r^* + 1$, et $x(t) = r^* n(t) / (r^* + 1)$, on obtient

$$x(t+1) = \alpha x(t) [1 - x(t)] \quad (II.11a)$$

c'est-à-dire sous forme incrémentale :

$$x_{n+1} = \alpha x_n (1 - x_n) \quad (II.11b)$$

En remarquant que la fonction *Beta* (intégrale d'Euler), de densité de probabilité (2,2) peut s'écrire :

$$f(x) = \text{Beta}(2,2) = 6x(1-x)I_{(0,1)}(x) \quad (II.12)$$

Avec $I_{(0,1)}(x)$, la fonction caractéristique de $[0 ; 1]$, on voit alors que le terme de droite de l'équation (II.12) peut se réécrire comme une partie de la forme plus générale de la fonction $\text{Beta}(p,q)$:

$$f_{p,q}(x) = \frac{x^{p-1}(1-x)^{q-1}}{B(p,q)} I_{(0,1)}(x) \quad (II.13)$$

Où $B(p,q)$ est défini par :

$$B(p,q) = \int_0^1 x^{p-1}(1-x)^{q-1} dx = \frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)} \quad (II.14)$$

Γ représentant la fonction gamma : $\Gamma(p) = \int_0^\infty x^{p-1}e^{-x} dx$

3.2. Généralisation de l'approche

En généralisant le résultat ci-dessus, en prenant en compte l'inégalité de Hölder, généralisation de l'inégalité de Cauchy-Schwartz, et au sens où x est la linéarisation de $-\ln(1-x)$, F. Brillhante & al. [4], ont pu construire une fonction de probabilité à quatre paramètres $f_{p,q,P,Q}(x)$, d'une variable aléatoire $X_{p,q,P,Q}$, pour tout $p, q, P, Q > 0$.

L'inégalité de Hölder conduit à :

$$x^{p-1}(1-x)^{q-1}\{-\ln(1-x)\}^{P-1}\{-\ln x\}^{Q-1} \in \mathcal{L}_{(0,1)}^1 \quad (II.15)$$

Et la fonction de probabilité associée est :

$$f_{p,q,P,Q} = \frac{x^{p-1}(1-x)^{q-1}\{-\ln(1-x)\}^{P-1}\{-\ln x\}^{Q-1} I_{(0,1)}(x)}{\int_0^1 x^{p-1}(1-x)^{q-1}\{-\ln(1-x)\}^{P-1}\{-\ln x\}^{Q-1} dx} \quad (II.16)$$

En balayant les différentes valeurs possibles des quatre paramètres p, q, P, Q , on obtient différentes fonctions de densités de probabilité, c'est-à-dire différents niveaux de modélisations possibles pour notre construction d'un modèle en vue de simuler des systèmes complexes ad hoc. Nous allons résumer ces résultats ci-dessous.

En choisissant de décrire les paramètres des variables aléatoires (p, q, P, Q) en partant des valeurs entières les plus basses, c'est-à-dire $(p, q, P, Q) = (1, 1, 1, 1)$,

on observe bien, comme on l'a dit, que

$$f_{2,2,1,1}(x) = 6x(1-x)I_{(0,1)}(x) \quad (II. 17)$$

Variable aléatoire	Fonction de densité de probabilité
$X_{p,q,P,Q}$	$f_{p,q,P,Q}(x)$
$X_{1,1,1,1}$	$f_{1,1,1,1}(x) = I_{(0,1)}(x)$
$X_{p,1,1,1}$	$f_{p,1,1,1}(x) = px^{p-1}I_{(0,1)}(x)$
$X_{1,q,1,1}$	$f_{1,q,1,1}(x) = q(1-x)^{q-1}I_{(0,1)}(x)$
$X_{1,1,P,1}$	$f_{1,1,P,1}(x) = \frac{\{-\ln(1-x)\}^{P-1}}{\Gamma(P)}I_{(0,1)}(x)$
$X_{1,1,1,Q}$	$f_{1,1,1,Q}(x) = \frac{\{-\ln x\}^{Q-1}}{\Gamma(Q)}I_{(0,1)}(x)$
$X_{p,q,1,1}$	$f_{p,q,1,1}(x) = f_{p,q}(x) = \frac{x^{p-1}(1-x)^{q-1}}{B(p,q)}I_{(0,1)}(x)$

Figure 5 : Présentation des différentes fonctions de densité de probabilité associées aux variables aléatoires définies par les quatre variables p, q, P et Q

La fonction de probabilité associée à cette variable aléatoire $X_{1,1,1,1}$ est alors la parabole logistique de Verhulst d'équation :

$$f(x) = rx(1-x) \quad (II. 18)$$

3.3. Etude des principales fonctions de densités de probabilités élémentaires

On constate donc que la loi logistique élémentaire qui sert de base à notre modélisation généralisée dans sa description de processus élémentaires, se fonde sur l'une des briques les plus simples des fonctions de densités de probabilité capables de décrire des systèmes complexes. On peut en effet explorer, comme ci-dessous, les différentes formes obtenues pour les valeurs 1 et 2 des variables précédentes.

L'équation différentielle associée à $f_{p,q,P,Q}(x)$ peut s'écrire :

$$\frac{d}{dt}n(t) = r\{n(t)\}^{p-1}\{1-n(t)\}^{q-1}\{-\ln(1-n(t))\}^{P-1}\{-\ln n(t)\}^{Q-1} \quad (II. 19)$$

D'après l'équation (II.12), on veut que : $p + q + P + Q = 6$ (II. 20)

Pour les valeurs inférieures ou égales à 6, il est aisé de constater les différents modèles de croissance obtenus pour toutes les valeurs possibles de chacun de ces paramètres : (p, q, P, Q) .

On trouvera dans le tableau ci-dessous les modèles avec des valeurs entières, puis quelques cas où certains paramètres prennent des valeurs non-entières, mais qui conduisent à des fonctions également intéressantes :

(p, q, P, Q)	Type de croissance
(1,1,1,1)	Croissance linéaire
(2,1,1,1)	Croissance exponentielle
(1,2,1,1)	Décroissance exponentielle
(2,2,1,1)	Croissance logistique

Certains cas particuliers méritent que l'on s'y attarde, nous pourrions y faire référence dans les chapitres suivants :

Dans le cas $(p, 1, 1, 1)$, la croissance est du type :

$$n(t) = [-(p-2)(c+rt)]^{\frac{1}{2-p}} \quad (II.21), \text{ avec } c \text{ constante.}$$

Dans le cas $(2, 1, 1, 2)$, la croissance est du type :

$$n(t) = \exp(e^{c-rt}) \quad (II.22)$$

Il s'agit de la famille des modèles de Gompertz [8], ou des modèles de Gumbel, [9, 10]. On trouvera d'ailleurs sur le remarquable site de Photis Nobelis [11], une très belle présentation didactique de ces modèles statistiques, modèles que l'on sera amené à citer de nouveau dans le dernier chapitre de cette thèse.

Enfin, dans le cas non entier $(2, 1, 1, 1 + \gamma)$, la solution de la croissance de la population est donnée par :

$$n(t) = \exp\left(-\gamma(rt - c)^{1/\gamma}\right) \quad (II.23)$$

Nous obtenons alors une croissance de Fréchet [12], pour $\gamma > 0$.

De même une croissance de Weibull [13], pour $\gamma \in (-1, 0)$.

Enfin, le modèle de Gumbel [14], est obtenu lorsque γ tend vers 0.

Nous nous restreindrons dans la suite de notre modèle, au cas (2,2,1,1), c'est-à-dire à la croissance logistique et donc aux cas obtenus dans les équations (II.3) et (II.5), mais rien n'empêcherait de développer notre modélisation pour chaque type de fonction élémentaire locale, selon les applications ou les physiques en jeu.

Retenons cependant que le choix proposé, conforme au rasoir d'Ockham, est le plus simple pour une croissance non triviale : croissance avec saturation gouvernée par des fonctions de contrôle.

4. Similitude de notre approche avec la PGD

Lorsque l'on parle de systèmes complexes, de leur modélisation et de leur simulation afin d'aboutir à une ou des solutions les plus précises possibles, et dans le cadre d'une certaine parenté avec notre méthode, on pense d'abord à la PGD, *Proper Generalized Decomposition*, et à la remarquable réduction de modèle qu'elle permet. Cette théorie très fondamentale est d'une puissance inégalée. Nous l'avons présentée rapidement dans la partie I de cette thèse, maintenant que notre modèle est exposé, nous rentrons dans plus de détails, ce qui permettra de voir en quoi notre méthode s'y accroche dans des situations particulières, parfois légèrement différentes.

4.1. Présentation de la PGD

La méthode de décomposition propre généralisée (PGD) [15-19], est d'abord une méthode *a posteriori*, c'est-à-dire ne nécessitant pas à l'avance d'informations particulières sur les formes de la solution, contrairement à d'autres méthodes *a priori*, comme la décomposition propre orthogonale (POD), [20-22], qui est elle-même une extension de l'analyse en composantes principales (ACP) ou de son extension en dimension infinie, la décomposition de Karhunen-Loeve (KLD) [23]. Dans ces derniers cas, on réduit la dimension d'un problème caractérisé par un grand nombre de variables, en définissant de nouvelles variables non corrélées, dont les premières et les plus importantes contiennent la majorité des variations contenues dans les variables initiales.

Dans le cas de la PGD, rappelons que les fonctions de base d'approximation ne présupposent pas la forme générale de la solution. Celle-ci, $u(x_1, \dots, x_N)$, est recherchée sous la forme approchée :

$$u_m(x_1, \dots, x_N) = \sum_{i=1}^m F_1^i(x_1) \dots F_N^i(x_N) \quad (II.24)$$

Dans cette description, les variables (x_1, \dots, x_N) ne sont pas définies non plus *a priori*, elles peuvent être des variables spatiales, des variables temporelles ou différents types de paramètres. Déjà dans la méthode LATIN, qui la préfigurait [24-26], la solution du problème

globale était décomposée en un problème fortement non-linéaire, mais local, et d'un problème global, mais linéaire, ce qui peut s'exprimer par :

$$u(\mathbf{x}, t) \simeq u_m(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^m F_1^i(\mathbf{x}) F_2^i(t) \quad (II.25)$$

La PGD a aussi été utilisée pour des résolutions de problèmes d'équations différentielles stochastiques dans le cadre de la décomposition spectrale généralisée, où la solution approchée de u est recherchée sous la forme : $u_m = \sum_{i=1}^m \lambda_i F_i$ où les F_i sont des fonctions déterministes pondérées par des coefficients aléatoires λ_i .

Enfin, F. Chinesta & al. (2008) [27], ont également montré en quoi la PGD pouvait résoudre de façon impressionnante des problèmes physiques à différentes échelles de temps ou d'espace, comme des problèmes de mécanique quantique, de dynamique brownienne ou moléculaire, etc. A. Dumon rappelle judicieusement dans sa thèse les trois méthodes PGD de résolution de problèmes transitoires.

- Soit par décomposition spatiotemporelle. Dans ce cas, on cherche la solution sous la forme :

$$u(\mathbf{x}, t) = \sum_i F_{x_i}^i(\mathbf{x}) F_{t_i}^i(t) \quad (II.26)$$

- Soit par décomposition de chaque variable d'espace :

$$u(x, y, t) = \sum_i F_{x_i}^i(x) F_{y_i}^i(y) F_{t_i}^i(t) \quad (II.27)$$

- Soit en gardant une approche incrémentale en temps, et à chaque pas de temps, la séparation se fait uniquement sur les variables d'espace :

$$u^t(x, y) = \sum_i F_{x_i}^i(x) F_{y_i}^i(y) \quad (II.28)$$

Dans le cas de la PGD en décomposition spatiotemporelle et au plus près de notre approche, on cherche donc à résoudre le problème suivant dans lequel \mathcal{A} est un opérateur linéaire ou linéarisé :

$$\text{Trouver } u(x, t) \in \Omega \times]0, T] \text{ tel que } \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \mathcal{A}(u) = f \\ u(0) = u^0 \end{cases} \quad (II.29)$$

On cherche alors la solution :

$$u(\mathbf{x}, t) \simeq u_m(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^m \phi_i(\mathbf{x}) a_i(t) \quad (II.30)$$

Ainsi la famille des ϕ_i constitue une base réduite des fonctions spatiales et la famille des a_i , une base réduite des fonctions temporelles. On rappelle enfin dans le tableau ci-dessous et à titre d'exemples, quelques unes parmi les principales méthodes de résolution PGD, toujours d'après A. Dumon, c'est-à-dire les méthodes dites progressive, de Galerkin, de Galerkin avec mise à jour et enfin de type progressive pondérée [18], (Figure 6)

PGD progressive	PGD Galerkin
1. Initialisation de a^0 2. point fixe $\begin{cases} \phi^{(k)} = S_m(a^{(k-1)}) \\ a^{(k)} = T_m(\phi^{(k)}) \end{cases}$ 3. $\phi_m = \phi^{(k)}, a_m = a^{(k)}$ 4. $u_m = u_{m-1} + \phi_m a_m$ jusqu'à convergence	1. Initialisation de a^0 2. point fixe $\begin{cases} \Phi^{(k)} = S(A^{(k-1)}) \\ A^{(k)} = T(\Phi^{(k-1)}) \end{cases}$ 3. $\Phi_m = \Phi^{(k)}, A_m = A^{(k)}$ 4. $u_m = \Phi_m \cdot A_m$ jusqu'à convergence
PGD Galerkin avec mise à jour	PGD progressive pondérée
1. Initialisation de a^0 2. point fixe $\begin{cases} \phi^{(k)} = S_m(a^{(k-1)}) \\ a^{(k)} = T_m(\phi^{(k)}) \end{cases}$ 3. $\Phi_m = (\Phi_{m-1}, \phi^{(k)})$ 4. $A_m = T(\Phi_m)$ 5. $u_m = \Phi_m \cdot A_m$ jusqu'à convergence	1. Initialisation de a^0 2. point fixe $\begin{cases} \phi^{(k)} = S_m(a^{(k-1)}) \\ a^{(k)} = T_m(\phi^{(k)}) \end{cases}$ 3. $\phi_m = \frac{\phi^{(k)}}{\ \phi^{(k)}\ }, a_m = \frac{a^{(k)}}{\ a^{(k)}\ }$ 4. $\Phi_m = (\Phi_{m-1}, \phi_m)$ 5. $A_m = (A_{m-1}, a_m)$ 6. $\Lambda_m = U(A_m, \Phi_m)$ 7. $u_m = \sum_{i=1}^m \alpha_i \phi_i a_i$ jusqu'à convergence

Figure 6 : Illustration des différentes méthodes de résolution PGD selon A. Dumon, [18]

Notez qu'on pourra voir dans [18] les définitions des fonctions $S(a)$ et $T(\phi)$

La méthode détaillée de la PGD, ainsi que certaines de ses nombreuses variantes sont bien décrites dans de très nombreuses publications, nous en avons donné quelques unes dans le premier chapitre. Il s'agit pour nous, sans avoir besoin de davantage dans ce chapitre, de pouvoir bien situer la méthode que nous proposons par rapport à ces théories générales.

L'approche que nous présenterons plus loin est donc de type *a posteriori* localement (en temps, en espace ou en variables quelconques), et généralisée en temps ou en espace par somme finie de sorte de retrouver la signature aléatoire macroscopique.

4.2. Convergence et différence avec la PGD

On voit dans ce qui précède que si notre méthode pourrait s'intégrer sur bien des points avec la PGD, elle s'en distingue par plusieurs aspects.

Si les deux approches s'intéressent à un problème similaire décrit par l'équation (II.29) :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \mathcal{A}(u) = f & (\text{cf. II.29}) \\ u(0) = u^0 \end{cases}$$

Où \mathcal{A} est un opérateur différentiel, $\mathcal{A} : V \rightarrow W$, où V et W sont deux espaces de Hilbert de dimension infinie, et où l'on cherche $u(t) \in L^2([0, T]; V)$.

La solution u est inconnue pour le cas général auquel s'attache la PGD qui unifie étape locale et globale, alors que notre équation différentielle est explicite.

$$V(t) = \frac{d}{dt} n(t) = \sum_{k=0}^{\infty} A_k [n(t)]^k \quad (\text{II.30})$$

Elle est définie à l'étape locale uniquement, et possède une solution analytique élémentaire, décrite plus haut selon la troncature de la somme choisie. Dans le cas d'un second membre du deuxième degré, on obtient la parabole logistique.

Notons bien que l'équation (II.29) représente le problème complet pour la PGD alors qu'il n'est que l'étape locale pour notre méthode, afin d'obtenir la forme de fonction de base que nous utilisons pour passer à l'étape macroscopique.

Afin de bien situer la méthode de modélisation de certains problèmes complexes que nous proposons, nous allons tenter de la situer par rapport à la théorie générale de la PGD, du moins dans des applications proches des problèmes qui nous intéressent.

On peut donc dire que la valeur exceptionnelle de la PGD réside dans son traitement complet, (une seule étape, pas de séparation entre étape locale et globale), dans son côté *a posteriori*, (pas de forme prédéfinie des solutions) et dans la séparation des variables qui permet des résolutions impressionnantes, alors que notre méthode ne vise qu'à modéliser certains problèmes complexes particuliers, avec le choix de certaines fonctions de base rattachant notre méthode à la famille *a priori*, (choix d'un type de fonction de base pour l'étape élémentaire), permettant l'obtention d'une solution simple, puis nécessitant un passage à l'échelle de la solution macroscopique (étape globale) par somme finie, optimisée par *machine learning*.

Enfin, si les fonctions *a posteriori* de la PGD lui confère une généralité complète, le type unique de fonction de base que nous privilégions réduit fortement l'application de notre méthode à des cas où la valeur des paramètres est incluse dans un stock fini, ce qui est cependant l'objectif.

Mais dans ce cas, notre méthode est très performante pour deux raisons :

- Parce que les phénomènes physiques dont il est question sont vraiment guidés par ce type de cinétique
- Parce que la gestion des fonctions dites de croissance et de contrôle et leur assignation à des variables fondamentales du phénomène que l'on veut modéliser, permettent l'obtention de nouvelles équations physiques là où les autres méthodes conduisent à l'obtention des solutions et à l'identification de paramètres sans significations physiques particulières, comme on le verra dans la partie III.

Le schéma ci-dessous présente une illustration de la position de notre méthode comparativement à la PGD.

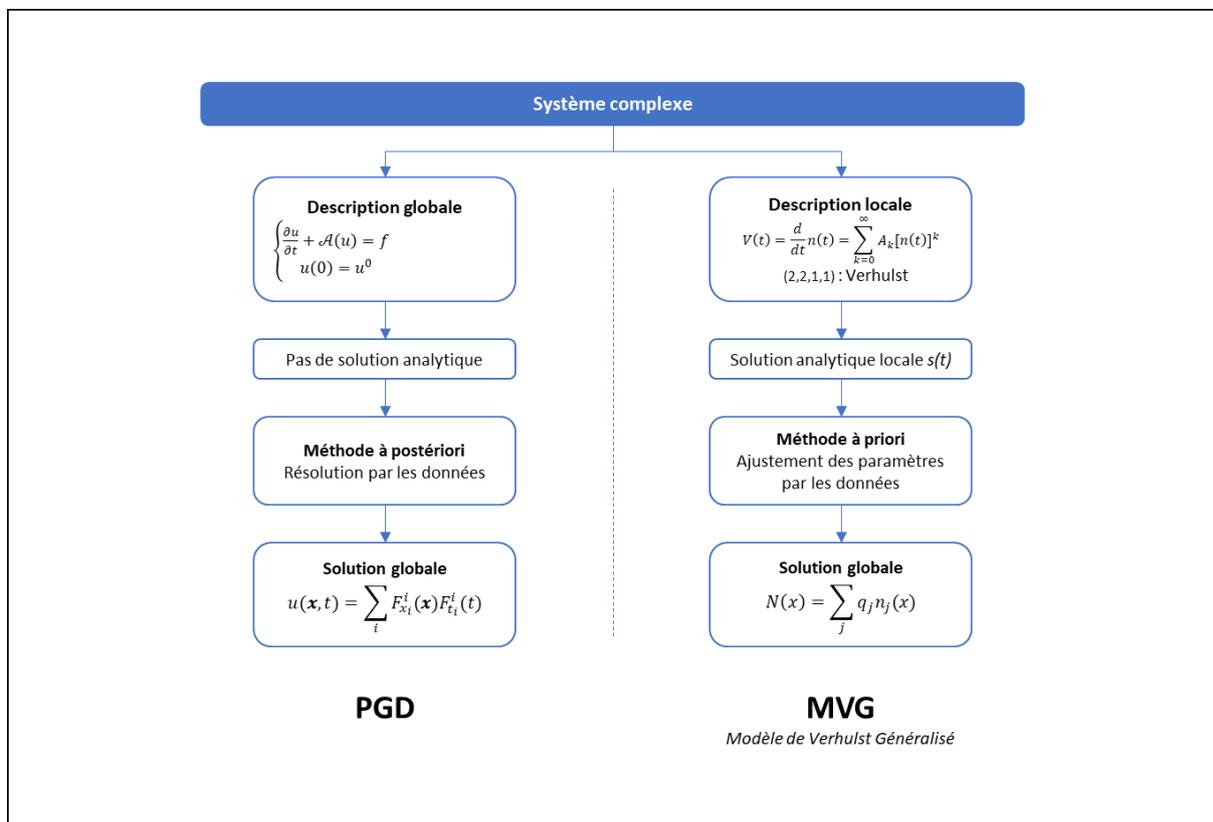


Figure 7 : Présentation de notre modèle et mise en situation par rapport aux grandes méthodes de résolution, ici la PGD.

5. Conclusion

Nous avons présenté une nouvelle modélisation des systèmes complexes à variables bornés. Celui-ci possède des propriétés particulières, notamment la capacité de prendre en compte des phénomènes très variés à petite échelle et de les intégrer dans un ensemble plus vaste. Le modèle proposé s'appuie sur une description locale construite à partir d'une fonction de

densité de probabilité de type Verhulst, ce qui est utile car l'équation différentielle associée est construite avec des fonctions de contrôle qui sont susceptibles de posséder une signification physique dans le processus que l'on veut simuler. Il était naturel de choisir cette fonction de densité dans la mesure où son origine, pour la description de lois de population, permet des fonctions de contrôle interprétables.

Nous avons pu généraliser la modélisation en proposant une somme finie de ces processus locaux, afin de rendre compte d'un processus complexe à une échelle supérieure. Les fonctions de transition qu'il est nécessaire de choisir ne sont pas définies à cette étape et dépendent du domaine d'application. Nous en verrons des exemples dans les chapitres suivants.

Lors de cette généralisation, nous avons indiqué la position de la loi de Verhulst parmi l'ensemble des fonctions de densités de probabilité. Cette comparaison montre que la fonction de Verhulst possède également une propriété intéressante, il s'agit de la fonction de densité la plus simple associée à une variable aléatoire permettant une saturation de population.

Enfin, nous avons situé la modélisation obtenue par rapport au cadre général de la méthode de décomposition propre généralisée (PGD). Il apparaît que notre modélisation utilise un principe de réduction que l'on trouve naturellement aussi au sein de la PGD. Toutefois, notre choix d'utiliser une méthode a priori nous permet d'utiliser une forme analytique de la fonction locale, l'équation de Verhulst, ce qui est très utile. Sa généralisation par somme finie revient alors à un passage à l'échelle macroscopique. Le modèle global ayant également une forme analytique, son optimisation peut se faire par tout algorithme de machine learning, en fonction de la qualité des données disponibles. Là encore, nous en verrons un exemple dans le chapitre suivant.

6. Bibliographie

[1] I. Goodfellow, Y. Bengio and A. Courville, *Deep Learning*, MIT Press, 2016, <http://www.deeplearningbook.org>

[2] J. Dieudonné, *Pour l'honneur de l'esprit humain, les mathématiques aujourd'hui*, Histoire et philosophie des sciences, Hachette, 1987

[3] D. Vernant, *La philosophie mathématique de Bertrand Russell*, Paris, Librairie philosophique Vrin, Coll. Mathesis, 1993

[4] F. Brillhante, I. Gomes, D. Pestana, *Extensions of Verhulst Model in Population Dynamics and Extremes*, *Chaotic Modeling and Simulation (CMSIM)*, 4, pp. 575–591, 2012

[5] P-F. Verhulst, *Notice sur la loi que la population poursuit dans son accroissement*, *Correspondance mathématique et physique*, 10, p.113-121, 1838

- [6] D.J.Daley, J.Gani, Epidemic Modelling, Cambridge University Press, 1999, ISBN 0 521 01467-0
- [7] L. David Roper, Verhulst Function for Modeling Minerals Depletion and Product Manufacture <http://roperld.com/science/minerals/VerhulstFunction.htm>, 2019
- [8] B. Gompertz, On the Nature of the Function Expressive of the Law of Human Mortality, and on a New Mode of Determining the Value of Life Contingencies, Philosophical Transactions of the Royal Society of London, 115, pp. 513- 583, 1825
- [9] E.J. Gumbel, La durée extrême de la vie humaine, Actualités scientifiques et industrielles, Hermann et Cie, Paris, 1937
- [10] E.J. Gumbel, Statistics of Extremes, Dover Publications, Inc. Mineola, New York, 2004
- [11], P. Nobelis, Site à la mémoire de Nicolas Nobelis et André Rapp, <https://nobelis.eu/photis/Lois/gumbel.html>, disponible en 2023
- [12] M.R. Fréchet, Sur la loi de répartition de certaines grandeurs géographiques, Journal de la société de statistiques de Paris, 82, pp. 114-122, 1941
- [13] W. Weibull, A statistical distribution of wide applicability, J. Appl. Mech. Trans. ASME, 18, 3, pp. 293-297, 1951
- [14] E.J. Gumbel, Les valeurs extrêmes des distributions statistiques, Annales de l'Institut Henri Poincaré, 5, 2, pp. 115-158, 1935
- [15] F. Chinesta, A. Ammar, E. Cueto, Recent advances and new challenges in the use of the proper generalized decomposition for solving multidimensional models, Archives of Computational Methods in Engineering, 17, pp. 327-350, 2010
- [16] P. Cavin, A. Gravouil, A. A. Lubrecht, A. Combescure. Efficient FEM calculation with predefined precision through automatic grid refinement. Finite Elements in Analysis and Design, 41, pp.1043–1055, 2005
- [17] F. Chinesta, P. Ladevèze, E. Cueto, A short review on model order reduction based on proper generalized decomposition, Archives of Computational Methods in Engineering, 18, pp.395–404, 2011
- [18] A.Dumon, Thèse de doctorat, Réduction dimensionnelle de type PGD pour la résolution des écoulements incompressibles, Université de La Rochelle, 2011
- [19] D. Ryckelynck, F. Chinesta, E. Cueto, and A. Ammar. On the a priori model reduction : Overview and recent developments. Archives of Computational Methods in Engineering, 13 pp. 91–128, 2006
- [20] K. Karhunen, Zur Spektraltheorie Stokastischer Prozesse, Annales Academiae scientiarum Fennicae, A. 1, Mathematica-physica, 34, 1946
- [21] G. Berkooz, P. Holmes, J.L. Lumley, The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flow, Annual Review of Fluid Mechanics, 25, 1, pp. 539-575, 1993

- [22] B. Podvin, Introduction à la décomposition orthogonales aux valeurs propres ou P.O.D., polycopié CNRS, LIMSI, Orsay, 2001, <https://perso.limsi.fr/podvin/intropod.pdf>
- [23] H. Stark, J.W. Woods, *Probability, Random Processes, and Estimation Theory for Engineers*, Prentice-Hall, Inc., 1986
- [24] P. Ladevèze. *Nonlinear Computational Structural Methods : New Approaches and Non-Incremental Methods of Calculation*. Springer-Verlag New York Inc., 1999
- [25] P. Ladevèze, J.-C. Passieux, and D. Néron. The LATIN multiscale computational method and the proper generalized decomposition. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199, pp.1287 – 1296, 2010
- [26] M.Stehly, Y.Rémond, On numerical simulation of cyclic viscoplastic and viscoelastic constitutive laws with the large time increment method, *Mechanics of Time-Dependent Materials*, 6, pp. 147-170, 2002
- [27] F. Chinesta, A. Ammar, P. Joyot, The nanometric and micrometric scales of the structure and mechanics of materials revisited : An introduction to he challenges of fully deterministic numerical descriptions. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 6, 3, pp. 191–213, 2008

CHAPITRE III

-

APPLICATION DE LA THEORIE DE VERHULST GENERALISEE A LA MODELISATION DE L'EPIDEMIE DE COVID-19

Sommaire

1. Introduction

2. Présentation des modèles SIR, SEIR et de ses dérivés
 - 2.1. Le modèle SIR
 - 2.2. Le modèle SEIR
 - 2.3. Bibliographie

3. Présentation de nos deux articles
 - 3.1. Synthèse du premier article intitulé : *On a New Virus-Centric Epidemic Modeling, 1: General Theory and machine learning simulation for 2020 SARS Cov 2 cases for Belgium, France, Italy, and Spain*
 - 3.2. Synthèse du second article intitulé : *On a New Virus-Centric Epidemic Modeling, 2: Simulation of deceased of SARS CoV 2 in several countries*

4. Article 1 : *On a New Virus-Centric Epidemic Modeling, 1: General Theory and machine learning simulation for 2020 SARS Cov 2 cases for Belgium, France, Italy, and Spain*, par J. Rémond et Y. Rémond, publié dans *Mathematics and Mechanics of Complex Systems*, 8 (3), 233-247, 2020
 - 4.1. Introduction

 - 4.2. General Theory
 - 4.2.1. Introduction to logistic function or sigmoid function
 - 4.2.2. General and macroscopic epidemic modeling

 - 4.3. Basic application to the 2020 COVID-19 epidemic

 - 4.4. Machine learning identification algorithm
 - 4.5. Results
 - 4.5.1. The data

- 4.5.2. Comparison of the basic functions of the model by country
 - 4.5.3. Simulation results for past and current data
 - 4.5.4. Model predictions
- 4.6. Discussion
- 4.7. Conclusion
- 4.8. References

- 5. *Article 2 : A New Virus-Centric Epidemic Modeling Approach, 2: Simulation of deceased of SARS CoV 2 in several countries*, Mathematics and Mechanics of Complex Systems, J.Rémond, D.George, S.Ahzi, Y.Rémond, soumis à Mathematics and Mechanics of Complex Systems.
 - 5.1. Introduction
 - 5.2. Theoretical Background
 - 5.3. Results
 - 5.3.1. Results of the simulations for 16 European countries
 - 5.3.2. Variation of the simulations depending on the number of data available for 6 countries
 - 5.3.3. Results in France when simulating the epidemic through age groups
 - 5.4. Discussion
 - 5.5. Conclusion
 - 5.6. References

- 6. Analyse des résultats et commentaires
 - 6.1. Positionnement des articles publiés en épidémiologie dans la démarche générale de la thèse
 - 6.2. Discussion autour des résultats obtenus et des perspectives
 - 6.2.1. La précision du modèle
 - 6.2.2. La prédictibilité
 - 6.2.3. Le changement d'échelle
 - 6.2.4. Validité des hypothèses et modélisation des vagues épidémiques successives

6.3. Comparaison de nos résultats avec ceux d'un modèle SIR

6.4. Bibliographie

RESUME DU CHAPITRE III - APPLICATION DE LA THEORIE DE VERHULST GENERALISEE A LA MODELISATION DE L'EPIDEMIE DE COVID-19

Dans ce chapitre, nous avons fait le choix de présenter les versions *preprints* de nos deux articles de *Mathematics and Mechanics of Complex Systems*. Pour cela, nous les avons résumés au début de ce chapitre, puis insérés en totalité. Il nous paraissait utile de montrer ainsi la progression de nos travaux et les évolutions de la conception de cette nouvelle modélisation.

Nous présentons donc dans ce chapitre la première de nos deux applications de modélisation d'un système complexe, ici l'épidémie de Covid-19. La deuxième application sera étudiée au sein du chapitre IV. Après avoir rappelé les critères qui nous intéressent dans cette modélisation : précision, prédictibilité, changement d'échelle, nous présentons un rapide résumé des modèles SIR et SEIR, qui ont été largement vulgarisés ces dernières années.

Dans le premier article, nous nous efforçons d'appliquer notre modèle à la simulation du nombre de cas atteints par cette maladie lors de la première vague épidémique. Le modèle se fonde sur l'hypothèse que les conditions de propagation du virus ont été fortement impactées par les confinements, mis en place progressivement dans de nombreux pays. Une somme de deux processus de Verhulst a donc été construite à l'échelle globale et appliquée pour quatre pays dont la France. L'algorithme de Marquardt est ensuite utilisé pour obtenir les meilleurs paramètres. Une confrontation du modèle avec l'évolution de l'épidémie est ensuite étudiée et commentée.

Pour donner suite à cette première étude, et compte tenu de l'expérience acquise pour la première modélisation, le deuxième article s'est intéressé à l'évolution des nombres de décès toujours lors de cette première vague, mais dans un grand nombre de pays. On voit clairement que la robustesse des données est un critère important de toute modélisation optimisée par *machine learning*. Nous avons également testé la prédictibilité de notre modèle en le testant sur un nombre croissant de données, et apprécié ainsi l'évolution du modèle par rapport aux données qui s'accumulaient.

Enfin, et de façon plus fondamentale, nous avons voulu tester la capacité de notre modèle dans sa sensibilité aux changements d'échelles. Pour cela, nous avons découpé une population donnée en plusieurs catégories d'âge (en particulier par déciles), puis nous avons appliqué notre modèle à chacun de ces déciles. Nous avons alors comparé la somme de ces modèles avec la modélisation de la population entière. Ces deux approches convergent ce qui valide l'approche de changement d'échelle que nous développons.

Le chapitre se termine par une discussion complète des caractéristiques principales du modèle, sa précision et sa prédictibilité.

1. Introduction

L'idée d'appliquer notre modèle à l'épidémiologie nous est apparue lors de la première vague de COVID 19 au début de l'année 2020.

L'épidémiologie est un terrain idéal pour tester notre démarche, et en particulier cette vague épidémique principalement pour les raisons suivantes :

- La propagation d'une épidémie correspond à un système complexe tel que nous l'avons défini précédemment (nombre de paramètres, complexité des corrélations et des mécanismes de causalités, sensibilité importante aux conditions initiales, résultat surprenant, évolution et adaptation du système, ...),
- Les modèles les plus usités (SIR et ses dérivées SIS, SEIR, SEIRS, SEIRS...) n'ont pas permis de prédire correctement le phénomène en amont, même s'ils sont sophistiqués,
- La compréhension des mécanismes de diffusion des épidémies reste incomplète,
- Le problème de passage à l'échelle entre les individus et l'ensemble de la population est très marqué : s'il est assez simple d'identifier les mécanismes de diffusions à l'échelle de l'individu, la compréhension du phénomène et sa modélisation pour des ensembles de population est un défi bien plus grand,
- La loi de Verhulst est historiquement née de la modélisation de la croissance d'une population, elle est donc parfaitement adaptée à l'épidémiologie,

Aussi, nous avons décidé d'explorer l'application de notre modèle fondé sur la loi de Verhulst en utilisant des constats simples et interprétables, notamment nous avons fait deux hypothèses centrales :

- L'épidémie de la première vague est bien un système complexe en soi. En effet, même si l'on prend en compte son démarrage et son développement sur un territoire donné, elle s'est déroulée pour la plupart des pays dont le suivi est de qualité et les données fiables, en une distinction non pas de population ou de géographie, mais de type de comportement. Elle est en effet assimilable à deux épidémies juxtaposées et partiellement concurrentes selon que l'on se situe en pré confinement ou en post confinement.
- Une mise à l'échelle est donc possible par groupe de population de plus en plus restreints. Nous voulons dire par là que la plupart du temps pour cette épidémie, il était possible de distinguer les populations infectées selon différents critères, des tranches d'âge par exemple.

Nous avons décidé de tester les qualités de notre modèle selon 3 critères :

1. **La précision** : on nomme ici précision du modèle le R^2 obtenu entre le modèle et les données lorsqu'on réalise un ajustement des paramètres du modèle par rapport à l'ensemble des données disponibles à l'époque. On sait que ce coefficient de

détermination n'est pas toujours un bon critère pour juger de la qualité de la modélisation par rapport aux données, il existe suffisamment de travaux qui en montrent les limites. Toutefois dans notre cas, ce coefficient ne sera utilisé que sur des plages de variations similaires des données principales, D'autre part, la nature des évolutions des variables sont similaires entre les différents exemples et l'existence de points aberrants ne se concentre que pour des situations où aucune modélisation n'est possible comme on le verra plus loin. Aussi conserverons nous ce coefficient pour caractériser la qualité de nos différentes simulations dans des cas similaires ou les critiques de ce paramètre perdent de leur importance.

2. **La prédictibilité** : on nomme ici prédictibilité du modèle, le R^2 obtenu entre le modèle et les données expérimentales lorsqu'on réalise un ajustement des paramètres du modèle avec un ensemble de données, ensemble non exhaustif, et que l'on compare le modèle obtenu avec l'ensemble des données expérimentales disponibles. La prédictibilité peut être calculée rétrospectivement. Il s'agit typiquement de réaliser un ajustement des paramètres du modèle avec un nombre i de données et de calculer le R^2 entre le modèle obtenu et les n données disponibles (avec $n > i$). Dans ce cas, et en parallèle de nos arguments décrits plus hauts, ce coefficient de détermination gardera sa valeur lorsqu'il s'agira de constater la capacité d'adaptation progressive du modèle au fur et à mesure que les quantités de données disponibles augmentent.
3. **Le changement d'échelle** : on nomme ici changement d'échelle la capacité du modèle à conserver sa précision et sa prédictibilité en passant pour une population donnée à des sous-ensembles de cette même population. Il s'agit ici typiquement de passer par exemple de la population française dans son ensemble à des sous-ensembles définis par classe d'âge ou par répartition géographique (département, région...). Là encore, les défauts habituels et les critiques que d'aucun font sur le coefficient de détermination, ne s'appliquent pas et les conclusions qu'on en tire nous paraissent rester fiables.

Enfin, l'ajustement des paramètres du modèle aux données disponibles a été réalisé via une descente de gradient selon l'algorithme de Levenberg-Marquardt au travers d'un script Python, il s'agit d'une méthode d'ajustement classique qui fait généralement partie des méthodes de « *machine learning* » [1]. Son caractère particulièrement efficace et rapide à mettre en œuvre a été un argument supplémentaire dans son choix.

Avant de présenter une synthèse de nos deux articles et d'en proposer un commentaire, nous voudrions revenir sur les autres modèles qui ont été largement utilisés pendant cette épidémie, et qui sont d'ailleurs bien connus, comme le modèle SIR et ses dérivés afin de les présenter très brièvement et d'en indiquer les atouts et les limites, notamment en comparaison avec notre approche.

2. Présentation du modèle SIR, SEIR et de ses dérivés

2.1. Le modèle SIR

Ce modèle fait partie de la grande famille des modèles compartimentaux en épidémiologie ; utilisés principalement dans la modélisation des maladies infectieuses [2], [3], [5]. Les premiers modèles à compartiments sont d'ailleurs nés d'épidémies de paludisme et de peste [2].

Un modèle compartimental signifie ici que la population est répartie dans des sous-ensembles de populations en fonction du stade d'évolution de la maladie, ainsi dans le modèle SIR, nous avons :

- **S(t)** : pour *susceptible* en anglais. Le sous-ensemble des personnes saines et qui n'ont pas encore contractées la maladie
- **I(t)** : pour *infected* en anglais. Le sous-ensemble des personnes contaminées et infectieuses
- **R(t)** : Pour *removed* en anglais. Le sous-ensemble des personnes immunisées, guéries ou mortes, il s'agit du sous-ensemble qui a contracté la maladie mais qui ne l'a plus.

On notera tout de suite une des hypothèses centrales de ce modèle, si on nomme P la population totale étudiée (ici constante), nous avons :

$$P = S(t) + I(t) + R(t) \quad (III. 1)$$

Classiquement, la population est considérée comme constante dans le modèle SIR, mais cela pourrait être adapté pour ne pas être le cas, on introduit toutefois en général cette notion sur le modèle SEIR que nous verrons juste après.

On définit alors le taux de transmission α , c'est à dire le taux de personnes passant du groupe S(t) au groupe I(t), et le taux de guérison β , soit le nombre de personnes passant du groupe I(t) à R(t). On représente généralement le modèle via le schéma suivant avant d'introduire les équations différentielles correspondantes :

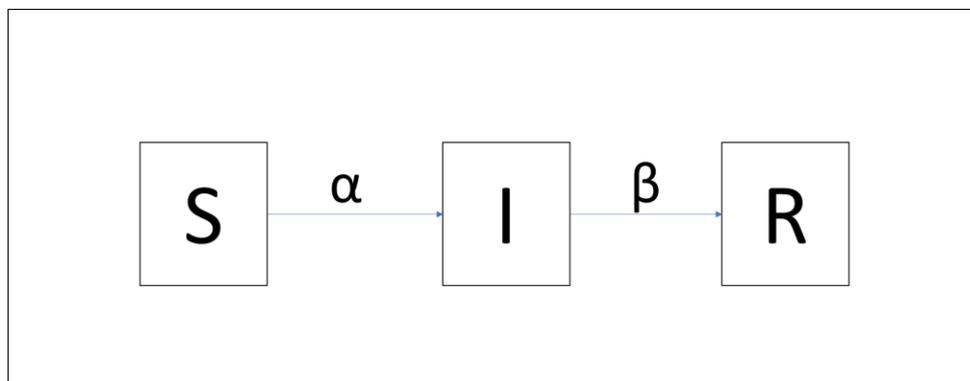


Figure 8 : représentation schématique classique du modèle SIR, les coefficients indiqués sur les transitions de groupes sont des coefficients multiplicatifs permettant d'établir les équations différentielles de ce modèle.

A ce stade, intervient alors une nouvelle hypothèse centrale de ce modèle, celle du nombre de contacts entre personnes infectées et saines. Ici on considérera qu'il y a un nombre de contacts homogènes, c'est-à-dire que chaque personne du groupe S a eu un contact avec chaque personne du groupe I (et inversement).

On a donc $S(t) \times I(t)$ contacts entre individus des groupes S et I, on obtiendra alors $\alpha \times S(t) \times I(t)$ personnes nouvellement infectées à un instant t [3], [4], [5].

On obtient alors très simplement le système d'équations différentielles suivant illustrées dans la Figure 1 ci-dessus :

$$\begin{aligned}\frac{dS(t)}{dt} &= -\alpha S(t) I(t) \\ \frac{dI(t)}{dt} &= \alpha S(t) I(t) - \beta I(t) \quad (III.2) \\ \frac{dR(t)}{dt} &= \beta I(t)\end{aligned}$$

Ce système d'équations différentielles n'a pas de solutions explicites. Ce modèle possède en l'état de nombreuses limites et s'appuie sur de nombreuses hypothèses qu'il serait trop long de lister ici (e.g : taille de la population, population fermée, pas d'incubations, immunités à vie, pas de vaccination, pas de variants pour le virus, ...) et que le lecteur pourra facilement consulter ici [3-5].

Les épidémiologistes ont ainsi pu largement faire évoluer ce modèle dans les dernières années. Le plus couramment utilisé aujourd'hui se nomme modèle SEIR et est une amélioration directe du modèle SIR que l'on vient de décrire. On le rappelle ci-dessous.

2.2. Le modèle SEIR

Le modèle SEIR introduit un nouveau sous-ensemble par rapport à ceux du modèle SIR précédemment présenté, il s'agit du groupe E, défini ci-dessous, on a donc :

- **S(t)** : pour *susceptible* en anglais. Le sous-ensemble des personnes saines et qui n'ont pas encore contracté la maladie
- **E(t)** : pour *exposed* en anglais. Le sous-ensemble des personnes contaminées mais non infectieuses, cela permet d'introduire la durée d'incubation dans le modèle
- **I(t)** : pour *infected* en anglais. Le sous-ensemble des personnes contaminées et infectieuses
- **R(t)** : Pour *removed* en anglais. Le sous-ensemble des personnes immunisées, guéries ou décédées, il s'agit du sous-ensemble qui a contracté la maladie mais qui ne l'a plus.

On introduit alors le taux d'incubation γ et sur le même schéma que précédemment. On peut donc facilement modifier le système d'équations différentielles et obtenir :

$$\begin{aligned}\frac{dS(t)}{dt} &= -\alpha S(t)I(t) \\ \frac{dE(t)}{dt} &= \alpha S(t)I(t) - \gamma E(t) \quad (III.3) \\ \frac{dI(t)}{dt} &= \gamma E(t) - \beta I(t) \\ \frac{dR(t)}{dt} &= \beta I(t)\end{aligned}$$

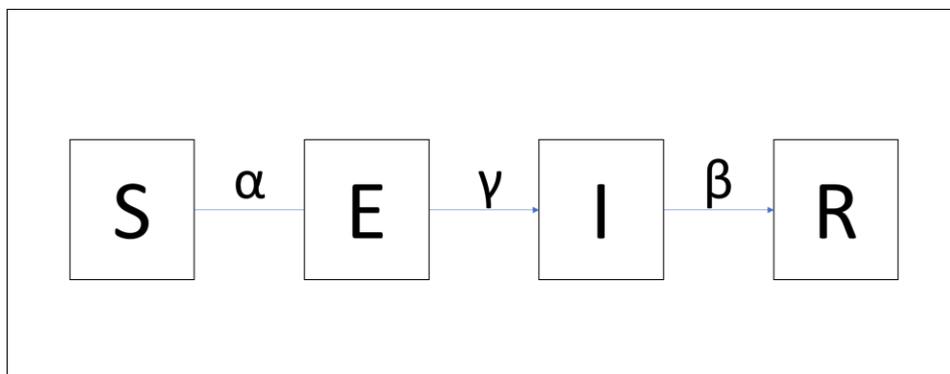


Figure 9 : Représentation schématique classique du modèle SEIR, comme pour la Figure 8, les coefficients de transition permettent la mise en place du système d'équations différentielles (III.3).

De plus, le modèle SEIR ne s'adresse généralement pas une population constante, on introduit ainsi souvent des modèles démographiques supplémentaires pour tenir compte des naissances et de la mortalité de l'épidémie.

Ainsi en général, on considère le taux de mortalité μ de l'épidémie et le taux de naissance de la population b [2, 3, [5].

On comprendra assez rapidement qu'un grand nombre de « compartiments » et de concepts peuvent être facilement introduits pour sophistiquer le modèle, ce qui a largement été fait, et le nombre de variantes existant, dérivées de celui-ci, est aujourd'hui considérable (SI, SIS, SIR, SIRS, SEIR, SEIRS...).

3. Présentation de nos 2 articles

Dans la suite de ce chapitre, nous avons choisi de présenter l'application de notre modèle au cas l'épidémie de SARS-COV 2, appelé aussi COVID 19, au travers d'un article en deux parties

que nous avons publié en anglais dans la revue internationale : *Mathematics and Mechanic of Complex Systems*.

Nous avons hésité à refaire une présentation reconstruite à partir de ces deux papiers, mais nous avons pensé que leur genèse dans le temps expliquait bien la progression de la modélisation et la poursuite de la réflexion qui s'est prolongé depuis 2020 pour la première partie, jusqu'à aujourd'hui pour la deuxième. Afin de faciliter la lecture, nous avons résumé les principaux résultats de chacune des deux parties de ces papiers dans les paragraphes ci-dessous, puis le lecteur pourra se rendre compte par lui-même des travaux et des principaux résultats.

On comprendra aisément que ce choix engendre fatalement quelques redites ce dont nous nous excusons par avance. En outre, les références de chacun des articles ont été conservées, pour en faciliter la lecture, même si elles sont parfois redondantes.

3.1. Synthèse du premier article intitulé : On a New Virus-Centric Epidemic Modeling, 1: General Theory and machine learning simulation for 2020 SARS Cov 2 cases for Belgium, France, Italy, and Spain

Les 3 figures ci-dessous (Figures 10-12) présentent une synthèse de la démarche adoptée dans ce premier article ainsi que ses résultats les plus marquants.

Dans cet article nous sommes partis de l'aspect particulier d'un certain nombre d'évolution des courbes de cas d'infection de la première vague de l'épidémie de COVID-19 en fonction du temps. Sachant que les décisions les plus importantes des états avaient été d'imposer un confinement sévère à leur population, nous avons fait l'hypothèse centrale que la première vague de COVID 19 pouvait être décomposé en deux processus élémentaires : une épidémie pré-confinement et une épidémie post-confinement. C'est ainsi que pour cette première vague, notre modélisation a pu se réduire à la somme de deux fonctions de Verhulst et la fonction de transition a été choisie de sorte de réaliser un passage continu et progressif de l'une à l'autre.

Enfin, la particularité complémentaire que nous avons introduite dans ce modèle, réside dans le fait que la démarche d'optimisation s'adresse bien à l'ensemble des paramètres, qui sont obtenus de façon automatique par l'algorithme de Marquardt.

Il s'agit donc d'une première application de notre modèle dans un cas simple et avec des données dont la fiabilité est assez bonne, elle est d'ailleurs discutée au sein de l'article.

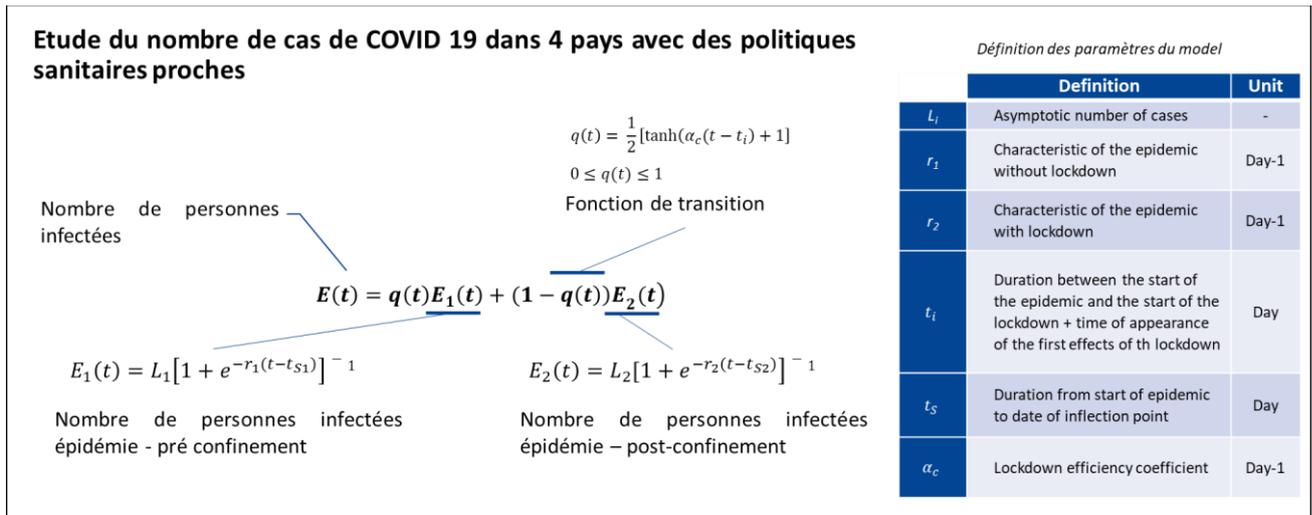


Figure 10 : Présentation synthétique des travaux entrepris dans le premier article : modélisation et simulation du nombre de cas infectés par le COVID 19 dans 4 pays. Notre modèle de Verhulst généralisé est détaillé, comprenant deux modèles élémentaires, couplés avec une fonction de transition $q(t)$, qui permet la continuité de l'ensemble, elle sera explicitée dans l'article qui suit.

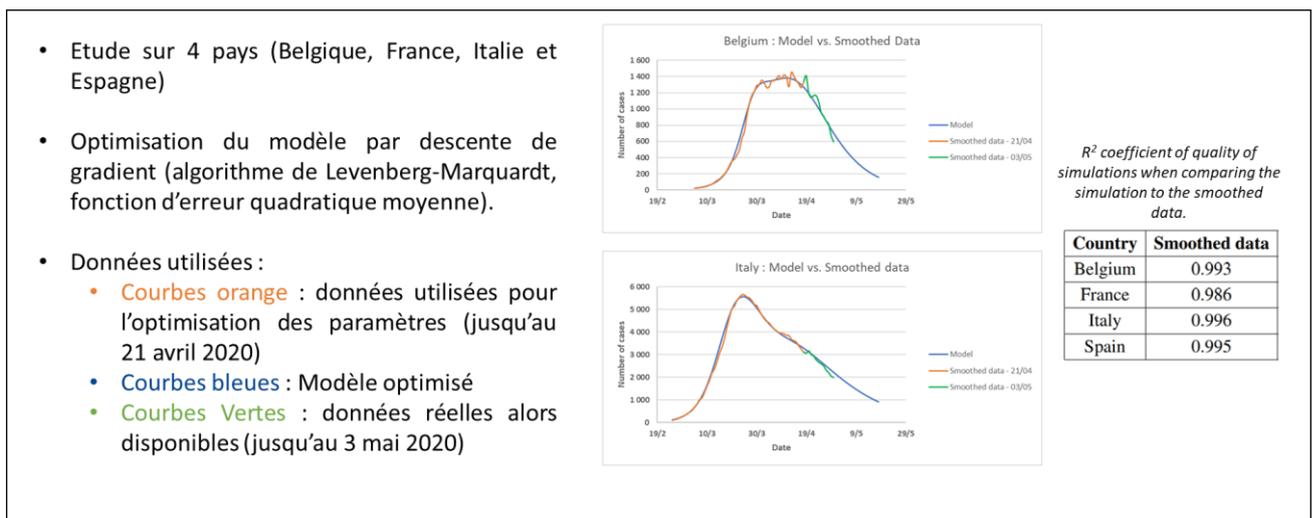


Figure 11 : Présentation des travaux entrepris dans le premier article : Présentation de la précision et de la capacité de prévision du modèle dans deux exemples, la Belgique et l'Italie.

Parameters	Input value in the algorithm
L	$0.0031 \times \text{Population of the country}$
k_1	0.3
k_2	0.1
t_i	Time from the start of the epidemic to the start of lockdown
t_S	Time between the start of the epidemic and the appearance of the inflection point + 15 days
α_c	0.1

Table 2. input values of the model parameters, i.e., before supervised learning.

Fittage avec algorithme de Levenberg-Marquardt



Final Value	t_i	α_c	L	k_2	t_S	k_I
Belgium	22.31	0.140	56271	0.098	38.23	0.158
France	26.53	0.076	146277	0.093	37.47	0.181
Italy	23.12	0.089	247302	0.063	39.95	0.174
Spain	26.27	0.096	265181	0.074	38.53	0.250
Error	t_i	α_c	L	k_2	t_S	k_I
Belgium	0.22	0.01	2089	0.00	0.77	0.00
France	1.26	0.01	11025	0.01	1.39	0.01
Italy	0.27	0.00	10356	0.00	1.22	0.01
Spain	0.78	0.00	17900	0.01	1.51	0.02

Table 3. Final values of the model parameters for the four countries, and analysis of the corresponding errors (standard deviation error) - t_i and t_S in days.

Figure 12 : Présentation des résultats sur l'ajustement automatique des paramètres, on indique les critères de choix qui ont permis l'obtention des valeurs initiales des paramètres (tableau de gauche), puis les valeurs optimales qui permettent la meilleure simulation après optimisation par l'algorithme de Levenberg Marquardt (tableau de droite)

3.2. Synthèse du second article intitulé : A New Virus-Centric Epidemic Modeling Approach, 2: Simulation of deceased of SARS CoV 2 in several countries

Dans cette seconde partie de notre article un changement important apparaît dans le titre, nous sommes passés de l'étude des cas infectés à l'étude des nombres de décès et leur évolution dans le temps. Ceci n'est pas un détail. En effet, nous nous étions vite aperçus dans l'étude des cas infectés, que les administrations publiques des différents pays étudiés revisitaient régulièrement leurs statistiques publiés, les modifiant parfois de façon importante a posteriori. On comprend que la détection et la compilation des cas infectés par cette épidémie n'est pas chose facile. Pour le nombre de cas, la détection repose sur une démarche de volontariat qui évolue dans le temps, la qualité des tests fait par ailleurs que des faux positifs, faux négatifs, parsèment les résultats, en outre, chaque pays n'a pas toujours eu des démarches similaires, des méthodes avec le même degré de rigueur, des moyens d'enregistrement des résultats identiques. Toutefois dans notre cas, la robustesse des données est un point crucial Aussi sommes-nous passés du dénombrement des cas infectés aux décès dus à cette épidémie.

On pourrait croire a priori que le dénombrement des décès, par leur côté définitif, se soustrait aux contingences décrites précédemment. Il n'en est rien. Naturellement, les différents pays possèdent en général des démarches administratives bien plus précises et plus fiables dans la comptabilité des décès que dans celle de cas d'infection, eux-mêmes obtenus à partir de décisions individuelles de personnes allant se faire tester, donc principalement de personnes ressentant des symptômes. Cela élimine donc les personnes infectées asymptomatiques. Ce n'est évidemment pas le cas pour les décès et c'est une des raisons de notre modification méthodologique. Les registres officiels sont en effet bien plus faibles pour cette dernière variable. Pour autant, il ne faut pas sous-estimer la difficulté pour le corps médical, à attribuer la cause du décès d'un patient à cette épidémie. Bon nombre de décès ont concerné des personnes avec de multiples morbidités. Ce qui signifie que pour ces personnes, le décès est le résultat d'une combinaison de causes qu'il n'est pas facile de démêler pour en attribuer une cause principale. Là encore, les règles ont varié selon les pays. Cependant, malgré ces difficultés, il reste clair que la variable « décès » est plus robuste que la variable « cas infectés ». Telle est donc la réflexion sur notre choix.

Parallèlement à cela, nous avons voulu dans cette deuxième partie de notre article, tester la prédictibilité de notre modèle, que nous n'avions pas pu réaliser dans la première étude. La prédictibilité consistait à faire tourner le modèle sur un nombre croissant de données, et apprécier ainsi l'évolution du modèle par rapport aux données qui s'accumulaient. C'est ce que nous avons fait pour six pays principaux et l'article analyse cette capacité à la prévision. Evidemment, une prédiction d'un phénomène dont l'évolution dépend en temps de réel de multiples facteurs reste un exercice difficile, d'autant plus lorsque des changements de politiques adviennent en cours d'épidémies.

Enfin, et de façon plus fondamentale, nous avons voulu tester la capacité de notre modèle dans sa sensibilité aux changements d'échelles. Pour cela, nous avons découpé une population

donnée en plusieurs catégories d'âge (en particulier par déciles), puis nous avons appliqué notre modèle à chacun de ces déciles. Nous avons alors comparé la somme de ces modèles avec la modélisation de la population entière. Le résultat montre une excellente convergence entre ces deux approches, ce qui permet de valider la vision de changement d'échelles qui est utilisée et sera commentée dans le paragraphe correspondant.

Ainsi les trois aspects suivants ont été étudiés :

- a- *Test du modèle sur un phénomène différent (décès) et un plus grand périmètre géographique (22 pays)*
- b- *Test de prédictibilité du modèle*
- c- *Analyse du changement d'échelles*
- d- *Test du modèle sur un phénomène différent (décès) et un plus grand périmètre géographique (22 pays)*

Toujours en utilisant le coefficient R^2 , dont nous avons déjà décrit les limites mais la relative validité dans notre cas, voici un récapitulatif de la précision du modèle sur les 22 pays :

	Armenia	Austria	Belgium	Denmark	Finland	France	Germany	Hungary	Ireland	Italy	Kosovo
R^2	0,96	0,95	0,99	0,98	0,87	0,98	0,99	0,94	0,95	1,00	0,26

	NTH	Norway	Poland	Portugal	Romania	Russia	Spain	Sweden	SWTZ	Turkey	UK
R^2	0,99	0,93	0,90	0,93	0,71	0,97	0,94	0,98	0,99	0,93	0,99

Figure 13 : Précision du modèle sur les 22 pays modélisés mesurée via la valeur R^2

On notera que 19 pays ont un R^2 supérieur ou égale à 0,90. Les détails de l'analyse et les commentaires se trouvent bien sûr dans l'article

- a- *Test de prédictibilité du modèle sur 6 pays*

Nous avons choisi 6 pays (Belgique, France, Allemagne, Italie, Espagne et Royaume-Uni) sur lesquels nous avons testé la prédictibilité de notre modèle en regardant l'évolution de sa précision selon le nombre de jours qui était fourni à l'algorithme pour réaliser l'ajustement des paramètres de notre modèle.

On obtient alors des graphiques du type décrit page suivante (Figure 14) :

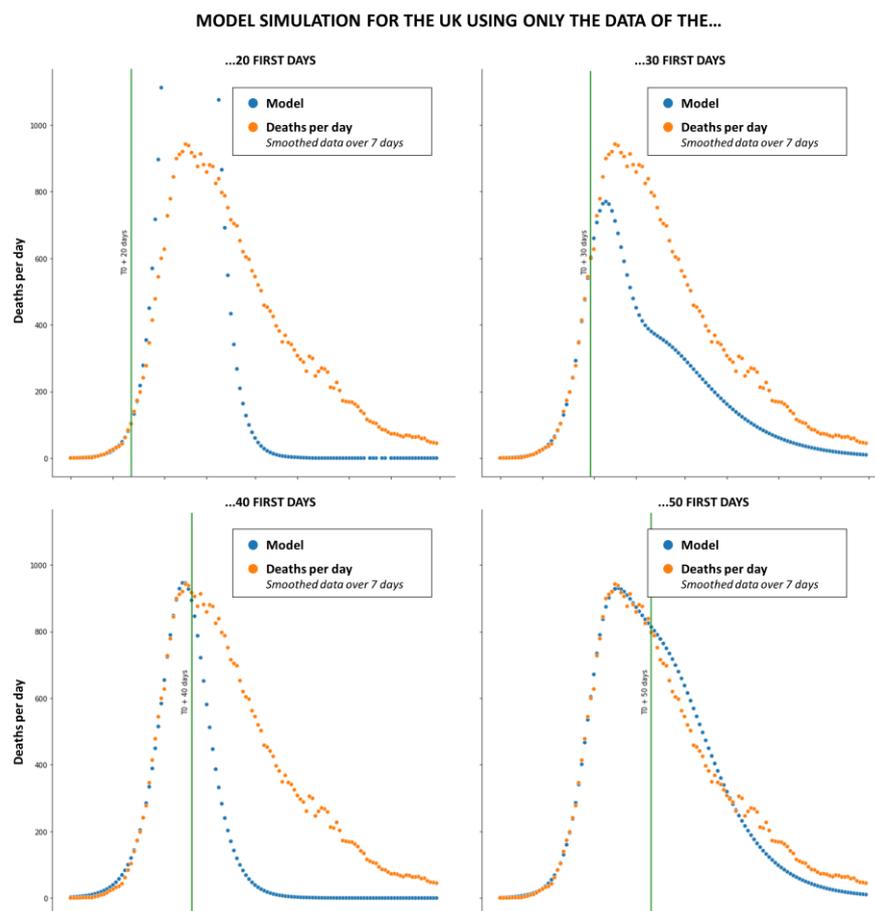


Figure 14 : Variation du modèle dans la simulation du nombre de morts aux Royaume-Uni selon le nombre de jours donnés à l’algorithme pour réaliser l’ajustement des paramètres. La courbe bleue correspond au modèle, la courbe orange aux données réelles lissées sur 7 jours. La droite verticale verte correspond à la limite des données fournies à l’algorithme pour réaliser l’ajustement (les données à gauche de la droite lui ont été fournies).

Le tableau ci-dessous présente l’évolution de la précision par pays selon le la quantité de données fournies en entrée (indiqué en nombre de jours) :

t0 + ...	20 days	30 days	40 days	50 days	60 days	70 days	80 days	90 days	100 days	110 days	120 days
Belgium	-52,04	-2499,81	0,48	0,95	0,98	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99
France	0,34	-0,13	0,77	0,96	0,97	0,97	0,98	0,98	0,98	0,98	0,98
Germany	-1,08	-1,76	0,04	0,98	0,93	0,96	0,97	0,99	0,99	0,99	0,99
Italy	0,36	0,08	0,67	0,99	0,99	0,99	0,99	1,00	1,00	1,00	1,00
Spain	0,59	0,65	0,94	0,94	0,94	0,94	0,94	0,94	0,94	0,94	0,94
UK	-3,19	0,60	0,30	0,97	0,94	0,96	0,98	0,99	0,99	0,99	0,99

Figure 15 : Evolution des valeurs de R^2 pour chaque pays selon le nombre de données fournies en entrée à l’algorithme afin de réaliser l’ajustement des paramètres.

On notera qu'il faut entre 40 à 50 jours à l'algorithme pour que les valeurs de R^2 atteignent 0,90. On notera également que ce nombre de jours intègre le début du confinement qui se produit plusieurs semaines après le début de l'épidémie. Les commentaires détaillés se trouvent également dans l'article.

b- Etude du changement d'échelle en considérant les classe d'âge en France.

On a ici réalisé une modélisation pour chaque classe d'âges française, classée en déciles. Voici les résultats obtenus :

	0-9	10-19	20-29	30-39	40-49	50-59	60-69	70-79	80-89	>=90
R^2	0,99	0,95	0,98	0,98	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99

Figure 16 : Valeurs de R^2 obtenues pour chaque classe d'âge

Nous obtenons ainsi des résultats très satisfaisants pour chaque classe d'âge.

On a ensuite voulu vérifier que la somme des modèles obtenus par classe d'âge était équivalente au modèle ajusté pour la population entière. Nous avons obtenu le résultat suivant :

	Model <i>using as data the whole country</i>	Model <i>Some of the models for each age categories</i>
R^2	0,992117	0,992032

Figure 17 : Valeurs de R^2 obtenues pour un modèle ajusté pour les données non partitionnées par classe d'âge et pour la somme des modèles de chaque classe d'âge

On remarquera que les deux valeurs sont très proches et que les deux modèles sont indiscernables. On peut ainsi dire ici que « le modèle de la somme équivaut à la somme des modèles ». Là encore, résultats détaillés et commentaires sont à trouver dans l'article.

4. Article 1 : On a New Virus-Centric Epidemic Modeling, 1: General Theory and machine learning simulation for 2020 SARS Cov 2 cases for Belgium, France, Italy, and Spain

Article écrit par J. Rémond et Y. Rémond, publié dans Mathematics and Mechanics of Complex Systems, 8 (3), 233-247, 2020²

Abstract

We are trying to test the capacity of a simplified macroscopic virus-centric model to simulate the evolution of the SARS CoV 2 epidemic (COVID 19) at the level of a country or a geographical entity, provided that the evolution of the conditions of its development (behaviors, containment policies) are sufficiently homogeneous on the considered territory. For example, a uniformly deployed lockdown on the territory, or a sufficiently uniform overall crisis management. The virus-centric approach means that we favor to model the interactions between the virus and a specific population in different environments, instead of modeling the interactions between individuals. Moreover, our approach assumes that an epidemic can be analyzed as the combination of several elementary epidemics which represent a different part of the population and a different behavior. The modeling proposed here is based on the finite superposition of Verhulst equations commonly known as logistic functions and used in dynamics of population. Modelling the lockdown effect at the macroscopic level is therefore possible. Our model has parameters with a clear epidemiological interpretation, therefore the evolution of the epidemic can be discussed and compared among four countries: Belgium, France, Italy, and Spain. Parameterization is carried out by a classical machine learning process. We present the number of infected patients with SARS-CoV-2 and the comparison between the European Centre for Disease Prevention and Control Data and the modeling. In a general formulation, the model is applicable to any country with similar epidemic management characteristics. These results show that a simple two epidemics decomposition is sufficient to simulate with accuracy the effect of a lockdown on the evolution of the COVID-19 cases.

Keywords: SARS-CoV-2, COVID-19, Epidemic, Modeling, Simulation, Machine Learning, Infected Cases

4.1. Introduction

Significant progress has been made in epidemic modeling thanks to new capabilities of numerical simulation, improved mathematical modeling as well as artificial intelligence techniques. These modeling also benefit of continuous improvement in data quality. It is impossible to quote all the previous works done, and this is not the purpose of this article. However, the authors suggest to consult the work of T.L. Wiemken and R.R. Kelley [1], or

² Dans cet article, les numéros des références sont associées à celle de l'article et non du chapitre

V.Colizza & al. [2] and among the most recent publication the work of Lin Jia et al. [3] or D. Caccavo [4] and the interesting state of the art concerning SIR and SEIR modelling published on the website of the CNRS by C.Bayette & M.Monticelli [5].

Only a few specific studies used a single logistic function for modeling epidemics, especially for plant diseases and with interesting results [6-8]. Some others used a double logistic curve for modeling HIV [9], or a r-hybrid model for the same virus [10].

A large part of the existing approaches try to model the epidemic at the individual scale, i.e. the microscopic scale and consider the interactions between each individual. Then, it induces a theoretical epidemic evolution at the macroscopic level. A lot of contributions can be found in the literature using that method.

This study takes the reverse way and try to find interesting conclusions depending on the microscopic scale, using a macroscopic modeling based on a generalization of the logistic function. It is a common approach developed in theoretical or applied mechanics or physics to use this type of homogenization methods to go from the macroscopic to the microscopic scale [11-15].

Our simplified virus-centric macroscopic modeling is coupled with an automatic parameters optimization by machine learning and gives interesting results for the SARS-CoV-2 early 2020 pandemic. Predicting the outcome of the epidemic across countries seems to be a lucky guess considering the variability of the containment policies through time and countries. Therefore, readers must be warned that our predictions, *mutatis mutandis*, cannot consider subsequent events such as a possible second epidemic, which could appear after the end of the lockdown, or other unexpected effects. However, the results obtained by this new and simplified approach seemed to us instructive enough to have explained them here.

4.2. General Theory

4.2.1. Introduction to logistic function or sigmoid function

On a macroscopic scale, the elementary logistic function law, known as Verhulst's law [16], [17], has been known for a long time (1838) as a law useful for classical modeling of epidemics at the macroscopic scale. It was first implemented in population dynamics. We can consider in a first approach that a population $y(t)$ - a real-valued function of time - of individuals evolves according to a very simple ordinary differential equation:

$$\frac{dy}{dt} = y(N(y) - M(y))$$

where $N(y)$ is the birth rate and $M(y)$ represents the death rate. If $N(y)$ and $M(y)$ are linear functions, this equation can be written

$$\frac{dy}{dt} = ry \left(1 - \frac{y}{K}\right),$$

a and K being strictly positive real numbers. K is conventionally called the carrying capacity in population dynamics theory, r is the growth rate which leads to an increase of population if $y(0) = y_0 < K$, to a decrease if $y_0 > K$ and is stable if $y_0 = K$.

The resolution of this simple ordinary differential equation allows to define the logistic function:

$$y(t) = K \left[1 + \left(\frac{K}{y_0} - 1\right) e^{-rt}\right]^{-1} \quad (\text{III.4.1})$$

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} y(t) = K$$

$y(t)$ is the solution defined on $[0, +\infty[$, of the system constituted by $y(0) = y_0$ and $y' = ry\left(1 - \frac{y}{K}\right)$.

4.2.2. General and macroscopic epidemic modeling

For this modeling, we assume that the development of an epidemic, i.e. the number of daily or cumulative cases of people is characterized by a function $E^k(t)$ of \mathbb{R} in \mathbb{R} . $E^k(t)$ is defined over a given geographical territory with k the studied phenomena (infection, hospitalization, intensive care, death, recovery). Geographic territories should be chosen as territories in which we notice a similar epidemic management (for instance, territories with a similar lockdown intensity, as countries or other administrative entities, etc.).

This function $E^k(t)$ is itself the sum of continuous functions $E_i^k(t)$ of \mathbb{R} in \mathbb{R} with $i \in \{1, \dots, i, \dots, P\}$, characterizing the effect of the epidemic on P different populations belonging to the same geographic territory :

$$E^k(t) = \sum_{i=1}^{i=P} E_i^k(t)$$

Finally, each population may have a series of C_i different behaviors over time and therefore:

$$E_i^k(t) = \sum_{j=1}^{j=C_i} q_{ij}(t) E_{ij}^k(t)$$

$$E^k(t) = \sum_{i=1}^{i=P} \sum_{j=1}^{j=C_i} q_{ij}(t) E_{ij}^k(t) = q_{ij}(t) E_{ij}^k(t)$$

Considering the Einstein summation convention for i and j , and with $\sum_{j=1}^{j=C} q_{ij}(t) = 1$

In the case of two different behaviors of a population i , the transition function $q(t)$ can be written as follow:

$$E_i^k(t) = q(t)E_{i1}^k(t) + (1 - q(t))E_{i2}^k(t) \quad (\text{III.4.2})$$

with $q(t)$ a monotonically increasing function defined from $[0, +\infty[$ to $]0,1[$. Many functions may be suitable. We will define a specific one in the application paragraph.

4.3. Basic application to the 2020 Covid-19 epidemic

In the case of the Covid-19 epidemic which particularly occurred in Europe at the beginning of 2020, an interesting way to test the validity of such a model consists in taking particularly simplified hypothesis: one population per country ($i = 1$), two behaviors ($j = 2$), with a continuous passage from one to the other. Those two behaviors can be identified as the transition from a first behavior of the population before the containment measures to a second behavior considering the containment measures, especially the lockdown. Other subsequent behaviors could have been considered and identified, such as the end of containment measures, or a less rigorous behavior through time, lockdown, etc.

In our case, we define the elementary epidemic function $E^k(t)$ with an equation like equation (III.4.1):

$$E^k(t) = L_k [1 + e^{-r_k(t-t_{sk})}]^{-1} \quad (\text{III.4.3})$$

$E^k(t)$ thus, represents the cumulative number of cases of k (infected, hospitalized, in intensive care, deceased, cured) at time t . We will note L_k the final number of cases of k in one epidemic, r_k the characteristic of the epidemic kinetics for the criterium k and t_s the time taken to reach the peak of the epidemic, described on a daily basis of new cases.

To model it, the following assumptions and development have been made:

H1: We assume that the global behavior of the population is given by the combination of two functions $E_1^k(t)$ and $E_2^k(t)$, as mention by equation (2), which characterize the difference of behavior, before and after the lockdown. As we will consider the unique criterium "number of infected cases" we will not use the exponent k anymore. Consequently, we have

$$E_1(t) = L_1[1 + e^{-r_1(t-t_{s1})}] \text{ and } E_2(t) = L_2[1 + e^{-r_2(t-t_{s2})}]$$

The two functions $E_i(t)$ are distinguished by their respective coefficient r_i .

H2: Let us assume that the studied epidemic has a classical sigmoid / gaussian behavior. We have then the total number of cumulative case L and a "new infected case" peak t_s . We assume furthermore that the studied epidemic can be described as the combination of two epidemics with the same total number of cumulative cases L and the same peak t_s . Therefore, we keep the same value $L_i = L$ and we keep the same time $t_{si} = t_s$ for the two functions $E_i(t)$.

H3 : We choose the transition function $q(t)$ as :

$$q(t) = \frac{1}{2} [\tanh(\alpha_c(t - t_i) + 1)] \text{ defined on } [0, +\infty[.$$

We have obviously: $0 \leq q(t) \leq 1$. The coefficient α_c , positive number, represents the efficiency of the lockdown. t_i represents the duration between the start of the epidemic and the date of lockdown increased by the duration of appearance of its first effects. Due to the asymptotic variation of $q(t)$, $q(0) = \varepsilon \ll 1$ for the used values of t_i , which does not influence the results of the modeling.

With these assumptions, the evolution of the new infected cases of the epidemic is given by:

$$E(t) = q(t)E_1(t) + (1 - q(t))E_2(t)$$

The model is therefore defined by the following six simple parameters:

Parameters	Definition	Unit
L	Total Numbers of Cases	-
k_1	Characteristic of the epidemic without lockdown	Day ⁻¹
k_2	Characteristic of the epidemic with lockdown	Day ⁻¹
t_i	Duration between the start of the epidemic and the start of the lockdown + time of appearance of the first effects of the lockdown	Day
t_s	Duration from start of epidemic to date of inflection point*	Day
α_c	Lockdown efficiency coefficient	Day ⁻¹

Table 1 : List and definition of the model parameters. * Note that the inflection point of the sigmoid corresponds to the maximum value of its derivative, which is often called "peak of the epidemic"

4.4. Machine Learning identification algorithm

To obtain the parameters of the model by supervised machine learning, a python code was developed using gradient descents conventionally used in machine learning. In our case, the

Levenberg-Marquardt algorithm [17], [18], was chosen to optimize the mean squared error function. The learning datasets for each country have been compiled using official European information from the European Center for Disease Prevention and Control or ECDC [19]. Considering the small amount of data, it was not possible to build a test data set. To achieve the learning optimizations for each country, the following initial values have been set:

Parameters	Input value in the algorithm
L	0,0031 x Population of the country
r_1	0,3
r_2	0,1
t_i	Time between the start of the epidemic and the start of lockdown
t_s	Time between the start of the epidemic and the appearance of the inflection point + 15 days
α_c	0,1

Table 2 : input values of the model parameters, i.e. before supervised learning

These values have been chosen through data analysis to be consistent with our model and the available experimental data.

For L , k_1 , k_2 , t_i , t_s , α_c , the input values influences the speed of the convergence of the algorithm and also ensure the bypassing of local minima:

L : the input value in the algorithm for the total number of people reached by Covid-19 was chosen to be 0.31% of the total population, following several data analysis.

k_1 , k_2 : their input values are linked to the analysis of the evolution of the epidemic as well as the analysis of experimental data.

t_i : the start dates of containment of the targeted countries are obviously available on government websites. They are recalled in Table 3. 10 days are added on those values, to take into account, the needed delay to see the results of the lockdown. This duration, like the other parameters, is optimized by the algorithm.

t_s : the initial value for the inflection date t_s is chosen lockdown so t_s is greater than the lockdown date. 15 days were added on top of that after careful data analysis.

α_c : the initial value was also set after data analysis and after the analysis of simulation curves.

Note that the total population of each country is also provided by the ECDC [19], this information is reported to be from the World Bank Group. <https://www.worldbank.org/>

Country	Lockdown Dates
Belgium	18/03/2020
France	17/03/2020
Italia	09/03/2020
Spain	14/03/2020

Table 3 : Lockdown dates used in the COVID-19 epidemic

4.5. Results

4.5.1. The Data

We took data from a single, reliable official source so that it could be compared across countries [19]. It is obvious that regarding the detection of cases of infected persons, these data are highly dependent on the number of tests carried out and the identification protocols. In addition, it is regularly the case that the data is corrected later following updates. The figures used for Belgium, France, Italy, and Spain are shown in the figures: Fig.18, Fig.19, Fig.20 and Fig.21. We can see that the raw data is unsurprisingly very noisy. We will not comment here on the roots of this fact. To increase the ability of the algorithm to quickly converge on a solution, we smoothed the raw data over several days (3 days, 5 days, 7 days). So, for a smoothing over three days, we have:

$$C_{i(lissé)} = \frac{1}{3}(C_{i-1} + C_i + C_{i+1}).$$

To minimize the noise effects and obtain the best possible convergence, we decided to use only the values smoothed over 7 days. The last data used dates from April 21, 2020. The smoothing over 7 days implies that the last valid dates for modeling correspond to April 18, 2020. We see on the following figures the raw data and the smoothed data for each country.

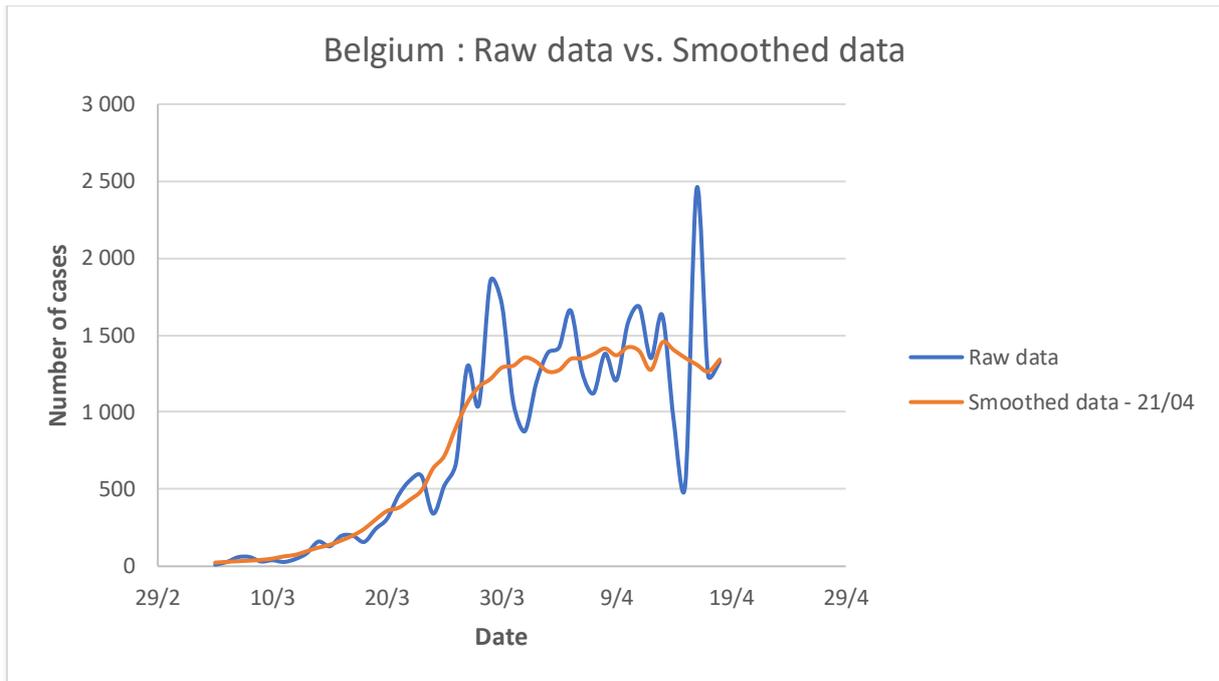


Figure 18 : Raw data and smoothed data over 7 days of the number of detected cases of COVID-19 in Belgium in 2020 according to [19]

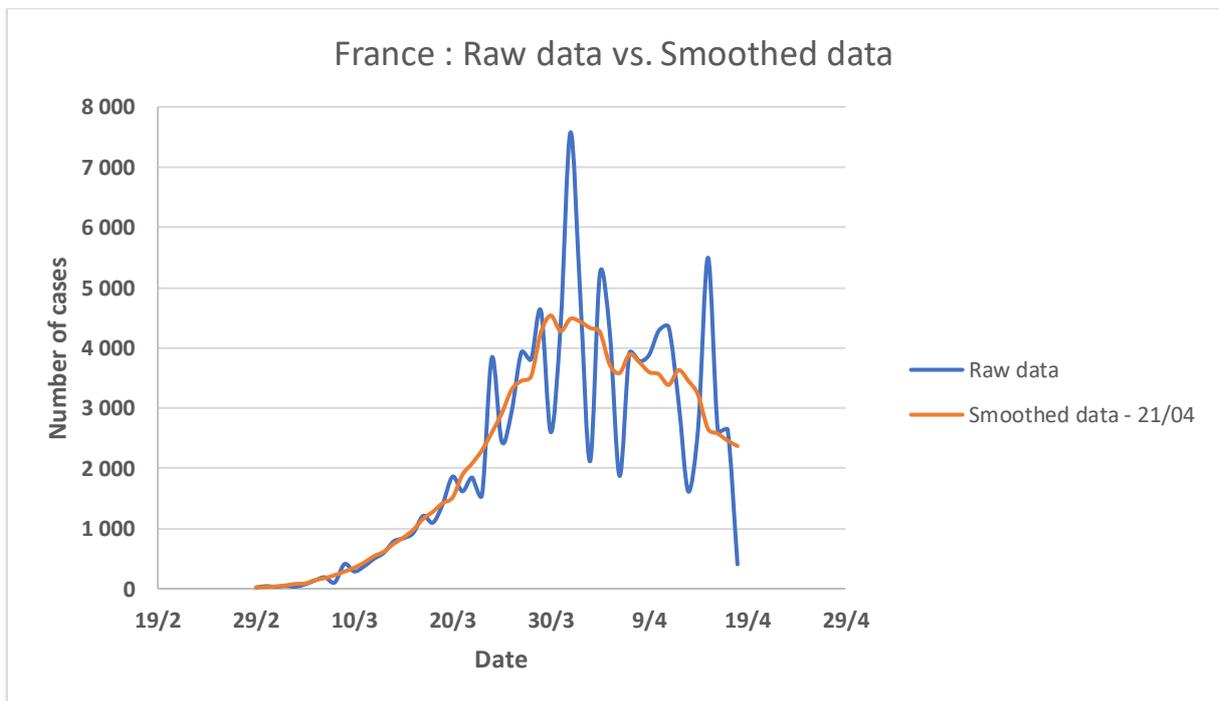


Figure 9 : Raw data and smoothed data over 7 days of the number of detected cases of COVID-19 in France in 2020 according to [19]

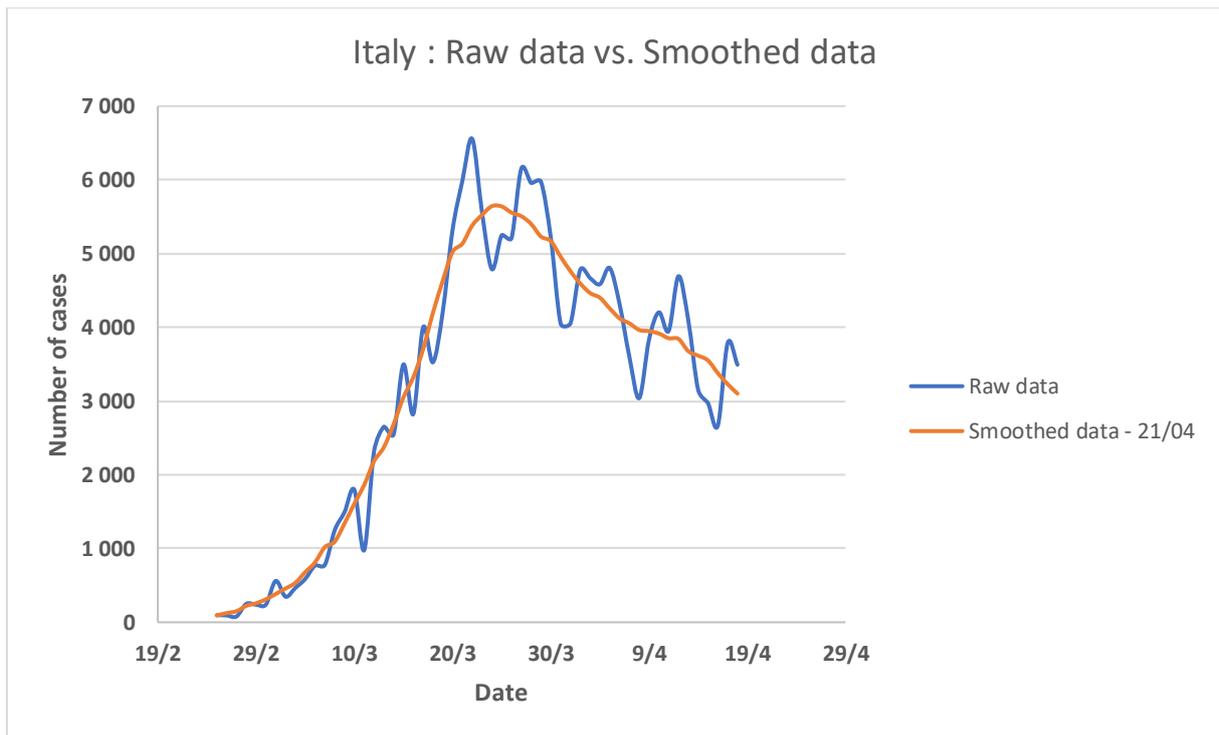


Figure 10 : Raw data and smoothed data over 7 days of the number of detected cases of COVID-19 in Italy in 2020 according to [19]

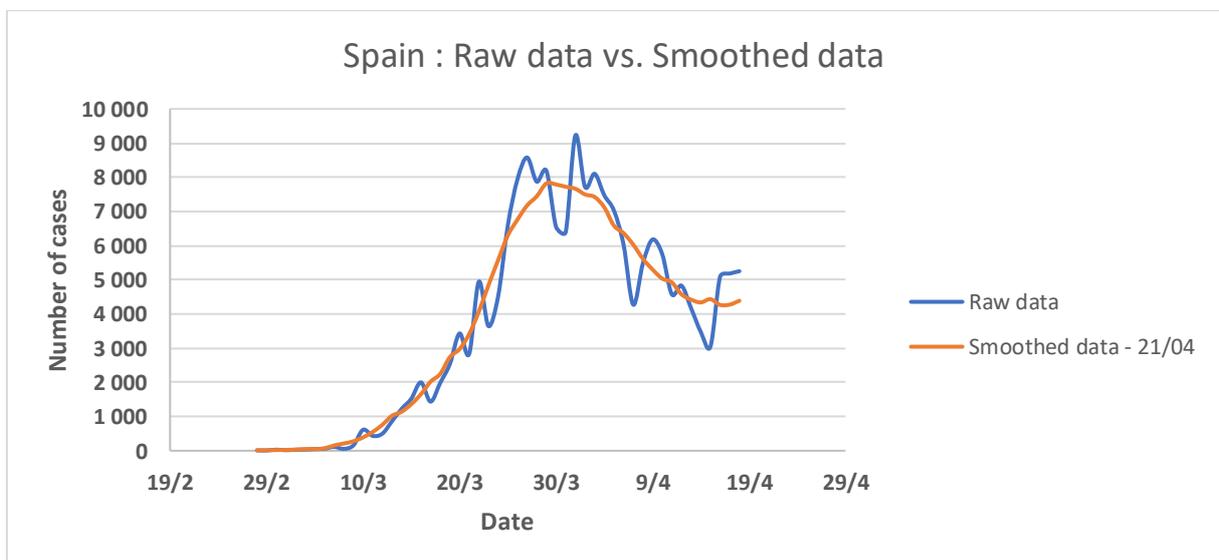


Figure 11 : Raw data and smoothed data over 7 days of the number of detected cases of COVID-19 in Spain in 2020 according to [19]

4.5.2. Comparison of the basic functions of the model by country

We see in the figures (Fig. 22, Fig. 23, Fig. 24, and Fig. 25) the comparisons of the graphs of the two epidemic functions $E_1(t)$ and $E_2(t)$ which frame the behavior of the epidemic between its standard evolution and its evolution with a lockdown from the start.

A marked difference between these two graphs indicates a more significant effect of the lockdown. We could relate it to the efficiency of this lockdown in the considered territory.

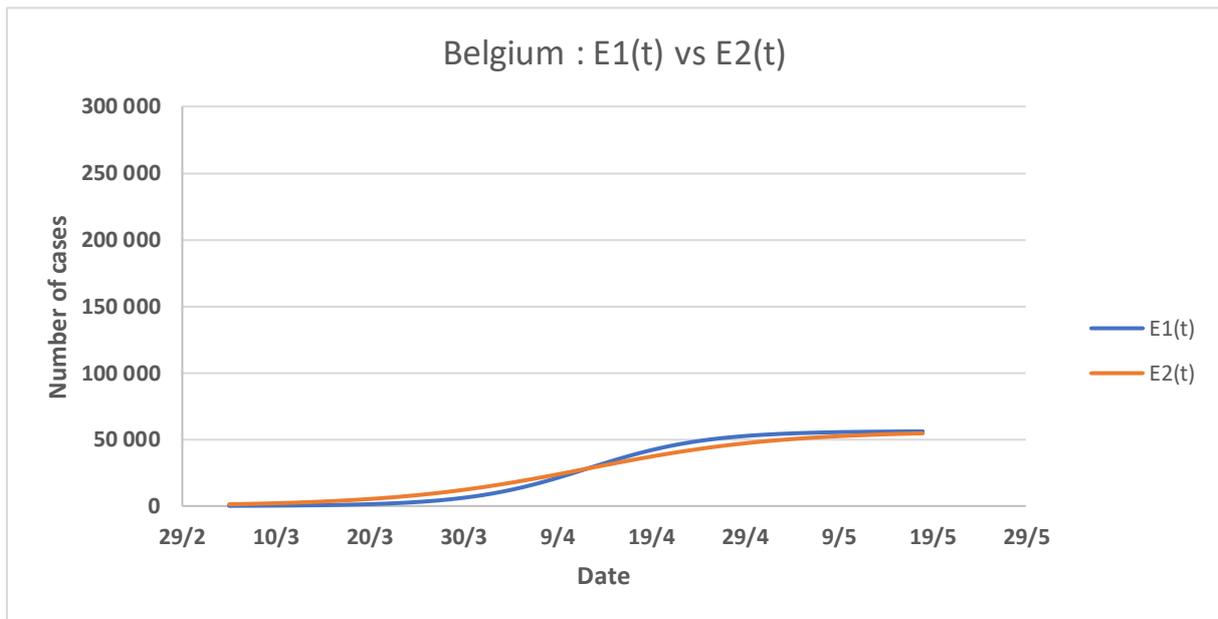


Figure 12 : Graph of functions $E_1(t)$ and $E_2(t)$ for Belgium, E_1 describing the epidemic without a lockdown, E_2 with a lockdown from the start.

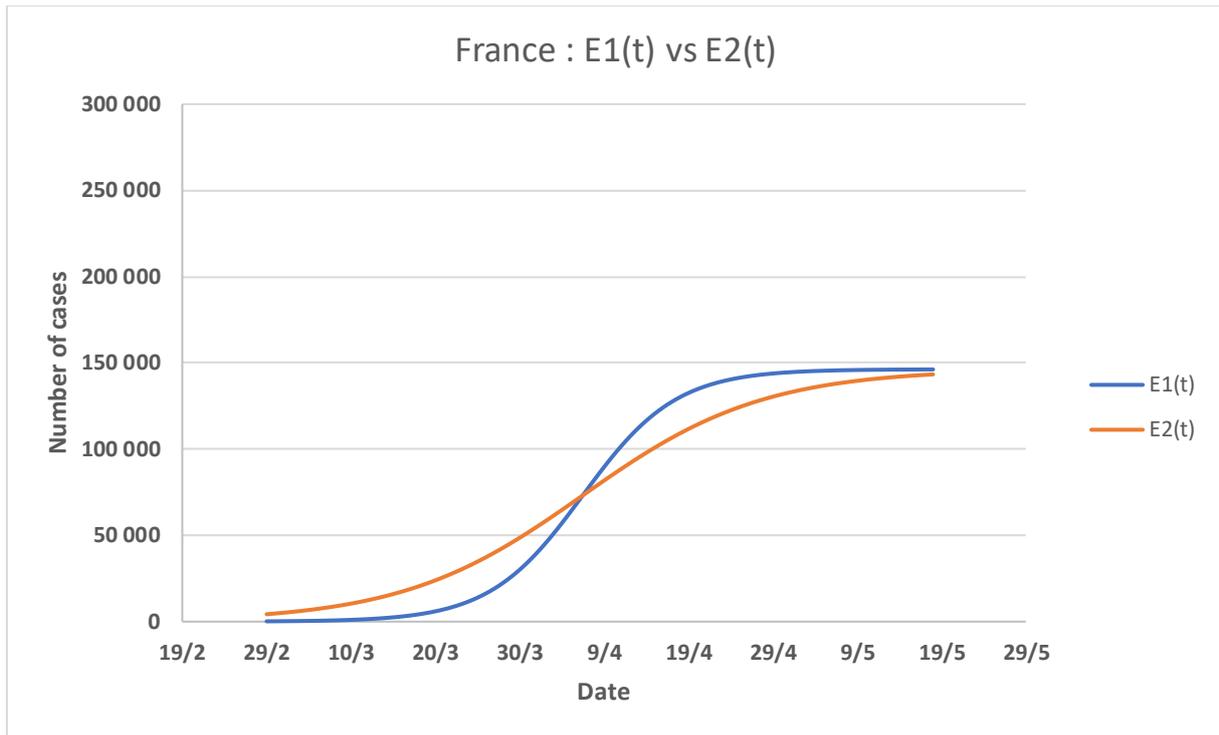


Figure 13 : Graph of functions $E_1(t)$ and $E_2(t)$ for France, E_1 describing the epidemic without a lockdown, E_2 with a lockdown from the start.

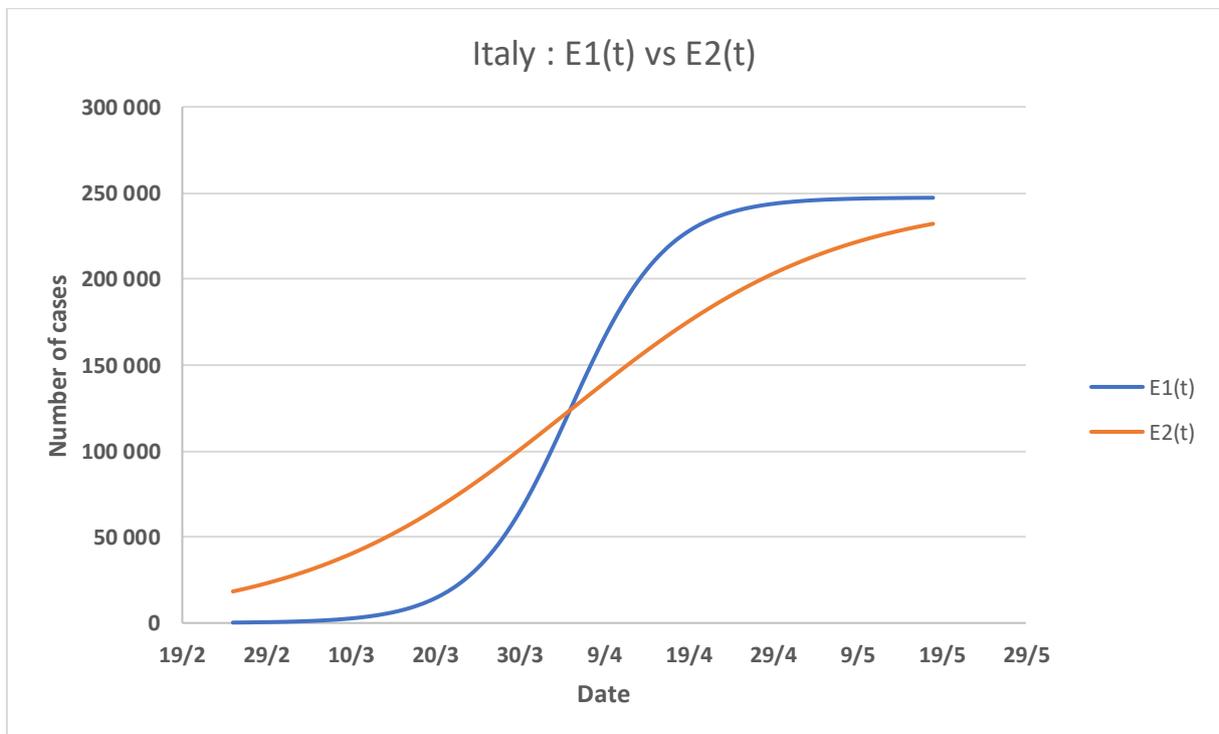


Figure 14 : Graph of functions $E_1(t)$ and $E_2(t)$ for Italy, E_1 describing the epidemic without a lockdown, E_2 with a lockdown from the start.

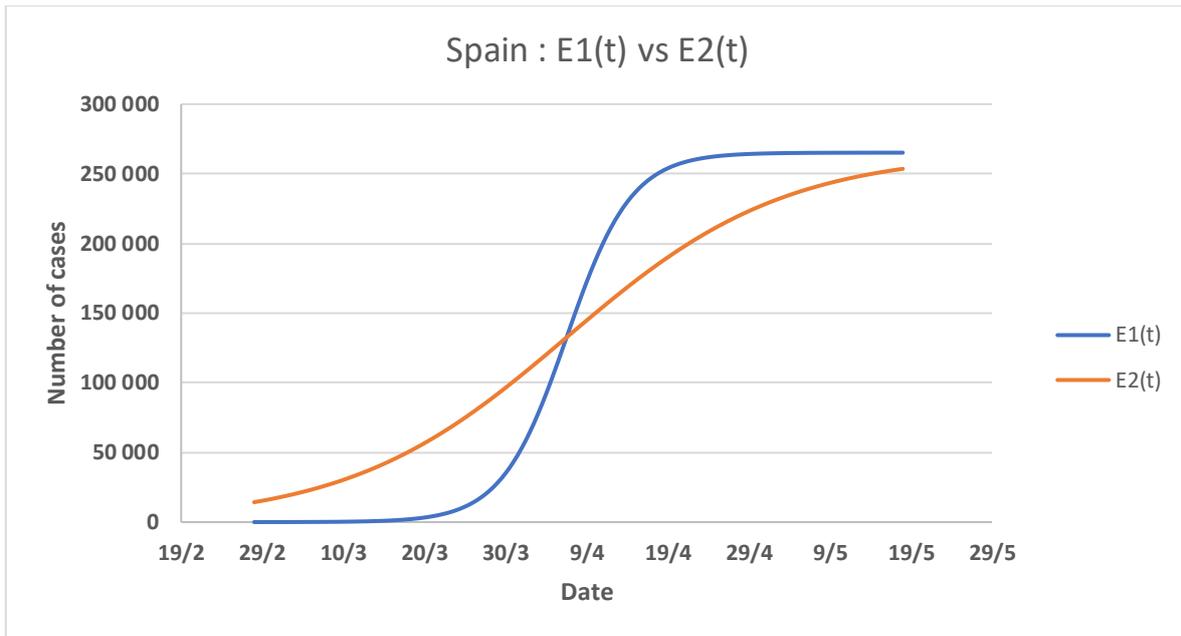


Figure 15 : Graph of functions $E_1(t)$ and $E_2(t)$ for Spain, E_1 describing the epidemic without a lockdown, E_2 with a lockdown from the start.

The transition from the function $E_1(t)$ to the function $E_2(t)$ is done by the function $q(t)$ (Fig. 26). $q(t)$ has been created to be a smoothed Heaviside step like function. The intensity of the slope is causally linked to the efficiency of the lockdown effect as the slope depends of the parameter α_c .

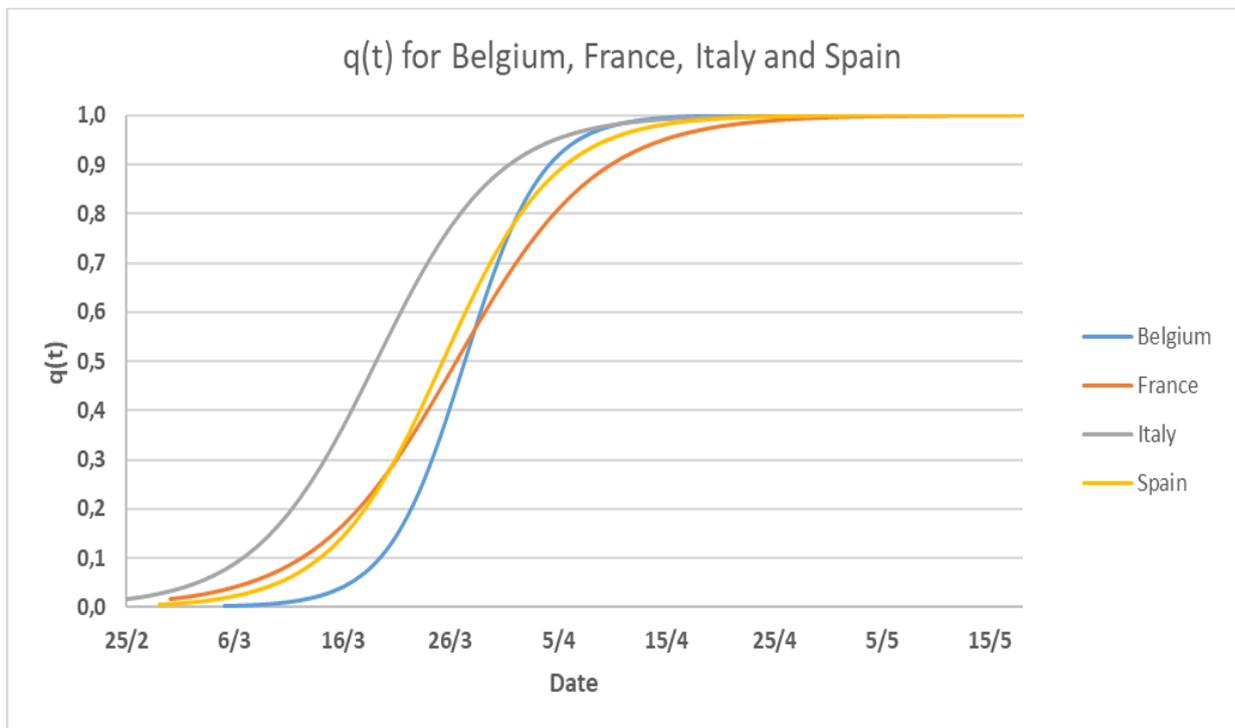


Figure 16 : Comparison of the functions $q(t)$ for Belgium, France, Italy, and Spain. The parameters were optimized by machine learning

4.5.3. Simulation results for past and current data

After the machine learning optimization of the parameters, the basic functions have been presented for each country. Let us now compare the smoothed data and the model - figures (Fig. 27, Fig. 28, Fig. 29 and Fig. 30).

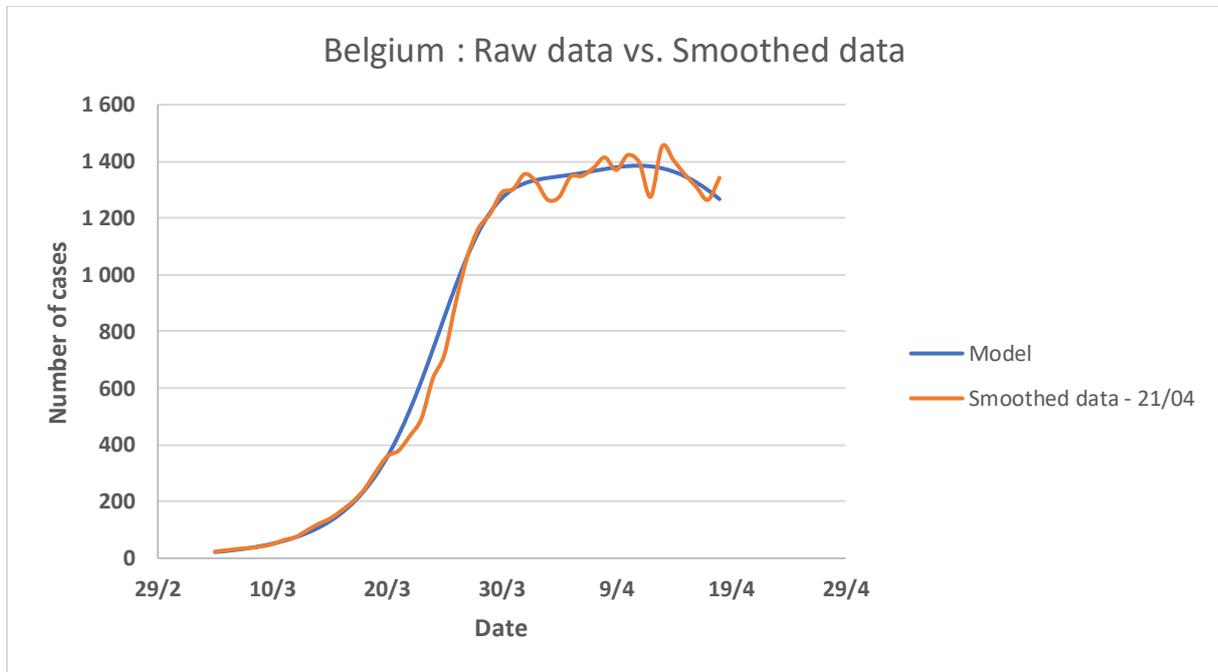


Figure 17 : Comparison between the smoothed data of the number of detected cases of COVID-19 in Belgium and our model

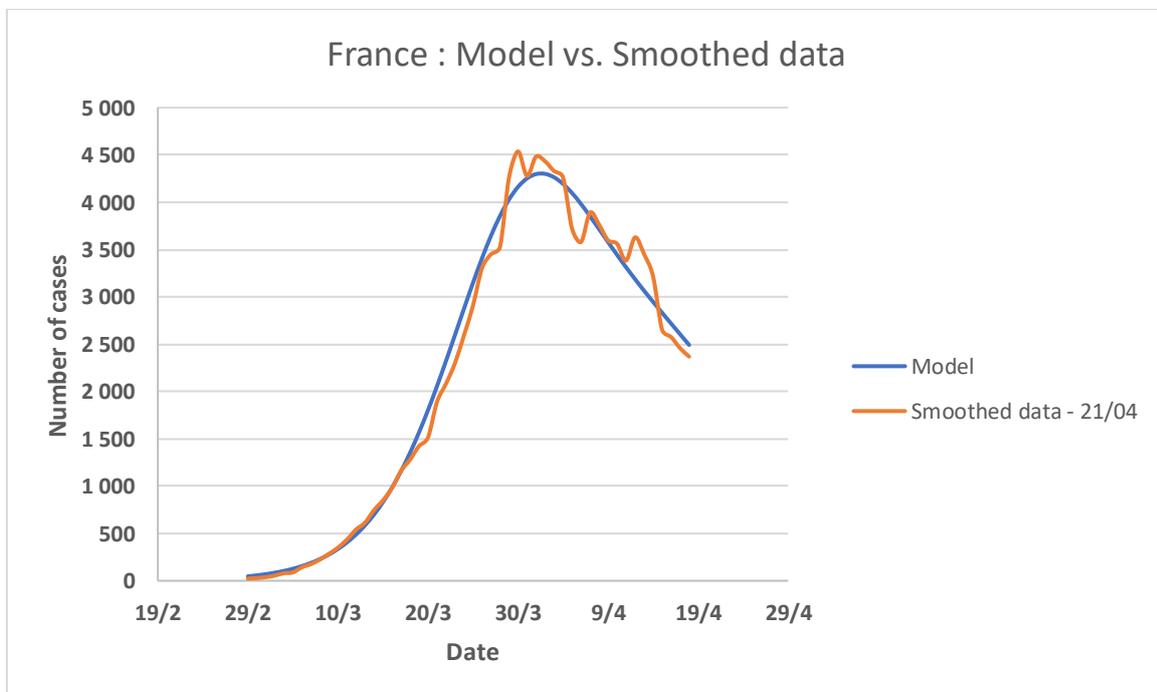


Figure 18 : Comparison between the smoothed data of the number of detected cases of COVID-19 in France and our model

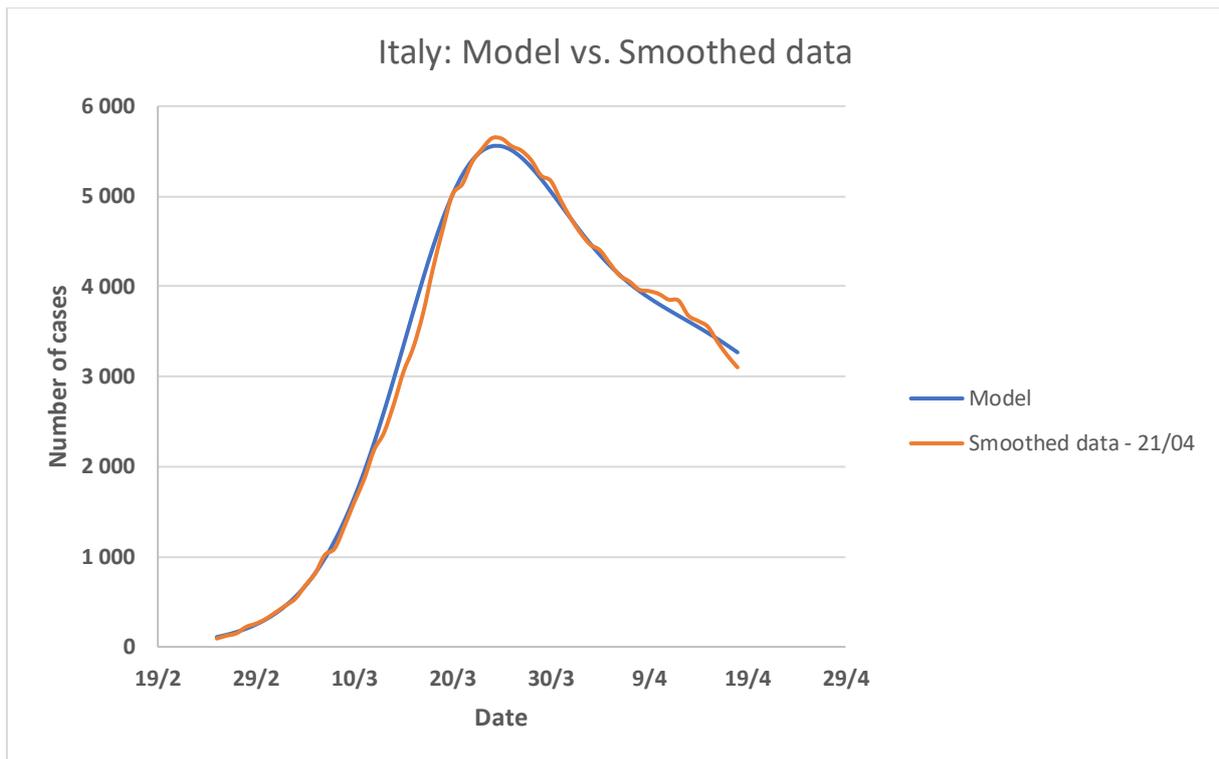


Figure 19 : Comparison between the smoothed data of the number of detected cases of COVID-19 in Italy and our model

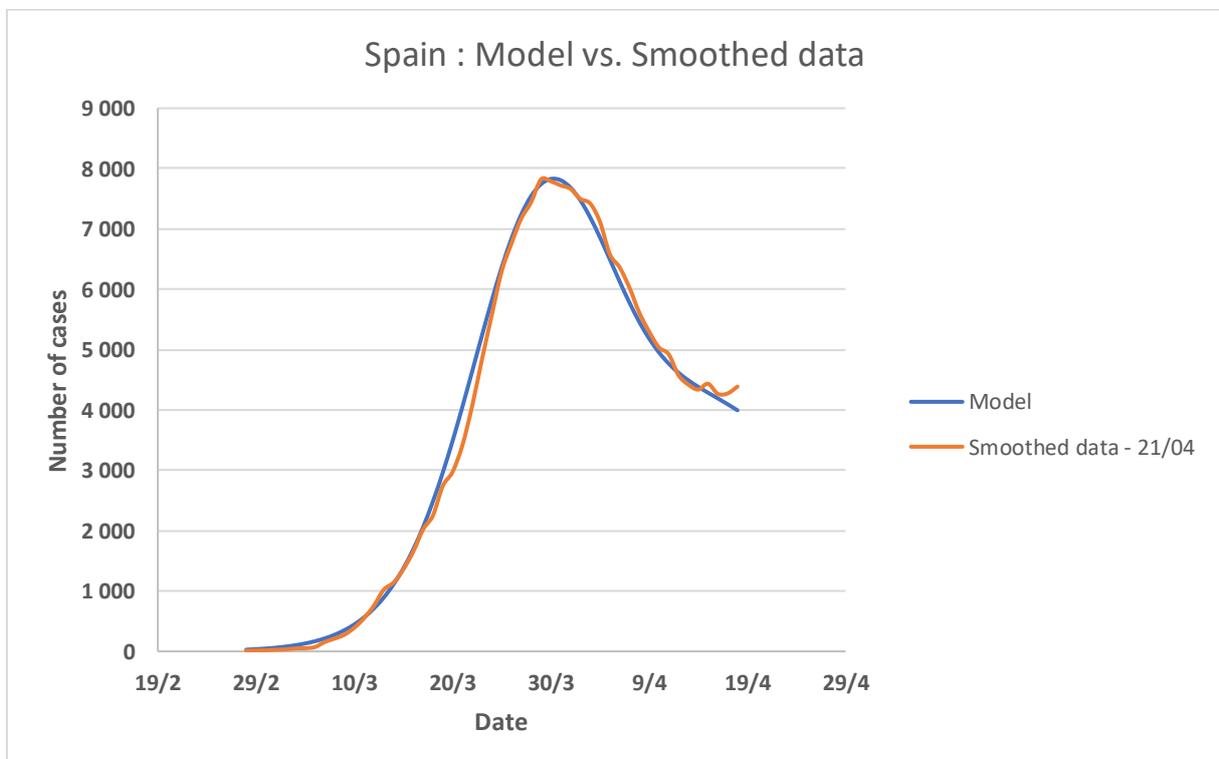


Figure 20 : Comparison between the smoothed data of the number of detected cases of COVID-19 in Spain and our model

4.5.4. Model predictions

So far, we presented the results up to the date of April 18th, i.e. up to the available data with which we trained the model. Obviously, one the main question is the quality of the predictions beyond this date. We present the results up to the 18th of May in the following figures (Fig. 31, Fig. 32, Fig. 33, and Fig. 34).

Therefore, the reader can observe that the model is based on data available up to the 21th of April (i.e. 18th of April once smoothed), we also draw the available data at the time of the publication, that is to say up to the 3rd of May (i.e. 30th of April once smoothed).

This allows the reader to assess the quality of the prediction.

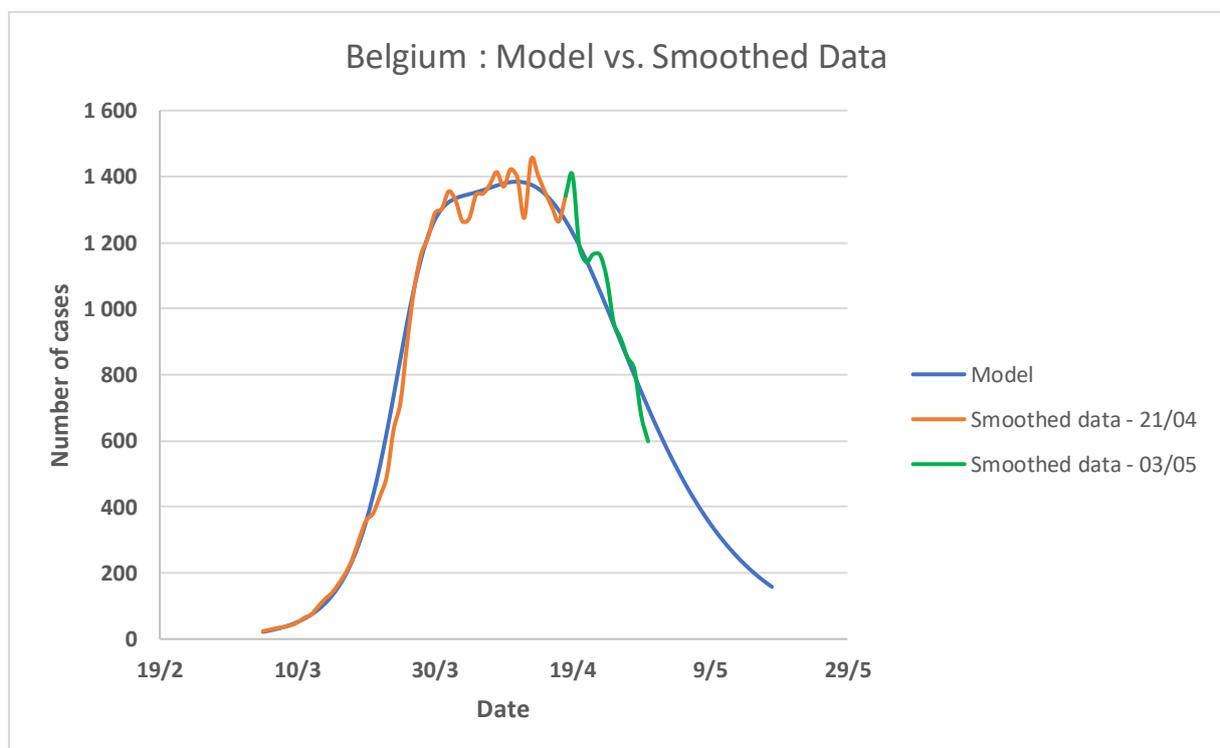


Figure 21 : Comparison between the smoothed data of the number of detected cases of COVID-19 in Belgium (orange : smoothed data available up to the 18st of April, green : up to the 30th of April) and our model (blue curve) based on the smoothed data of the 18th of April

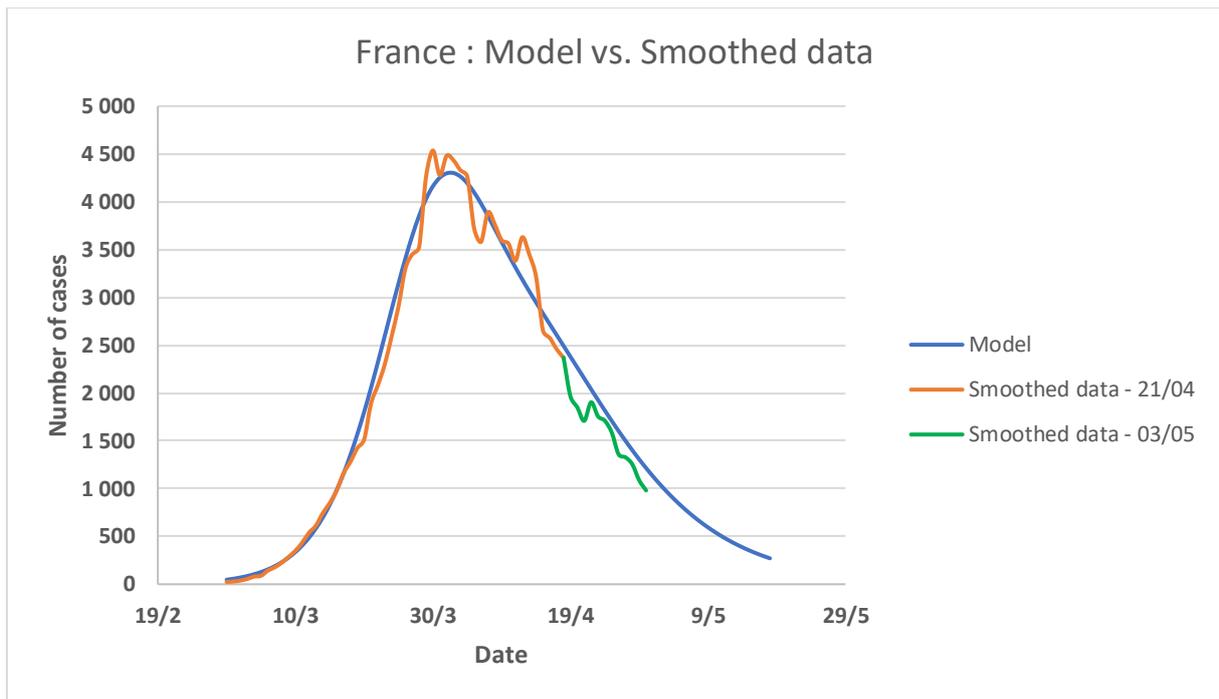


Figure 22 : Comparison between the smoothed data of the number of detected cases of COVID-19 in France (orange : smoothed data available up to the 18st of April, green : up to the 30th of April) and our model (blue curve) based on the smoothed data of the 18th of April

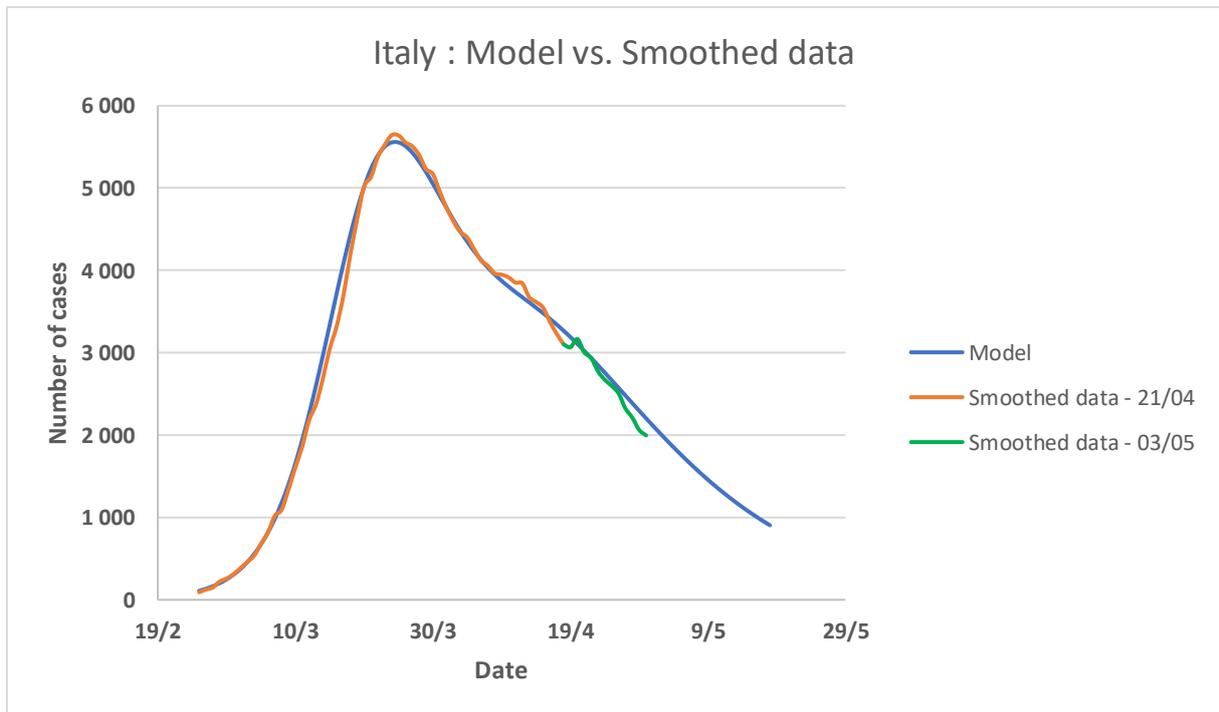


Figure 23 : Comparison between the smoothed data of the number of detected cases of COVID-19 in Italy (orange : smoothed data available up to the 18st of April, green : up to the 30th of April) and our model (blue curve) based on the smoothed data of the 18th of April.

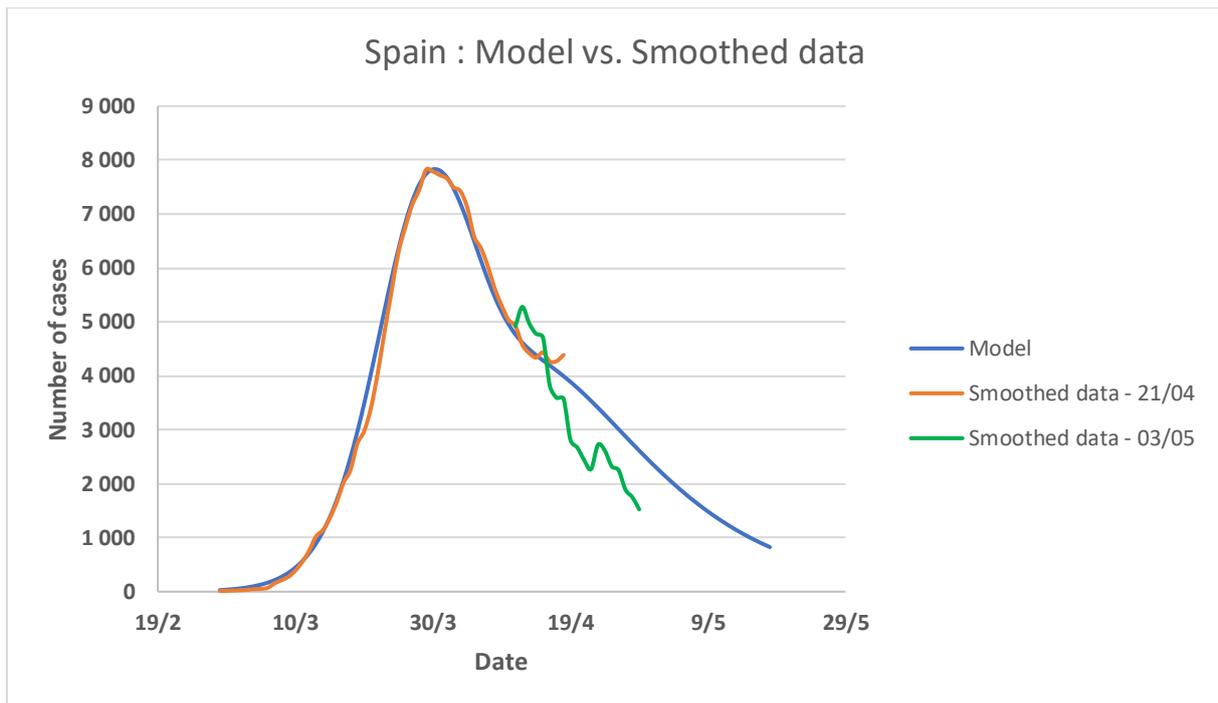


Figure 24 : Comparison between the smoothed data of the number of detected cases of COVID-19 in Spain (orange : smoothed data available up to the 18st of April, green : up to the 30th of April) and our model (blue curve) based on the smoothed data of the 18th of April.

As discussed later, the data quality for Spain seems debatable since on the new dataset (up to the 30th of April), the raw data has been changed from the 15th of April with variation up to 160%, even stranger the number of cases on the 19th of April is negative (-1 400 cases).

The reader will find below the corresponding value of the optimized parameters for each targeted country. Interestingly, those values are close for all countries, except for the total number of cases L , which obviously relies on country population.

<i>Final Value</i>	t_i	α_c	L	k_2	t_s	k_1
Belgium	22,31	0,140	56271	0,098	38,23	0,158
France	26,53	0,076	146277	0,093	37,47	0,181
Italy	23,12	0,089	247302	0,063	39,95	0,174
Spain	26,27	0,096	265181	0,074	38,53	0,250

<i>Error</i>	t_i	α_c	L	k_2	t_s	k_1
Belgium	0,22	0,01	2089	0,00	0,77	0,00
France	1,26	0,01	11025	0,01	1,39	0,01
Italy	0,27	0,00	10356	0,00	1,22	0,01
Spain	0,78	0,00	17900	0,01	1,51	0,02

Tableau 4 : Final values of the model parameters for the four countries, and analysis of the corresponding errors (standard deviation error) - t_i and t_s in days.

4.6. Discussion

We see that a simple macroscopic modeling of the Covid-19 epidemic in 2020, built with only two basic functions which permit to consider lockdown and its effects, allows to correctly model the evolution of the cases of people infected by the virus until the dates for which data are available. Simulation of other characteristics of the epidemic, such as the follow-up of hospitalizations or resuscitation, have also been carried out and will be published later [16]. They use the same model and the same optimization algorithm.

For the forecasts, they are always to be taken with caution because on the one hand, unexpected events having biological, human causes or of management of the epidemic can occur which modify the form of it in a significant way. On the other hand, the assumptions used may seem too summary to assign a level of probability to them. In peculiarly, the unlockdown time can be considered as a new behavior for a given population and modeled with a new elementary function in addition to the two functions used. This unlockdown time is not considered in the simulations. The results are however interesting and show how a learning algorithm can allow a simple model to correspond well to the macroscopic effects of the epidemic.

It will also be noted that the inflection point of the t_s sigmoid occurs on average 38.65 days (from 37.47 to 39.95) after the start of the epidemic (Table 4) for the four countries. This means that as of this date, half of the people who will be affected by the epidemic have been infected. Analysis of the values of t_i (duration entered at the start of the epidemic and the date of lockdown + duration of appearance of the first effects of lockdown) shows that the duration of appearance of the effects of lockdown is very similar for the four countries, of the order of 10.30 days (between 9.53 for France and 11.27 for Spain).

It should also be noted that the number of infected cases is half lower in France than in Italy and then in Spain.

The parameters α_c are associated to the velocity of changing of behavior after the lockdown. France, Italy, and Spain, with α_c between 0,076 and 0,096, have similar reactions for this evolution. By the way, to appreciate the step between the two behaviors, we must analyze the step between k_1 and k_2 for each country. The ratio k_1/k_2 represents the intensity of this change. In that case, Belgium appears to have the smallest change of behavior with a ratio of 1,62. France a ratio of 1,92 is better. Italy has a high ratio of 2,76 and Spain has strongly changed its behavior with a ratio of 3,36.

It is interesting to remember that the equation of the elementary basic functions $E_k(t)$ of the epidemic, given by the equation (III.4.2), or its initial form given in equation (III.4.1), are the solution of an elementary differential equation detailed in 2.1. This differential equation is solved for the boundary condition $y(0) = y_0$. The boundary condition y_0 characterizes the number of cases at time t_0 . We show in the Table 5 the values of y_0 given by the raw data and the smoothed data. They can be compared with the values of y_0 obtained by the modeling after the machine learning process. The differences of these values for raw and smoothed data are the intensity of the noise associated to these data. On the opposite, the differences

between the values of y_0 for the data and the modeling are interesting. It shows that the number of cases at time t_0 were strongly underestimated by a factor 5 in Italy and in Belgium, and by a factor 10 for France and Spain. The more precise measurement of these boundary conditions at t_0 could have helped to better appreciate the intensity of this epidemic in a brief time.

Country	y_0 Raw Data (Sum of the new cases from $t = -3$ to $t = 0$)	y_0 Smoothed Data (Value of new cases at $t = 0$)	y_0 given by the Model
Belgium	22	24	135
France	45	24	237
Italy	226	92	524
Spain	23	12	109

Table 5 : Values of the number of cases y_0 at t_0 measured with the raw and smoothed data, comparing to the number of cases y_0 at t_0 given by the model.

Note the extremely high value of y_0 for Belgium compared with the number of the inhabitants of this country, six times lower than the three other countries.

The coefficients R^2 of the model are given in the Table below and by country, with smoothed and non-smoothed data. We see that the simulation is particularly good for smoothed data. For raw data, the case of France is special given the positive data jumps that were recorded on certain days for administrative reasons. For Spain, despite of a good R^2 coefficient which show a good correlation between the data and the model, the official data given by this country after the identification of the model have changed strongly after the 15th of April. Then there is no peculiar significance on the analysis of this variation.

Country	Smoothed Data	Row Data – 18th April
Belgium	0,993	0,733
France	0,986	0,648
Italy	0,996	0,928
Spain	0,995	0,928

Table 6 : R^2 coefficient of quality of simulations compared to raw data and smoothed data.

Therefore, this global modeling of the COVID-19 epidemic seems to be understandable as a sum of only two different elementary basis functions including the effects of the lockdown, and the development of such analysis will probably permit to analyze the specific behavior of population, in complement of the classical approaches by micro-macro analysis.

4.7. Conclusion

We have created a particularly simple virus-centric model of the Covid-19 epidemic, based on a decomposition in generic basic functions adaptable to all countries and to all the characteristic criteria of its development.

Using a simple machine learning process, we show that only two basic elementary functions were sufficient to simulate the epidemic evolution for four European countries applying a lockdown, with accuracy.

The results permit to quantify the difference of behavior before and after the lockdown for these countries as well as the velocity of change and the intensity of change. We focused here on the model's ability to simulate the numbers of new cases reported in the Covid-19 epidemic over time. However, this model could be used for modeling hospitalizations, intensive care, and death. The prediction of a unlockdown effects should be also possible with this model, by adding a third elementary basic function describing the specific behavior of population after this event.

The presented simulations are relevant and clearly show the effects of the various lockdowns carried out. The analysis of basic functions used in this decomposition could in any case allow us to have a macroscopic analysis of how the lockdowns were respected. Other characteristics and simulations of the 2020 SARS CoV 2 epidemic for other countries will be given in the part 2 of the paper [20].

4.8. References

- [1] T.L. Wiemken, R.R. Kelley, Machine learning in epidemiology and health outcomes research, *Annual Review of Public Health*, 41, pp.21-36, 2020
- [2] V. Colizza, A. Barrat, M. Barthelemy, A. Vespignani, The modeling of global epidemics: Stochastic dynamics and predictability, *Bulletin of Mathematical Biology*, 68, 8, pp.1893-1921, 2006
- [3] Lin Jia, Kewen Li, Yu Jiang, Xin Guo, Ting Zhao, Prediction and analysis of Coronavirus Disease 2019, 2020, arxiv.org/abs/2003.05447v2
- [4] D. Caccavo, Chinese and Italian COVID-19 outbreaks can be correctly described by a modified SIRD model, 2020, <https://www.medrxiv.org/content/10.1101/2020.03.19.20039388v2>

- [5] C. Bayette, M. Monticelli, <https://images.math.cnrs.fr/Modelisation-d-une-epidemie-partie-1.html> (in french)
- [6] J. Moral, A. Trapero, Assessing the Susceptibility of Olive Cultivars to Anthracnose Caused by *Colletotrichum acutatum*, *Plant Disease*, 93, 10, pp.1028-1036, 2009
- [7] Z. Mesha, B. Hau, Effects of bean rust (*Uromyces appendiculatus*) epidemics on host dynamics of common bean, *Plant Pathology*, 57, pp.674-686, 2008
- [8] I.J. Holb et al. Analysis of Summer Epidemic Progress of Apple Scab at Different Apple Production Systems in the Netherlands and Hungary, *J. of Phytopathology*, 95, 9, pp.1001-1020, 2005
- [9] S.G. Mahiane et al., Improvements in Spectrum's fit to program data tool, *AIDS*, 31 (Suppl 1), p.S23-S30, 2017
- [10] J.W. Eaton et al., The Estimation and Projection Package Age-Sex Model and r-hybrid Model: new tools for estimating HIV incidence trends in sub-Saharan Africa, *AIDS*, 33, (Suppl 3), p.S235-S244, 2019
- [11] G. Allaire, Shape optimization by the homogenization method, Springer Verlag, New York, 2001
- [12] O. Oleinik, A. Shamaev, G. Yosifian, Mathematical Problems in Elasticity and Homogenization Studies in Mathematics and its Application 26 Elsevier, Amsterdam, 1992
- [13] E. Sanchez-Palencia, Non-Homogeneous Media and Vibration Theory, Springer, *Lecture Notes in Physics*, 129, 1980
- [14] P.M. Suquet, Elements of Homogenization for Inelastic Solid Mechanics, Homogenization Techniques for Composite Media, 105, pp.193-278, Springer-Verlag, 1987
- [15] Y. Rémond, S. Ahzi, M. Baniassadi, H. Garmestani, Applied RVE Reconstruction of Heterogeneous Materials, Wiley-ISTE Ed., 2016
- [16] P-F. Verhulst, *Notice sur la loi que la population poursuit dans son accroissement, Correspondance mathématique et physique*, n° 10, pp.113-121, 1838
- [17] Epidemic Modelling, D.J.Daley, J.Gani, Cambridge University Press, 1999, ISBN 0 521 01467-0
- [17] D.W. Marquardt, An algorithm for least-squares estimation of non linear parameters, *SIAM J. Appl. Math.*, 11, pp.431-441, 1963
- [18] K. Levenberg, A method for the solution of certain problems in least squares, *Quart. Appl. Math.*, 2, pp.164-168, 1944
- [19] <https://www.ecdc.europa.eu/en>
- [20] J. Rémond, D. George, S. Ahzi, Y. Rémond, On a New Virus-centric Epidemic Modeling Approach, 2: Simulation of deceased for 2020 SARS CoV 2 in several countries, submitted to *Mathematics and Mechanics of Complex System*.

5. Article 2 : On a New Virus-Centric Epidemic Modeling, 2: Simulation of deceased of SARS CoV 2 in several countries³

Article écrit par J. Rémond, D. George, S. Ahzi, Y. Rémond, soumis à Mathematics and Mechanics of Complex Systems.

Abstract

We recently published a macroscopic virus-centric model to simulate the evolution of the SARS CoV 2 epidemic (COVID 19) at the level of a country or a geographical entity using a new decomposition modeling and machine learning optimization. The approach assumes that an epidemic can be analyzed as the combination of several elementary epidemics representing each different parts of the population with different behaviors through time, different locations, or different phases of the virus propagation like emergence of new variants. In Part 1 of the paper, published in 2020, we presented the details of the model and its application for new cases through different countries. In this second part, we develop and analyze an application of this modeling to the number of deceased cases among 22 different countries in Europe. The proposed modeling is still based on the finite superposition of Verhulst equations commonly known as logistic functions and used in population dynamics. The novelty comes from the new decomposition of a complex event and the use of machine learning algorithm. The results show that this approach enables to well simulate the evolution of the number of deaths for the different analyzed countries, population, or age. It also shows that the epidemic kinetic can be well simulated whether you consider the overall epidemic kinetic as one epidemic or as the sum of independent epidemics, as is presented here regarding the age of the population. The modeling prediction quality was also studied as a function of the amount of available data.

Keywords: COVID-19, Epidemic, Modeling, Simulation, Machine Learning, Deaths, Logistic function, Verhulst

5.1. Introduction

This paper is the Part 2 of a new modeling that can be applied for a large range of complex systems. It is used here on Covid-19 epidemics as an example. This second part is devoted to the modeling of the number of deaths during the epidemics in European countries, using the model presented in [1] for the same period (first wave of the epidemic). We considered the same period to keep homogenized data since the human behaviors, politics decisions, vaccinations rate and the virus (apparition of new variants) changed afterwards. This modeling uses an original decomposition of complex events in a combination of logistic curves optimized by machine learning. All details of this modeling can be found in Part 1 of the paper

³ Les numéros de références citées dans l'article sont celles de l'article et non du chapitre

[1] with application to the number of new cases of the epidemics. It is summarized in the next paragraph.

In this Part 2 of the work, we apply the same procedure to the evolution of the number of deaths in 22 European countries. We study the effect of the amount of data used on the evolution of the modeling more specifically in 6 countries. Finally, we study the case of the epidemic within age groups in France and replicate our approach for each age group independently. We then compare the sum of the age group models to the previous approach, considering the overall country, and show that there is no difference in the modeling quality between both approaches. Hence, it seems the model can indeed be decomposed in a finite sum of elementary Verhulst processes considering different parameters as was presented in Part 1 of the paper [1].

The context and importance of the Covid-19 epidemic induced the publication of numerous scientific papers that did not exist at the production time of the Part 1 of this work. Among this production, some papers use machine-learning-driven modeling, but none use a decomposition of elementary processes for the understanding of this type of complex systems. We also anticipate that the proposed method could be applied to many areas of human activity as engineering applications, social or commercial processes and increase the possibilities to understand and to predict complex systems with limited available data.

Among the literature published since Part 1 [1], the global evolution of the epidemic was studied by T.L. Wiemken et al. [2], who publish a state of the art about machine learning approaches in epidemiology explaining why these methods have the potential to improve our understanding of health and opportunities for intervention, far beyond our past capabilities. They were followed by L. Jia et al. [3] who used three different mathematical models, i.e., Logistic model (statistical probability evolution), Bertalanffy model (growth evolution) and Gompertz model (death rate), for studying the epidemics. They concluded that the Logistic approach is the best modeling among the three for this kind of problem. To optimize these approaches and model predictions, D. Caccavo [4] showed how to connect two types of epidemics data in two different countries for optimizing a modified SIRD (Susceptible, Infected, Recovered, Dead) model.

A number of works concentrated on the Verhulst model in the last few years. Bo Zeng et al. [5], proposed a very interesting new model based on a non-homogeneous exponential function that enables to overcome the traditional difficulty of choosing initial values for the classical Verhulst model. Lode K.J. Vandamme et al. [6], after considering that the epidemics evolution presents often multiple and unpredictable peaks, use the Verhulst model using different age groups, and show a quantitative understanding of the different behavior rules. These authors [7] also used the Verhulst model for the prediction of cancer cells proliferation.

The classical Verhulst model was also used by M. Battista [8] for the prevision of the size and the peak-time of the epidemic in different countries and showed similar results than the SIR model with explicit equations. This work was followed by P. Wang et al. [9] who proposed the first combination of Verhulst models with a machine learning approach. They showed that this hybridization has a valuable advantage to forecast the epidemic trend.

Yu-Feng Zhao et al. [10] used six rolling models (adding the latest data and removing the earliest data) to predict the daily growth trend of the number of confirmed patients with COVID-19 in China. They showed that their approach predicted with high accuracy the final date and number of confirmed patients during this studied wave. In parallel, J. Demongeot et al. [11] used the Verhulst model for the parameter's identification in the SI model and provided a way to compute the parameters at an early stage of the epidemic.

In a very original approach, F. Louchet et al. [12] analyze the specific role of epidemic control parameters using attractors of the theory of dynamical systems, with an analysis of the stable or chaotic evolution of the disease. But despite its interest, the results are complicated to use with Verhulst laws. A. Abusam et al. [13] compared the Verhulst and Richards models (two logistic models) to study the problems of predictability of these models. They show that Verhulst as well as Richards models must not be used alone for identifying Covid-19 epidemics with a good accuracy. Interestingly, G.L. Vasconcelos et al. [14] studied with a logistic model the publication rate (preprints) devoted to the COVID-19 epidemics and showed that it also follows a sort of contagion process.

Quite a few works concentrated on the Verhulst approach. The validation of this choice was presented by C. Mahanty et al. [15] who compared the Verhulst and Gompertz model to the SIR model. They showed that for Asian countries, Brazil, Italy and Germany, the Verhulst model fitting effect is better than Gompertz and SIR models.

All these works were initiated and developed by P-F. Verhulst and followers [16 -18], and especially in the PhD work of D. Moulay [19], who studied different conditions of stability of the Verhulst model. The first scientist who explored the summation of different Verhulst equations with applications on geological questions was L.D. Roper [20]. The work proposed here is a generalization of this idea.

Since continuous functions are used to model discrete phenomena in our micro-macro description of the epidemics, we see that other approaches exist and develop very accurate and sophisticated scale change techniques [1], [21-25]. But, due to the lack of information available at the microscale in our case, they cannot be used here or need too much variables identification for the modeling.

Other methods would provide more robust decompositions of complex systems such as the PGD (proper generalized decomposition) [26-28], leading to dimensionality reduction

algorithms. But although well adapted for solving partial differential equations, they cannot be compared with the very simple approach that we investigate here.

5.2. Theoretical Background

The modeling explained in the part 1 of the paper [1] is a generalization of the logistic model known as Verhulst's law, implemented in population dynamics. A population $y(t)$ of individuals evolves according to a simple ordinary differential equation:

$$\frac{dy}{dt} = y(N(y) - M(y))$$

with $N(y)$ the birth rate and $M(y)$ the death rate. If $N(y)$ and $M(y)$ are linear functions, this equation can be written

$$\frac{dy}{dt} = ry \left(1 - \frac{y}{K}\right),$$

r and K being strictly positive real numbers. K is conventionally called the carrying capacity in population dynamics theory, r is the growth rate which leads to an increase of population if $y(0) = y_0 < K$, to a decrease if $y_0 > K$ and is stable if $y_0 = K$.

The resolution of this simple ordinary differential equation allows defining the logistic function:

$$y(t) = K \left[1 + \left(\frac{K}{y_0} - 1\right) e^{-rt}\right]^{-1} \quad (\text{III.5.1})$$

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} y(t) = K$$

$y(t)$ is the solution defined on $[0, +\infty[$, of the system constituted by :

$$y(0) = y_0 \text{ and } y' = ry \left(1 - \frac{y}{K}\right).$$

For a complex system as an epidemic, the population $y(t)$ can be the number of cases as in [1].

Here the number of deaths called in the modeling $E^k(t)$, with k describing the deaths or other types of characteristics, is a continuous function of \mathbb{R} in \mathbb{R} defined below. Even if the number of deaths is a whole number, the functions $E^k(t)$ which approximates this number of deaths, will be defined of \mathbb{R} in \mathbb{R} .

As explained in [1], the functions $E^k(t)$ is built as a sum of continuous elementary functions associated to the population i , $E_i^k(t)$ of \mathbb{R} in \mathbb{R} , which depends themselves on different behaviors j .

Then, we have $E^k(t) = \sum_{i=1}^{i=P} E_i^k(t) = q_{ij}(t)E_{ij}^k(t)$, considering the Einstein summation convention on i and j . Only one characteristic is used here, the number of deaths, then the exponent k can be deleted. We therefore restrict this decomposition, as in [1], for the death number, in the sum of two elementary functions:

$$E_1(t) \text{ and } E_2(t) \text{ with } E(t) = q(t)E_1(t) + (1 - q(t))E_2(t), \quad (\text{III.5.2})$$

with $q(t)$, a chosen transition function :

$$q(t) = \frac{1}{2} [\tanh(\alpha_c(t - t_0)) + 1] \text{ defined from } [0, +\infty[\text{ to }]0,1[, \quad (\text{III.5.3})$$

α_c and t_0 are characteristics constants.

For $E_1(t)$ and $E_2(t)$, we use here two logistic functions similar to equation (III.5.1) :

$$E_1(t) = L_1 [1 + e^{-r_1(t-t_{s1})}] \text{ and } E_2(t) = L_2 [1 + e^{-r_2(t-t_{s2})}] \quad (\text{III.5.4})$$

L_i is the cumulative number of deaths of each elementary epidemic. r_i the kinetics of each of them, and t_s the time taken to reach the peak of the epidemic, described daily of new deaths. We use here the same other assumptions than those detailed in [1].

The model is therefore defined by the following six simple parameters:

Parameters	Definition	Unit
L	Total Numbers of Deaths	-
r_1	Characteristic of the epidemic without lockdown	Day ⁻¹
r_2	Characteristic of the epidemic with lockdown	Day ⁻¹
t_i	Duration between the start of the epidemic and the start of the lockdown + time of appearance of the first effects of the lockdown	Day
t_s	Duration from start of epidemic to date of inflection point*	Day
α_c	Lockdown efficiency coefficient	Day ⁻¹

Table 7 : List and definition of the model parameters. * Note that the inflection point of the sigmoid corresponds to the maximum value of its derivative, which is often called "peak of the epidemic".

To obtain the parameters of the model by supervised machine learning, a python code was developed using gradient descents conventionally used in machine learning. In our case, the Levenberg-Marquardt algorithm [29], was chosen to optimize the mean squared error function as in [1].

The learning datasets for each country, as for the first part [1], have been compiled using official European information from the European Center for Disease Prevention and Control or ECDC [30], except for the use case considering the group age where the data used comes from “Santé publique France” [31] (i.e. the French authorities).

To achieve the learning optimizations for each country, the following initial values have been set:

Parameters	Input value in the algorithm
L	This value was randomly selected as a percentage of the population
r_1	0,3
r_2	0,1
t_i	Time between the start of the epidemic and the appearance of the inflection point
t_s	Time between the start of the epidemic and the appearance of the inflection point
α_c	0,1

Table 8 : input values of the model parameters, i.e. before supervised learning. Please note that those input values can be changed up into the same order of magnitude with no significant consequences on the final results after using the algorithm.

These values have been chosen through data analysis to be consistent with our model and the available experimental data. For L , r_1 , r_2 , t_i , t_s , α_c , the input values influence the speed of the convergence of the algorithm and ensure the bypassing of local minima :

L : the input value in the algorithm for the total number of people reached by Covid-19 was chosen to be a percentage of the population of the considered country. Note that the choice of the input value of L has do not modify its final value obtaining after running the numerical algorithm.

r_1 , r_2 : their input values are linked to the analysis of the evolution of the epidemic as well as the analysis of experimental data.

t_i , t_s : After analysis, the inflection point defined with t_i and t_s is chosen as open value. It allowed us to automatically run the algorithm though a large number of countries. Presented in [1] those values are not the expected targeted values. We defined them in order to have an automated way to pick their initial values from the public data.

α_c : the initial value was set after several tests in order to facilitate the convergence of the fitting algorithm.

The total population of each country is provided by the ECDC [21], reported to be from the World Bank Group: <https://www.worldbank.org/>

5.3. Results

All the simulations presented here are between the months of March 2020 and July 2020 (first wave of COVID 19 in Europe). At this time, the variant was the same everywhere. The chosen countries are: Armenia, Austria, Belgium, Denmark, Finland, France, Germany, Hungary, Ireland, Italy, Kosovo, Netherlands, Norway, Poland, Portugal, Romania, Russia, Spain, Sweden, Switzerland, Turkey, UK.

To increase the ability of the algorithm to quickly converge to a solution, we smoothed the raw data C_i over several days as $C_{i(lissé)} = \frac{1}{3}(C_{i-1} + C_i + C_{i+1})$ for three days. To minimize the noise effects and obtain optimum convergence, we used only the values smoothed over 7 days.

5.3.1. Results of the simulations for 16 European countries

Figures 35 & 36 show the results of our simulation on the amount of deaths for 2 groups of countries :

- Figure 35 : Group with a moderate amount of deaths (< 250 deaths per day)
- Figure 36 : Group with small amount of deaths (< 50 deaths per day)

MODEL SIMULATION FOR 6 COUNTRIES WITH A MODERATE AMOUNT OF DEATHS

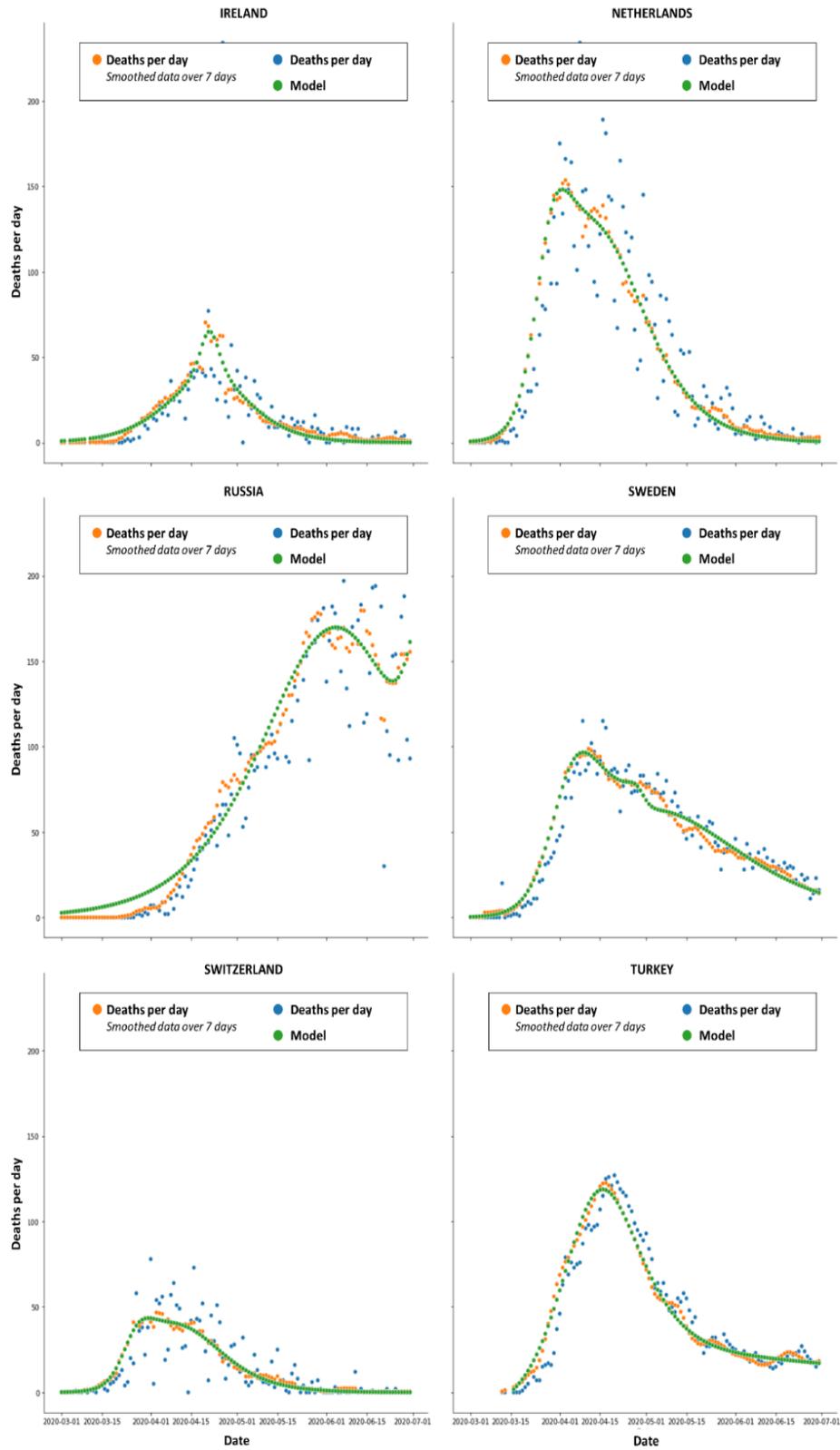


Figure 25 : Model simulations for 6 countries with a moderate number of deaths (Ireland, Netherlands, Russia, Sweden, Switzerland, Turkey)

MODEL SIMULATION FOR 10 COUNTRIES WITH A SMALL AMOUNT OF DEATHS

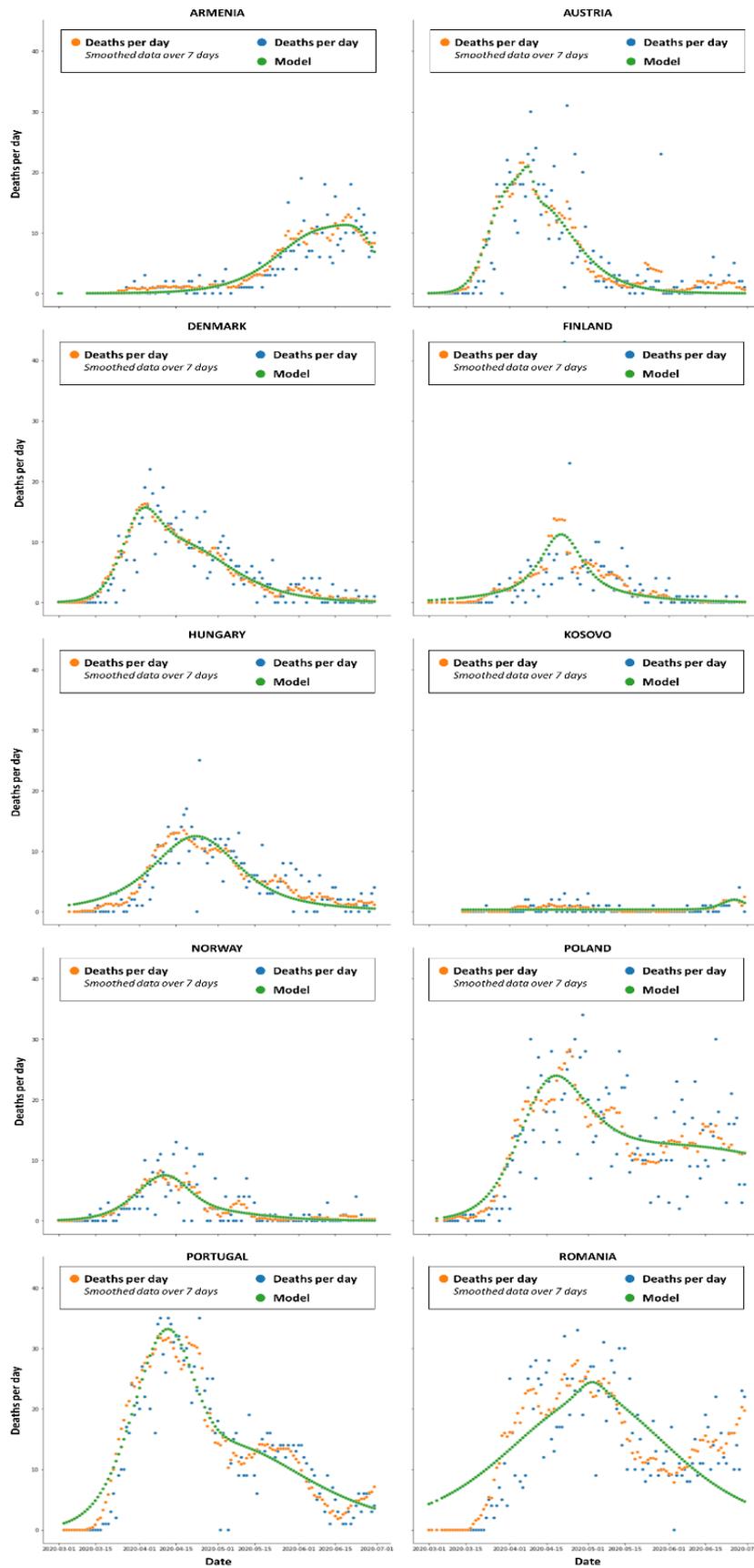


Figure 26 : Model simulations for 10 countries with a small number of deaths (Armenia, Austria, Denmark, Finland, Hungary, Kosovo, Norway, Poland, Portugal, Romania)

	Armenia	Austria	Belgium	Denmark	Finland	France	Germany	Hungary	Ireland	Italy	Kosovo
R ²	0,96	0,95	0,99	0,98	0,87	0,98	0,99	0,94	0,95	1,00	0,26

	Nether—lands	Norway	Poland	Portugal	Romania	Russia	Spain	Sweden	Switzer—land	Turkey	UK
R ²	0,99	0,93	0,90	0,93	0,71	0,97	0,94	0,98	0,99	0,93	0,99

Table 9 : R² value of the simulation for each country

Table 9 shows the R² value of the simulation for each country. Note that the model results for 6 countries (Belgium, France, Germany, Italy, Spain, United Kingdom) are available in paragraph 5.3.2.

5.3.2. Variation of the simulations depending on the number of data available for 6 countries

The Figures 37 to 42 show the simulations of the death numbers for six countries between the months of March 2020 and July 2020. The countries are Belgium (Fig. 37), France (Fig. 38), Italy (Fig. 39), Spain (Fig. 40), Germany (Fig. 41), and United Kingdom (Fig.42). In each Figure, 8 graphs are plotted, explaining how the algorithm is simulating progressively the death number, using the growth of the available data. The first simulations take the data from the beginning of the epidemic t_0 , up to $t_0 + 20$ days, the second the data from the beginning to $t_0 + 30$ days, etc. The last graphs show the simulation using the total data available from the beginning to the end in July 2020.

In addition, Table 10 shows the values evolution of the R² parameters for each country.

MODEL SIMULATION FOR BELGIUM USING ONLY THE DATA OF THE...

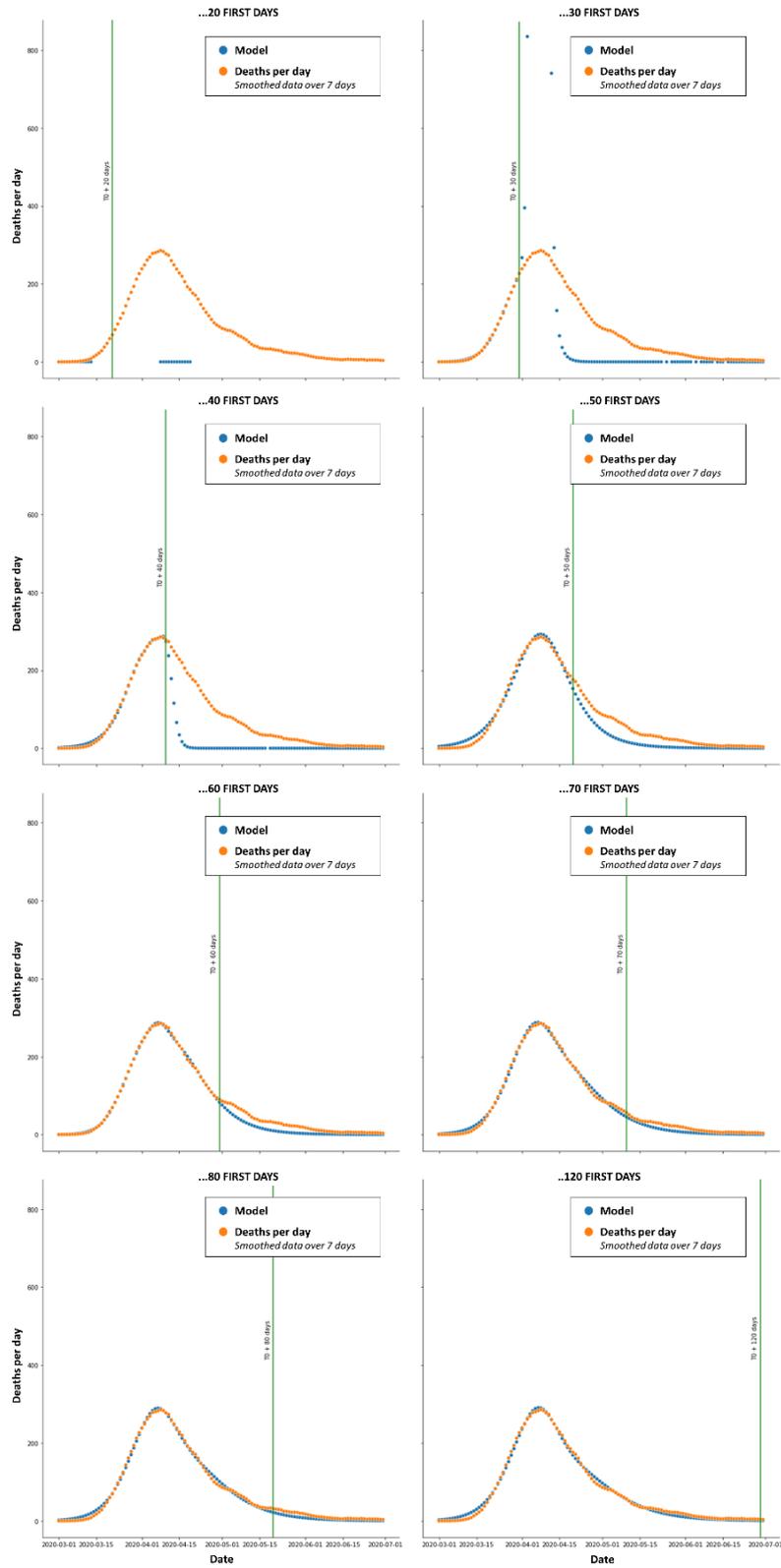


Figure 27 : Variation of the simulations of the deaths number in Belgium, from March to July 2020. The orange dots represent the experimental data. Each graph uses the data given at the left of the green vertical line. Then the model simulates the whole duration of the epidemic time, before and after the green vertical line (Blue points)

MODEL SIMULATION FOR FRANCE USING ONLY THE DATA OF THE...

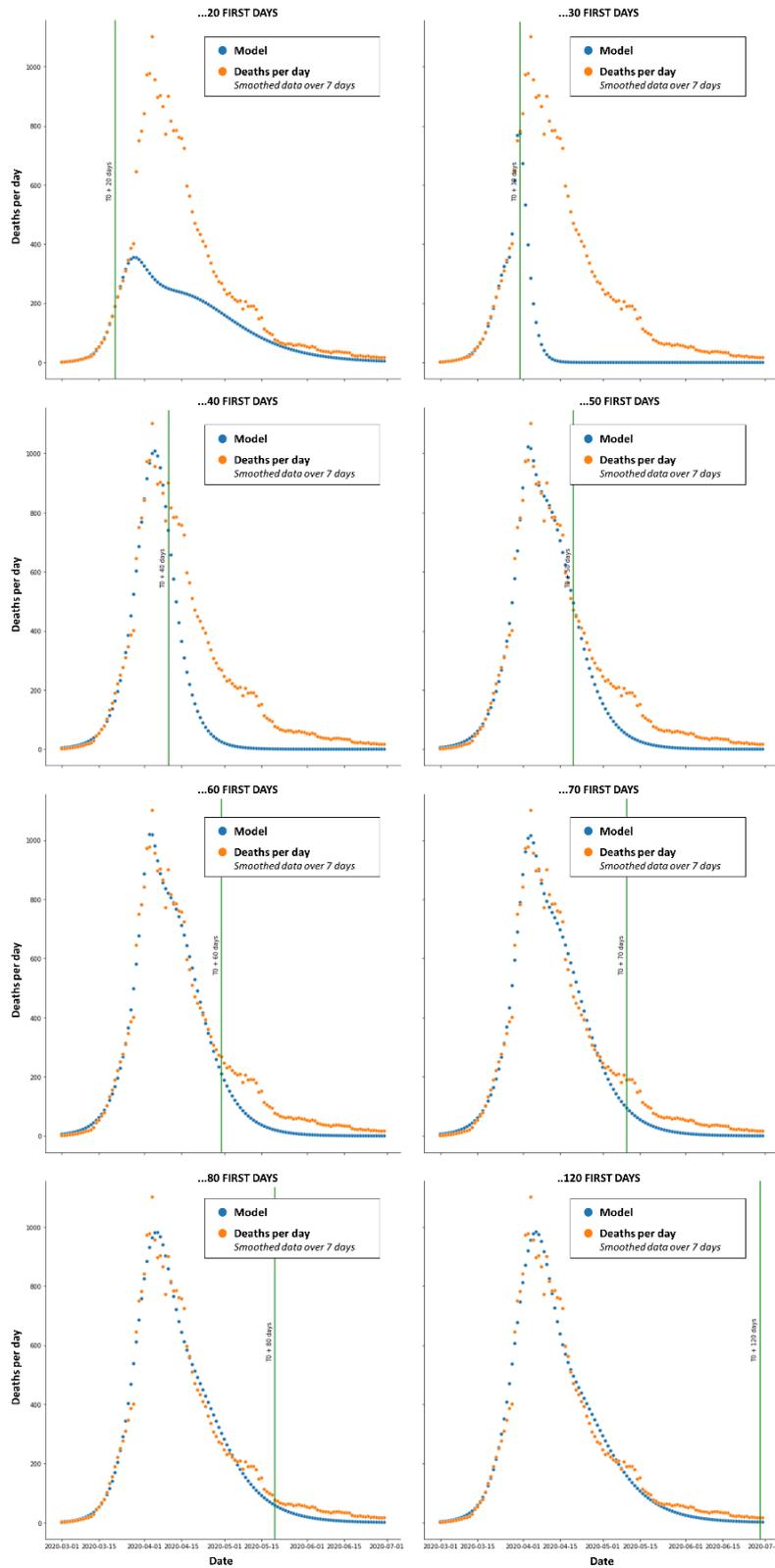


Figure 28 : Variation of the simulations of the deaths number in France, from March to July 2020. The orange dots represent the experimental data. Each graph uses the data given at the left of the green vertical line. Then the model simulates the whole duration of the epidemic time, before and after the green vertical line (Blue points)

MODEL SIMULATION FOR ITALY USING ONLY THE DATA OF THE...

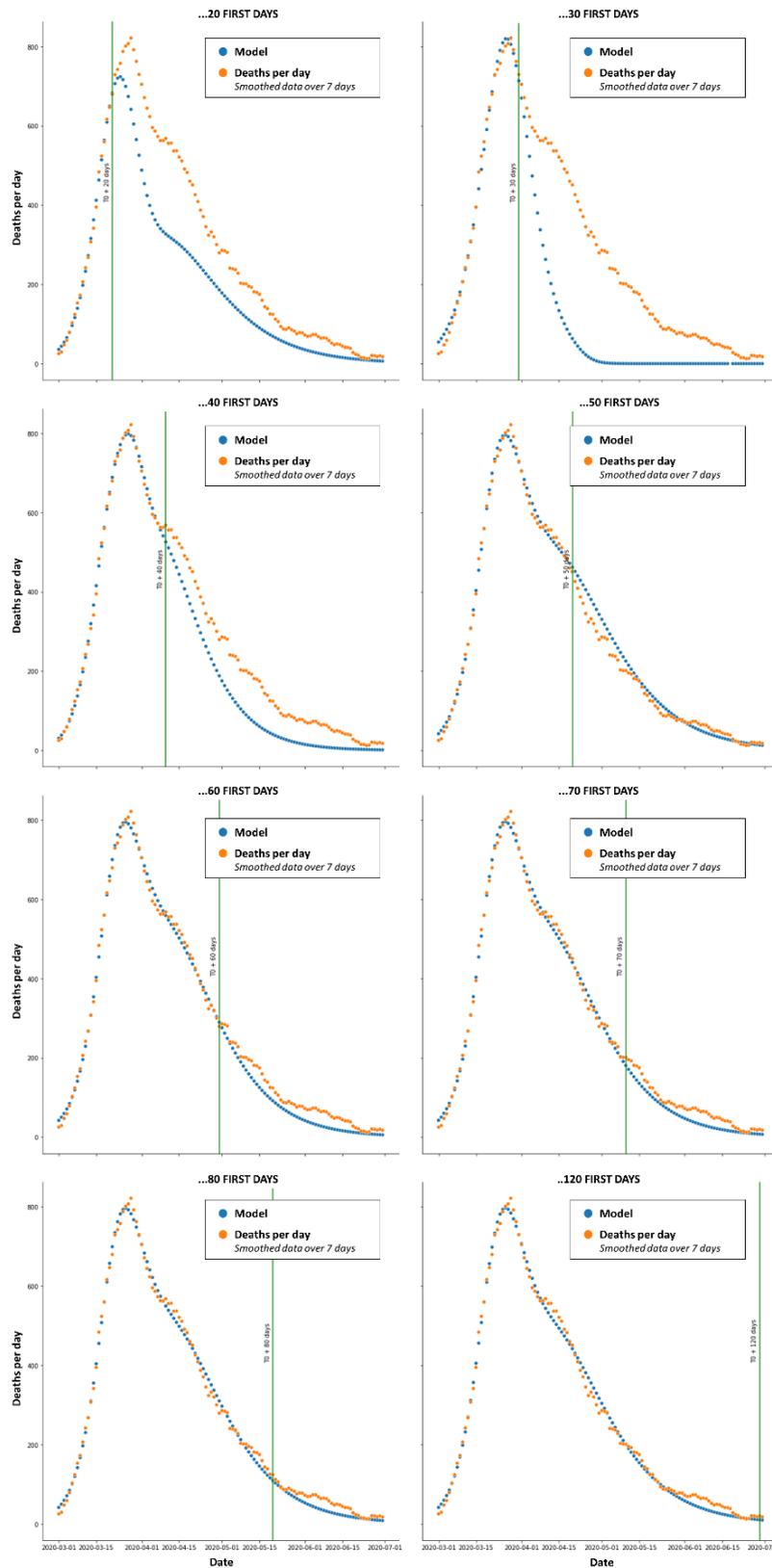


Figure 29 : Variation of the simulations of the deaths number in Italy, from March to July 2020. The orange dots represent the experimental data. Each graph uses the data given at the left of the green vertical line. Then the model simulates the whole duration of the epidemic time, before and after the green vertical line (Blue points)

MODEL SIMULATION FOR SPAIN USING ONLY THE DATA OF THE...

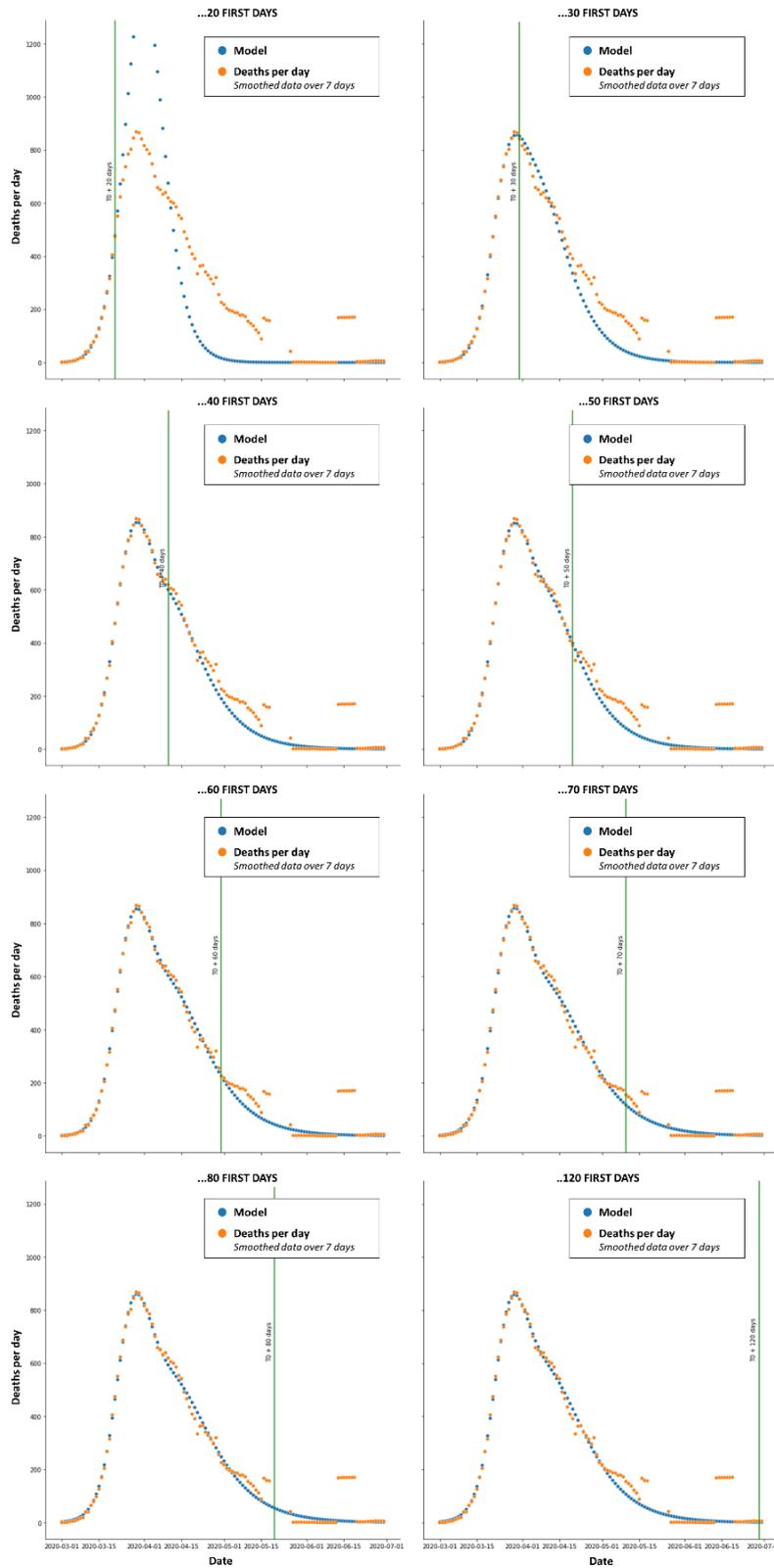


Figure 30 : Variation of the simulations of the deaths number in Spain, from March to July 2020. The orange dots represent the experimental data. Each graph uses the data given at the left of the green vertical line. Then the model simulates the whole duration of the epidemic time, before and after the green vertical line (Blue points)

MODEL SIMULATION FOR GERMANY USING ONLY THE DATA OF THE...

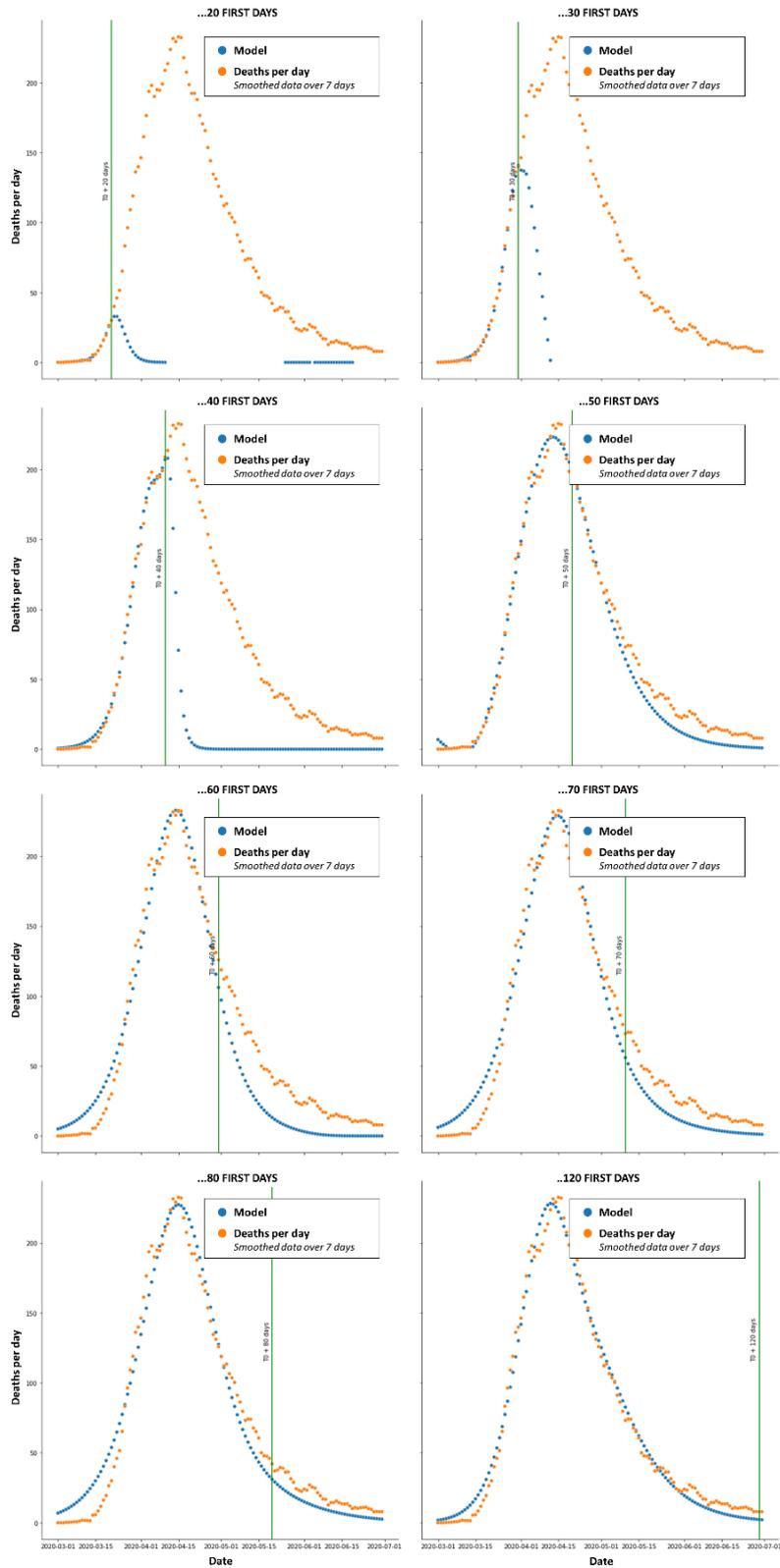


Figure 31 : Variation of the simulations of the deaths number in Germany, from March to July 2020. The orange dots represent the experimental data. Each graph uses the data given at the left of the green vertical line. Then the model simulates the whole duration of the epidemic time, before and after the green vertical line (Blue points)

MODEL SIMULATION FOR THE UK USING ONLY THE DATA OF THE...

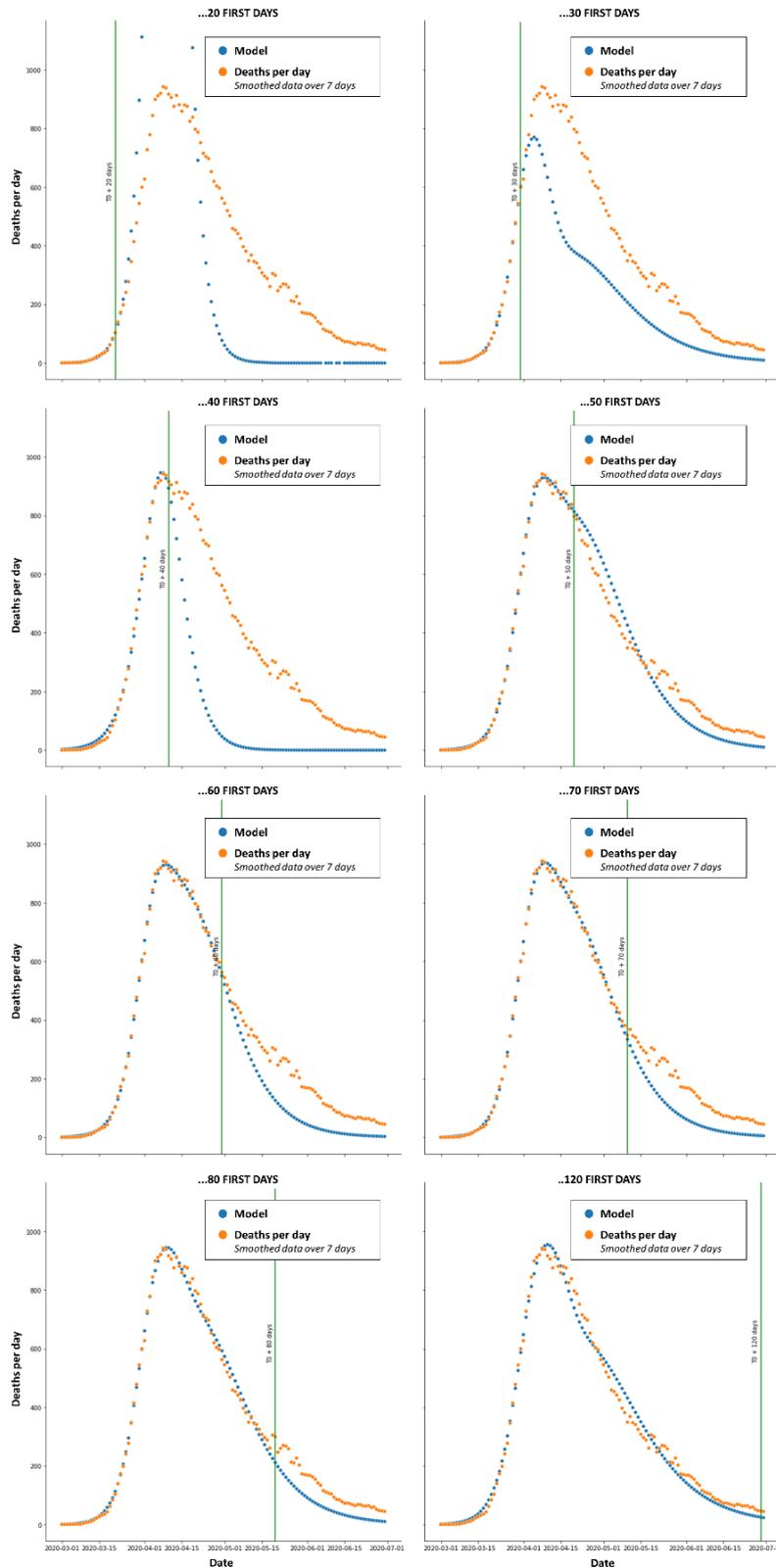


Figure 32 : Variation of the simulations of the deaths number in United Kingdom, from March to July 2020. The orange dots represent the experimental data. Each graph uses the data given at the left of the green vertical line. Then the model simulates the whole duration of the epidemic time, before and after the green vertical line (Blue points)

t0 + ...	20 days	30 days	40 days	50 days	60 days	70 days	80 days	90 days	100 days	110 days	120 days
Belgium	-52,04	-2499,81	0,48	0,95	0,98	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99
France	0,34	-0,13	0,77	0,96	0,97	0,97	0,98	0,98	0,98	0,98	0,98
Germany	-1,08	-1,76	0,04	0,98	0,93	0,96	0,97	0,99	0,99	0,99	0,99
Italy	0,36	0,08	0,67	0,99	0,99	0,99	0,99	1,00	1,00	1,00	1,00
Spain	0,59	0,65	0,94	0,94	0,94	0,94	0,94	0,94	0,94	0,94	0,94
UK	-3,19	0,60	0,30	0,97	0,94	0,96	0,98	0,99	0,99	0,99	0,99

Table 10 : Evolution of the values of R^2 for each country in function of the selected amount of data available for the model

5.3.3. Results in France when simulating the epidemic through age groups

We considered each age group as an independent epidemic and used the same process and simulation; main results are shown in Figure 43 for the modeling and Table 11 for the R^2 values for each age group.

The age group were defined by the data given by the French authority [28] and are the following :

0 to 9 years old, 10 to 19 years old, 20 to 29 years old, 30 to 39 years old, 40 to 49 years old, 50 to 59 years old, 60 to 69 years old, 70 to 79 years old, 80 to 89 years old, greater or equal to 90 years old.

Moreover, we compared the results of our simulation when summing the independent model of each age group and when using a model for the whole population. The reader can find those results in the Figure 44 for the modeling and in the Table 12 for R^2 values of each model.

MODEL SIMULATION OF 6 AGE CATEGORIES IN FRANCE WITH A SIGNIFICANT AMOUNT OF DEATHS

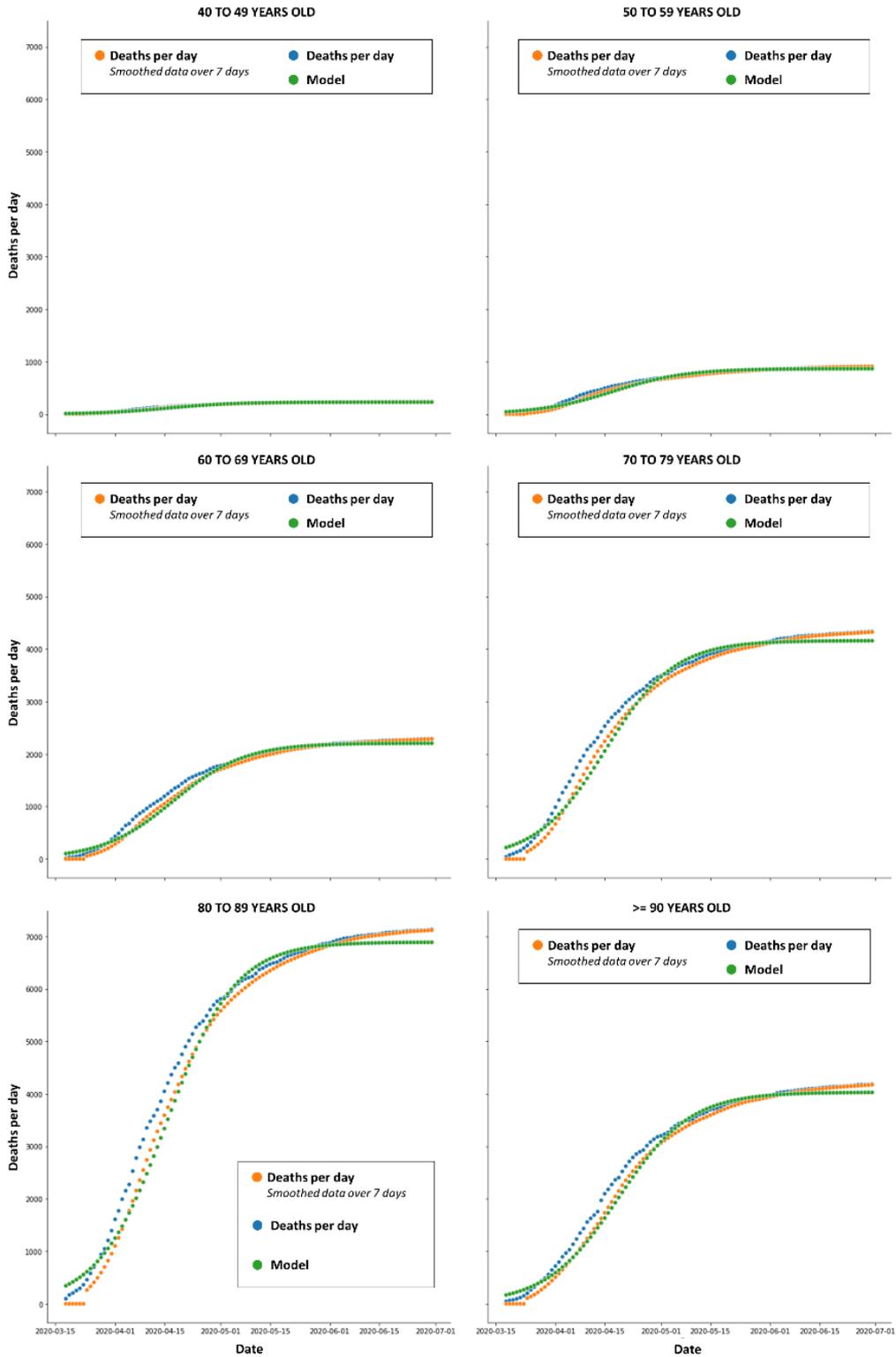


Figure 33 : Simulation of the death Numbers in France when considering each age group as an independent epidemic. The first graph concerns people between 40 and 49 years old because the number of deaths below 40 years is very low. Then we represent the death numbers among the range 50-59, 60-69, 70-79, 80-89 and above 90 years old.

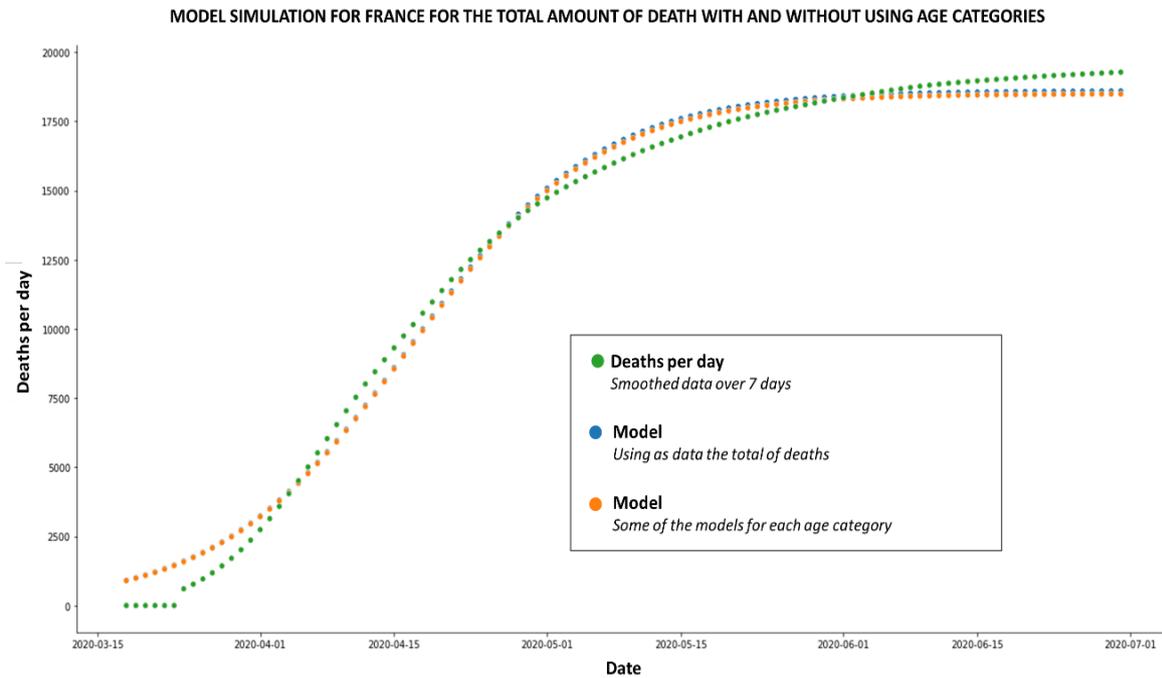


Figure 34 : Comparison of the death number in France. The blue curve represents the simulation when using as data the death Numbers in France. The orange curve represents the sum of the simulations of the death Numbers in France when considering each age group as an independent epidemic. The green curve represents the death Number in France (data smoothed over 7 days).

	0-9	10-19	20-29	30-39	40-49	50-59	60-69	70-79	80-89	>=90
R ²	0,99	0,95	0,98	0,98	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99

Table 11 : Comparison of the R² for each group category model. The R² values before 40 years are not significant because of the too low number of deaths.

	Model <i>Using as data the whole country</i>	Model <i>Some of the models for each age categories</i>
R ²	0,992117	0,992032

Table 12 : Comparison of the R² when using the some of the models for each age group or when considering the whole country

5.4. Discussion

A simple macroscopic modeling of the Covid-19 epidemic in 2020 is built with a combination of two basic logistic functions. It is based on the two phases of the epidemic: before and after

the first governments' health management policies such as lockdowns, and it is applied throughout those countries. It allows to correctly model the evolution of the number of deaths by the virus until the dates for which data are available (Table 1 showed that only 3 countries have a R^2 value strictly inferior to 0,90).

Those simulations show that the prediction of the model is to be taken with caution with this approach without a stronger knowledge of the epidemic and its parameter characteristic when limited data is available to do a strong prediction at the early stage of the epidemic. As it is, it takes between 40 and 50 days to have an accurate simulation (Table 2 showed that one country had its R^2 value reaching 0,94 after only 40 days when all the 6 countries had R^2 value reached at least 0,94 after 50 days).

It would therefore be interesting to study new waves of several similar epidemics throughout countries to determine some characteristic values of the parameters of the model depending on the virus, the country and the period of the year in order to improve the accuracy of the simulation at the early stage of an epidemic.

The simulation of the epidemic through age groups showed that the model worked well when considering each age group as an independent epidemic: valued of R^2 varied from 0,95 to 0,99 with all the age groups. The simulations of decades exhibiting a significant number of deaths have all R^2 values equal to 0,99 (Table 3). This tends to show that at this time in France, the spreading of the disease was mostly among people within the same age groups. When summing those results in order to simulate the overall French epidemic and comparing the results with the model using the total number of deaths for all group ages, the results showed that the two models are very close in values (Figure 10) and accuracy (Table 4). Those results tend to show that our model can therefore be seen as a combination of several epidemic throughout different populations where each have different behavior as was predicted in Part 1 of the paper [1].

5.5. Conclusion

We developed a simple virus-centric model of the first wave of the Covid-19 epidemic based on a decomposition of Verhulst functions adaptable to all countries and to all the characteristic criteria of its evolution. Using a simple machine learning process, we showed that only two basic elementary functions were sufficient to simulate with accuracy the epidemic evolution for 19 European countries during the first wave.

However the results also showed that a minimum of 40 to 50 days are required after the epidemic start to be predictive with good accuracy up to the end of the wave.

Future work should therefore focus on the following two points :

- other waves of the epidemic introducing more than 2 basic functions to check its capacity to simulate with good accuracy other kind of events (such as – for instance - new variants of the virus).

- new waves of several similar epidemic throughout countries to determine some characteristic values of the parameters of the model depending on the virus, the country and the period of the year in order to improve the accuracy of the simulation at the early stage of an epidemic.

Finally, the results showed that our model can be seen as a combination of several independent epidemic throughout different populations where each have different behavior as was predicted in Part 1 of the paper [1].

5.6. References

- [1] J. Rémond, Y. Rémond, A New Virus-centric Epidemic Modeling Approach, 1. General Theory and Machine Learning Simulation of 2020 SARS COV 2 (COVID-19) for Belgium, France, Italy and Spain, *Mathematics and Mechanics of Complex Systems*, 8, 3, pp. 233-247, 2020
- [2] T.L. Wiemken, R.R. Kelley, Machine learning in epidemiology and health outcomes research, *Annual Review of Public Health*, 41, pp.21-36, 2020
- [3] Lin Jia, Kewen Li, Yu Jiang, Xin Guo, Ting Zhao, Prediction and analysis of Coronavirus Disease 2019, 2020, arxiv.org/abs/2003.05447v2
- [4] D. Caccavo, Chinese and Italian COVID-19 outbreaks can be correctly described by a modified SIRD model, 2020, medrxiv.org/content/10.1101/2020.03.19.20039388v2
- [5] B. Zeng, M. Tong, X. Ma, A new-structure grey Verhulst model: Development and performance comparison, *Applied Mathematical Modelling*, 81, pp.522-537, 2020
- [6] L. K. J. Vandamme, P. R. F. Rocha, Analysis and Simulation of Epidemic COVID-19 Curves with the Verhulst Model Applied to Statistical Inhomogeneous Age Groups, *Appl. Sci.*, 11, 9, 4159, 2021
- [7] L. K. J. Vandamme, I. H. J. T. de Hingh, J. Fonseca, P. R. F. Rocha, Similarities between pandemics and cancer in growth and risk models, *Scientific Reports*, 11, Article number: 349, 2021
- [8] M. Batista, Estimation of the final size of the second phase of the coronavirus COVID 19 epidemics by the logistic model, *MedRxiv*, March 2020, doi: 10.1101/2020.03.11.20024901
- [9] P. Wang, X. Zheng, J. L., B. Zhu, Prediction of epidemic trends in COVID-19 with logistic model and machine learning technics, *Chaos, Solitons & Fractals*, 139, 110058, 2020
- [10] Y.-F. Zhao, M.-H. Shou, Z.-X. Wang, Prediction of the Number of Patients Infected with COVID-19 Based on Rolling Grey Verhulst Models, *Int. J. Environ. Res. Public Health*, 17, 12, 4582, 2020

- [11] J. Demongeot, Q. Griette, P. Magal, SI epidemic model applied to COVID-19 data in mainland China, Royal Society Open Science, Published: 02 December 2020, [doi: 10.1098/rsos.201878](https://doi.org/10.1098/rsos.201878)
- [12] F. Louchet, A Brief Theory of Epidemic Kinetics, *Biology* 9, 6, 134, 2020
- [13] A. Abusam, R. Abusam, B. Al-Anzi, Adequacy of Logistic models for describing the dynamics of COVID-19 pandemic, *Infectious Disease Modelling*, 5, pp.536-542, 2020
- [14] G.L. Vasconcelos, L.P. Cordeiro, G.C. Duarte-Filho, A.A. Brum, Modeling the Epidemic Growth of Preprints on COVID-19 and SARS-CoV-2, *Front. Phys. Brief Research Report* article, 23 March 2021, [doi: 10.3389/fphy.2021.603502](https://doi.org/10.3389/fphy.2021.603502)
- [15] C. Mahanty, R. Kumar, B.K. Mishra, D.J. Hemanth, D. Gupta, A. Khanna, Prediction of COVID-19 active cases using exponential and non-linear growth model, *Expert Systems*, 2020, doi: 10.1111/exsy.12648
- [16] P-F. Verhulst, Notice sur la loi que la population poursuit dans son accroissement, *Correspondance mathématique et physique*, 10, pp.113-121, 1838
- [17] S.G. Mahiane et al., Improvements in Spectrum's fit to program data tool, *AIDS*, 31 (Suppl 1), pp.S23-S30, 2017
- [18] D.J. Daley, J. Gani, *Epidemic Modelling*, Cambridge University Press, 1999, ISBN 0 521 01467-0
- [19] D. Moulay, Modélisation et analyse mathématique de systèmes dynamiques en épidémiologie. Application au cas du Chikungunya, Thèse de doctorat de l'université du Havre (in french), 26 november 2011, tel.archives-ouvertes.fr/tel-00633827
- [20] L.D. Roper, Depletion of nonrenewable resources, *American Journal of Physics*, 47, 467, 1979
- [21] G. Allaire, *Shape optimization by the homogenization method*, Springer Verlag, New York, 2001
- [22] O. Oleinik, A. Shamaev, G. Yosifian, *Mathematical Problems in Elasticity and Homogenization Studies in Mathematics and its Application*, 26, Elsevier, Amsterdam, 1992
- [23] E. Sanchez-Palencia, *Non-Homogeneous Media and Vibration Theory*, Springer, Heidelberg, 1980
- [24] Y. Rémond, S. Ahzi, M. Baniassadi, H. Garmestani, *Applied RVE Reconstruction of Heterogeneous Materials*, Wiley-ISTE Ed., 2016
- [25] M. Baniassadi, M. Baghani, Y. Rémond, *Applied micromechanics of complex microstructures, computational modeling and numerical characterization*, ISBN-10: 0443189919, Elsevier, March 2023
- [26] F. Chinesta, E. Cueto, *PGD-Based Modeling of Materials, Structures and Processes*, ESAform Bookseries on Materials Forming, Springer, 2014

- [27] A. Ammar, B. Mokdad, F. Chinesta, R. Keunings, A New Family of Solvers for Some Classes of Multidimensional Partial Differential Equations Encountered in Kinetic Theory Modeling of Complex Fluids, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 139, 3, pp. 153-176, 2006
- [28] A. Ammar, B. Mokdad, F. Chinesta, R. Keunings, A New Family of Solvers for Some Classes of Multidimensional Partial Differential Equations Encountered in Kinetic Theory Modeling of Complex Fluids, Part II: Transient simulation using space-time separated representations, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 144, (2-3), pp. 98-121, 2007
- [29] D.W. Marquardt, An algorithm for least-squares estimation of non-linear parameters, *SIAM J. Appl. Math.*, 11, pp.431-441, 1963
- [30] ECDC, European Center for Disease and Control, European Union, January 2022 ; <https://www.ecdc.europa.eu/en>
- [31] Données hospitalières relatives à l'épidémie de COVID-19, République française, septembre 2021 : <https://www.data.gouv.fr/fr/datasets/donnees-hospitalieres-relatives-a-lepidemie-de-covid-19/>

6. Analyse des résultats et commentaires

Dans cette partie, nous avons souhaité prendre du recul, analyser plus en profondeur les deux articles publiés et revenir sur la méthode et les résultats dans le cadre de son application à une épidémie, au travers notamment de quatre points :

- Repositionner les articles dans la démarche générale de la thèse
- Discuter des résultats obtenus et des perspectives concernant :
 - La précision
 - Pour rappel, on nomme ici précision du modèle, le R^2 obtenu entre le modèle et les données lorsqu'on réalise un ajustement des paramètres du modèle par rapport à l'ensemble des données disponibles à l'époque.
 - La prédictibilité
 - Pour rappel, on nomme ici prédictibilité du modèle, le R^2 obtenu entre le modèle et les données lorsqu'on réalise un ajustement des paramètres du modèle avec un ensemble de données non exhaustif et qu'on compare le modèle obtenu avec l'ensemble des données disponibles. La prédictibilité peut être calculée rétrospectivement.
 - Il s'agit typiquement de réaliser un ajustement des paramètres du modèle avec un nombre i de données et de calculer le R^2 entre le modèle obtenu et les n données disponibles (avec $n > i$).
 - Le changement d'échelle
 - Pour rappel, on nomme ici changement d'échelle, la capacité du modèle à conserver sa précision et sa prédictibilité en passant pour une population donnée à des sous-ensembles de cette même population.
 - Il s'agit ici typiquement de passer par exemple de la population française dans son ensemble à des sous-ensembles définis par classe d'âge ou par répartition géographique (département, région...). Ce changement d'échelle peut aussi bien s'appliquer à des classes d'âge, à des répartitions géographiques, à des types de population (malades, etc.) ou encore à des catégories de comportement, tant que ceux-ci restent exclusifs les uns des autres.
 - La validité des hypothèses prises dans cette modélisation et la modélisation des vagues épidémiques successives
- Enfin comparer les résultats du modèle proposé avec le modèle SIR et ses dérivés, modèle le plus utilisé par la communauté de mathématique appliquée, rappelons que notre objectif est plus large que cela.

6.1. Positionnement des articles publiés en épidémiologie dans la démarche générale de la thèse

Comme je l'ai dit précédemment, cette thèse part du constat, notamment avec l'essor du *machine learning* et du *deep learning*, qu'un grand nombre de structures de recherche

disposent aujourd'hui de modèles numériques très sophistiqués qui réussissent avec plus ou moins de précision, à décrire les événements que l'on cherche à simuler. Toutefois, ces démarches souffrent souvent d'un mal très courant : la sophistication du modèle est inversement proportionnelle à notre compréhension du phénomène, or une modélisation n'est jamais que la mise en équation de notre compréhension de ce dernier.

Il existe toujours un risque que notre manque de compréhension d'un phénomène conduise à une augmentation du nombre de variables du modèle à ajuster.

Aussi, une ascèse intellectuelle serait de prendre à rebours ces tentations et de revenir à des modèles simples, construits uniquement sur notre compréhension et non sur la volonté de construire un modèle qui corresponde parfaitement à une réalité déjà connue.

L'épidémiologie et surtout les vagues épidémiques de la COVID 19 nous ont offert un cadre propice à cette expérimentation : le phénomène dispose d'une immense quantité de données et de variables et il est difficile de réaliser des prédictions fiables, sur le court comme sur le long terme, surtout aux débuts de l'épidémie où les informations académiques étaient éparpillées et peu nombreuses.

L'exemple nous semblait parfait car in fine, les chercheurs se sont vite retrouvés en difficulté pour prédire l'évolution de l'épidémie, et parfois pour l'admettre, malgré l'utilisation de modèles numériques d'une grande complexité reposant moins sur sa compréhension et sur les informations réellement accessibles au démarrage d'une vague épidémique que sur une reconstitution a posteriori des phénomènes observés.

Aussi, nous avons souhaité construire un modèle simple, interprétable se fondant sur des fonctions élémentaires, celles de Verhulst, en utilisant notre compréhension des phénomènes macroscopiques qui sous-tendent des hypothèses structurantes.

Ainsi nous avons créé un modèle multiéchelle simple en faisant l'hypothèse que nous avons deux phénomènes concurrents lors de la première vague :

- Une épidémie correspondant à une dynamique de pré-confinement (ou mesures de restrictions épidémiques équivalentes)
- Une épidémie correspondant à une dynamique post-confinement (ou mesures de restrictions épidémiques équivalentes)

On pourrait considérer que ces hypothèses sont simplifiées et que les évolutions des comportements évoluent de façon continue au cours du temps. On pourrait également rentrer dans les détails, les confinements sont certainement plus efficaces dans les zones très peuplées que dans les campagnes où les risques de rencontres avec une personne infectée sont bien plus faibles. Tout cela est exact. Cependant, nous avons fait l'hypothèse que les principales caractéristiques des comportements pré et post confinement étaient au premier ordre, suffisant pour les prendre en compte, de plus nous souhaitons rester dans une approche macroscopique malgré son côté multiéchelle.

En outre, lors des premières modélisations et au vu des résultats obtenus, nous avons émis l'hypothèse qu'une épidémie pouvait être décomposée en une somme d'épidémies

élémentaires dont les variables à considérer dépendaient de notre compréhension du phénomène (i.e. ici du changement d'échelle).

Nous avons ainsi publié un second papier ou l'objectif était :

- de valider la robustesse du modèle en considérant les données (passage du nombre de cas pour l'article 1, dont l'évaluation est toujours critiquable, à l'évaluation du nombre de décès, qui sans être parfaite, est beaucoup plus robuste) et en l'appliquant à un grand nombre de pays
- d'observer son caractère prédictif à court terme
- de regarder le changement d'échelle au travers d'une variable, ici les classes d'âge des personnes décédées

Toutefois, deux questions sont restées en suspens :

- Comment modéliser plusieurs vagues épidémiques ? Le peut-on ?
- Que vaut notre modèle par rapport au modèle SIR (et ses dérivées) ?

Nous tenterons d'aborder ces deux points dans le paragraphe suivant.

6.2. Discussion autour des résultats obtenus et des perspectives

6.2.1. La précision du modèle

Pour rappel, on nomme ici précision du modèle, le R^2 obtenu entre le modèle et les données lorsqu'on réalise un ajustement des paramètres du modèle par rapport à l'ensemble des données disponibles à l'époque.

La première partie de notre article avait laissé présager des perspectives de prédictibilité de l'épidémie relativement prometteuses. Nous avons en effet d'abord modélisé l'épidémie de ses débuts en février 2020 jusqu'au 18 avril 2020 pour les données lissées, date correspondante à la fin des données disponibles mises à disposition par les instances publiques, pour la première partie de nos travaux.

Pour compléter notre étude, nous avons alors repris nos travaux pour comparer la simulation du modèle généré à partir des données précédant le 18 avril 2020 avec les données disponibles alors jusqu'au 30 avril 2020. Les résultats étaient intéressants avec des R^2 variant de 0,986 pour la France à 0,996 pour l'Italie.

Toutefois, un premier regret est arrivé car nous n'avions pas comparé les R^2 du modèle sur la fonction de Verhulst elle-même qui décrit le stock cumulé de personnes contaminées mais sur sa dérivée qui donne le flux journalier. Il est probable que les résultats auraient été semblables, mais les données ont été corrigées en continue, les données initiales n'ont plus été disponibles et il est difficile de le faire après coup (cf. notre paragraphe « 3.3- *Results in France when simulating the epidemic through age groups* » de la seconde partie de notre article où nous observons les R^2 pour la fonction de Verhulst elle-même mais sans considérer

le flux). Toutefois, on peut noter que les sources européennes et les sources nationales françaises ne donnaient pas systématiquement le décompte du flux et du stock pour le même phénomène, rendant toute analyse comparative rigoureuse difficile. C'est encore le cas actuellement.

Le modèle, en revanche, a plutôt bien composé avec la qualité hétérogène des données, chose inévitable dans une entreprise humaine ou les méthodes de décompte de patients ont varié non seulement dans l'espace mais aussi dans le temps.

Ainsi dans le second article, sur les 22 pays pour lesquels nous avons modélisé l'épidémie, voici la répartition des R^2 obtenus :

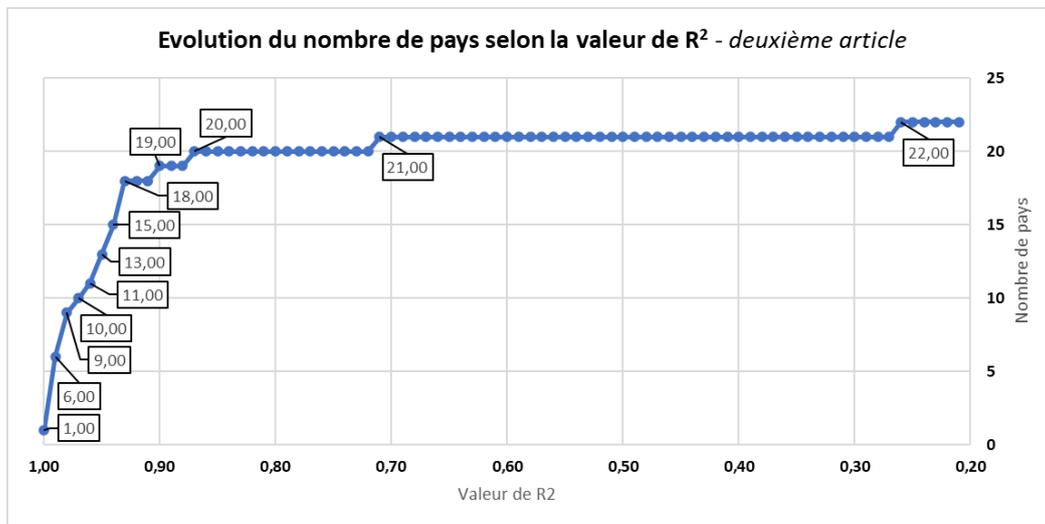


Figure 35 : Evolution du nombre de pays selon la valeur de R^2 pour les 22 pays modélisés dans le second article – pour une valeur de R^2 variant de 0,26 à 1,00

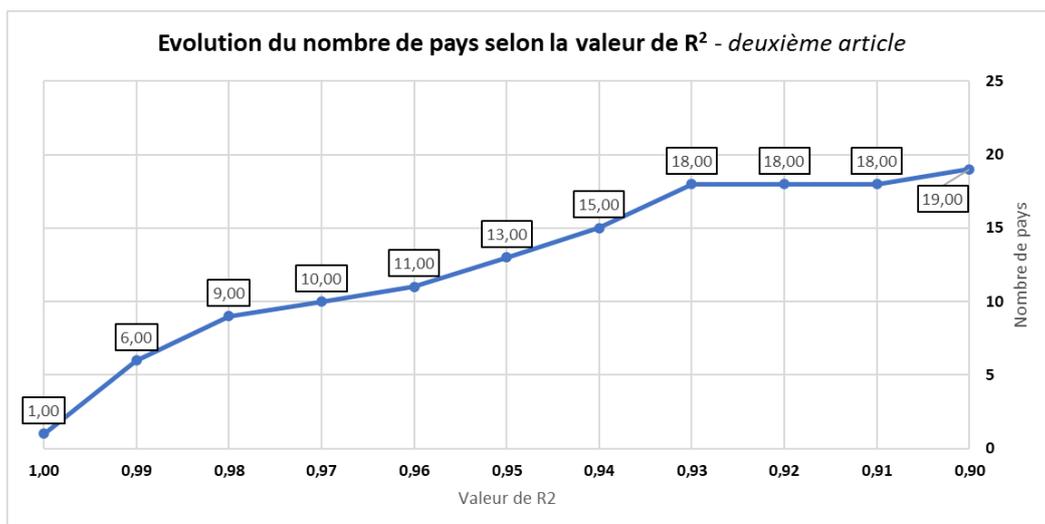


Figure 36 : Evolution du nombre de pays selon la valeur de R^2 pour les 22 pays modélisés dans le second article – pour une valeur de R^2 variant de 0,90 à 1,00

On voit clairement sur la Figure 45 que 19 pays ont été modélisés avec un R^2 supérieur ou égal à 0,90. Trois ont ainsi obtenu un R^2 strictement inférieur à 0,90 : la Finlande (0,87), la Roumanie (0,71) et le Kosovo (0,26). Concernant la Roumanie, les données ont une répartition étonnante et semblent de qualité hétérogène, le Kosovo lui a un nombre de cas extrêmement faible, rendant difficile toute modélisation.

Par ailleurs, on peut voir sur la Figure 46 que 18 pays, soit plus de 80%, ont une modélisation avec un R^2 supérieur ou égal à 0,93. 50% des pays ont même un R^2 supérieur ou égal à 0,96.

6.2.2. La prédictibilité

Pour rappel, on nomme ici prédictibilité du modèle, le R^2 obtenu entre le modèle et les données lorsqu'on réalise un ajustement des paramètres du modèle avec un ensemble de données non exhaustif et qu'on compare le modèle obtenu avec l'ensemble des données disponibles. La prédictibilité peut être calculée rétrospectivement. Il s'agit typiquement de réaliser un ajustement des paramètres du modèle avec un nombre i de données et de calculer le R^2 entre le modèle obtenu et les n données disponibles (avec $n > i$).

Suite à la première partie de notre article et à nos résultats encourageants sur la prédictibilité du modèle, nous avons voulu dans le second papier réaliser un test de prédictibilité du modèle. Nous avons choisi 6 pays, dont les 4 pays que nous avons étudiés dans notre première partie (Belgique, France, Italie, Espagne) en y ajoutant l'Allemagne et le Royaume-Uni. Nous avons pu constater qu'il fallait entre 40 et 50 jours à partir du démarrage de l'épidémie, en entrée, pour obtenir un modèle à la prédictibilité satisfaisante, sur une épidémie qui a duré environ 120 jours, mais dont le délai de changement macroscopique de comportement (arrivée du confinement) est de deux à trois semaines environ, parfois davantage. Nous sommes donc en présence d'un apprentissage de 4 à 6 semaines avant d'obtenir une prédictibilité satisfaisante, c'est-à-dire pour obtenir un R^2 supérieur ou égal à 0,90.

Le résultat est un peu décevant mais n'est en réalité guère surprenant, afin d'obtenir mieux, il faudrait étudier davantage la COVID 19 et plus généralement, des maladies infectieuses proches sur des vagues épidémiques révolues pour essayer de déterminer des valeurs attendues des paramètres pour les différents phénomènes afin d'éviter des modèles aberrants, comme lors des simulations avec moins de 40 jours. Il serait plus généralement intéressant de travailler avec des spécialistes des maladies infectieuses et des épidémies afin d'obtenir une interprétation spécifique des variables du modèle et mieux évaluer ses possibilités. Mais une autre interprétation peut également se faire. On peut en effet conclure qu'il a fallu attendre 40 à 50 jours avant que les politiques publiques, comme les comportements individuels et collectifs, se stabilisent afin de devenir au minimum prévisibles. En effet, au-delà du confinement, la variabilité observée est également une conséquence de ces modifications continues de comportement.

Par ailleurs, une analyse de prédictibilité et robustesse plus poussée du modèle pourrait être réalisée en ne lui fournissant plus des jeux de données linéaires (i.e. des jours consécutifs) et en ajoutant du bruit aux données fournies.

6.2.3. Le changement d'échelle

Pour rappel, on nomme ici changement d'échelle la capacité du modèle à conserver sa précision et sa prédictibilité en passant, pour une population donnée, à des sous-ensembles de cette même population. Il s'agit ici typiquement de passer par exemple de la population française dans son ensemble à des sous-ensembles définis par classe d'âge exprimée en déciles ou par répartition géographique (département, région...).

Pour le changement d'échelles, nous avons choisi de le réaliser pour la France au travers des classes d'âges, cela nous a semblé être pertinent pour une vague épidémique qui a beaucoup vu les générations restreindre leurs interactions entre elles. Les consignes gouvernementales ont en effet souvent demandé des comportements spécifiques à certaines classes d'âge : ouverture ou fermeture de classes pour les plus jeunes, port du masque conseillé puis obligatoire en fonction de disponibilités de ces outils, mais aussi dépendant de l'âge, fermeture puis confinement complet des EHPADS en France, etc.

Les résultats sont très encourageants puisque la qualité de la prédiction est indiscernable du modèle de base. On veut dire par là que le modèle de la somme est très proche de la somme des modèles au prorata des quantités respectives de chaque catégorie.

Il serait intéressant aujourd'hui de poursuivre cette démarche et de coupler l'âge à une échelle géographique plus réduite, les déplacements ayant été particulièrement peu répandus à ce moment-là. De plus, il serait souhaitable d'observer si ce passage à l'échelle est toujours viable dans les vagues épidémiques suivantes.

6.2.4. Validité des hypothèses et modélisation des vagues épidémiques successives

Un des reproches que l'on pourrait nous faire est d'avoir concentré nos efforts uniquement sur la première vague de COVID 19 en Europe sans tentative de modéliser les vagues suivantes. Il est vrai que nous avons voulu véritablement tester et exploiter le modèle sur un phénomène réel pour montrer sa pertinence d'ensemble et non prendre la place des épidémiologistes. Cependant, ce modèle conçu et identifié pour la première vague de COVID-19 pourrait très bien être adapté pour prédire les vagues successives. Toutefois, dans un phénomène aussi complexe, il est peu probable que les caractéristiques et variables identifiées soient reproductibles simplement, les principaux arguments sont les suivants :

- Les vagues successives correspondent à des évolutions permanentes et continues du virus, des comportements de la population et des populations à risque
- Les variants qui se sont développés ont modifié en permanence la dangerosité du virus et sa contagiosité, ils pouvaient d'ailleurs être présents en même temps sur le même territoire

- Les comportements des personnes ont été profondément modifié au cours du temps sans que l'on puisse les réduire à un pré/post confinement.
- Les personnes à risque ont été progressivement identifiées et la réaction de la médecine hospitalière s'est progressivement organisée.
- De très nombreuses catégories sont progressivement apparues, les personnes vaccinées, avec des doses de rappel variables, des vaccins différents, des personnes infectées guéries et réinfectées, etc.

Tous ces événements ont modifié les valeurs des paramètres que nous avons utilisés. Aussi est-il important de rappeler que c'est davantage la méthodologie qui nous a intéressé dans cet exemple, par un test grandeur nature, que la modélisation de l'épidémie elle-même.

Pour aller dans le sens d'une modélisation plus complète, il serait alors possible d'ajouter des fonctions de Verhulst supplémentaires, adaptées à chacun de ces événements ou populations, et réfléchir à d'éventuelles nouvelles fonctions de transition selon les cas.

On pourrait très bien imaginer automatiser ce procédé et créer un modèle logistique généralisé qui s'adapte dynamiquement en fonction des données disponibles.

Concernant les hypothèses que nous avons prises, à savoir :

- Existence de deux épidémies concurrentes (pré et post confinement)
- Mise à l'échelle possible du modèle au travers d'une analyse par tranches d'âge

Les résultats obtenus en confirment la validité et semblent mêmes indiquer qu'il s'agissait d'hypothèses réalistes.

6.3. Comparaison de nos résultats avec ceux d'un modèle SIR

Le modèle SIR (et ses dérivées SIS, SEIR, SEIRS, SEIRS...), malgré sa sophistication, n'a pas particulièrement permis de prédire les vagues épidémiques [12] et de très nombreux travaux ont été entrepris depuis pour évaluer ses limites et essayer de l'adapter [6-8], certains ont même tenté une approche hybride entre des modèles de type SIR et des modèles logistiques [9] sans que la démarche ne soit réellement convaincante.

Le modèle SIR / SEIR de base possède des limites évidentes, contournables évidemment, mais qu'il est toujours bon de rappeler :

- Le modèle ne gère qu'une seule vague épidémique qui finit toujours par s'éteindre [10]
- Le modèle considère la population comme étant un ensemble fixe, en vase clos, la notion de population totale est un des piliers de la méthode SEIR [6], [12]. Il en résulte :
 - Une incapacité à modéliser les échanges entre populations [6]

- Le cas des réinfections à cause d'une perte d'immunité ou d'une immunité réduite n'est pas pris en compte et n'est pas simple à intégrer [12]
- Certains phénomènes modélisés ne sont pas mesurables (e.g. : la population des exposés)

Toutefois, ce modèle dispose aussi d'atouts non négligeables :

- La capacité à modéliser plusieurs phénomènes et à les lier entre eux (nombre de personnes susceptibles, infectées, retirées (voir chapitre II, paragraphe II.2.1 et II.2.2)
- Le volume de littérature existante
- Il est paradoxalement relativement simple à enrichir, sans même parler de variabiliser des constantes, puisqu'on raisonne ici sur des stades supposés d'avancement de l'état du patient et des groupes de populations liés. Il suffit alors d'ajouter des stades d'évolution pour rendre le modèle de plus en plus complexe.

En miroir, notre modèle appliqué à cette épidémie possède des avantages certains :

- Les réinfections ne sont à priori pas un problème
- Il est capable de modéliser facilement des changements de comportements de populations
- Il n'émet pas d'hypothèses sur le bassin de population à considérer

Mais aussi d'indéniables faiblesses :

- Il modélise un phénomène à la fois et ne lie pas les différents phénomènes entre eux (nombre d'infectés, d'hospitalisation, de morts...)
- Le modèle ne pourra gérer qu'un nombre fini de vagues épidémiques et nécessite de faire des hypothèses sur les changements de populations

On pourrait dire que notre modèle, contrairement au modèle SIR, se concentre moins sur les caractéristiques de la maladie que sur les dynamiques de population, il faudrait cependant poursuivre nos travaux avec des spécialistes des maladies infectieuses pour réellement confirmer une telle affirmation.

In fine, l'obtention de résultats fiables et précis après 40 à 50 jours d'un cycle épidémique (indépendamment des changements de comportements qui arrivent après 2 à 3 semaines), sans faire d'autres hypothèses sur l'épidémie en question semble être un résultat véritablement intéressant au regard de la littérature qui prend souvent des plages de données bien plus conséquentes [6][7][9][12].

Toutefois, il faudrait que nous réalisions nous même une simulation avec le modèle SIR en utilisant les mêmes jeux de données et la même méthode que pour nos précédents articles afin de pouvoir véritablement faire une comparaison chiffrée et pertinente. Étonnamment, assez peu de papiers semblent faire une démarche d'évaluation des prédictions faites alors avec les données disponibles.

6.4. Bibliographie

(ces références ne concernent pas celles qui sont incluses dans les deux articles)

- [1] I. Goodfellow, Y. Bengio, A. Courville, Deep Learning, MIT Press, <http://www.deeplearningbook.org>, 2016
- [2] S. Touzeau, Modèles épidémiologiques, AgroParisTech (cours au format PDF), 2010
- [3] C. Bayette, avec la participation de M. Monticelli pour les simulations, Modélisation d'une épidémie, partie 1, Images des Mathématiques, CNRS, 2021
- [4] H. Weiss, The SIR model and the Foundations of Public Health, MATerials MATemàtics, Publicació electrònica de divulgació del Departament de Matemàtiques de la Universitat Autònoma de Barcelona, 2013
- [5] C. Bayette, avec la participation de M. Monticelli pour les simulations, Modélisation d'une épidémie, partie 2, Images des Mathématiques, CNRS, 2021
- [6] S. Moein, N. Nickaeen, A. Roointan, N. Borhani, Z. Heidary, S.H. Javanmard, J. Ghaisari, Y. Gheisari, N. Borhani, Inefficiency of SIR models in forecasting COVID-19 epidemic: a case study of Isfahan. Sci Rep 11, 4725, 2021
- [7] Vega, R.; Flores, L.; Greiner, R. SIMLR: Machine Learning inside the SIR Model for COVID-19 Forecasting. Forecasting 2022, 4, pp.72-94. <https://doi.org/10.3390/forecast4010005>
- [8] Cooper I, Mondal A, Antonopoulos CG. A SIR model assumption for the spread of COVID-19 in different communities. Chaos Solitons Fractals, 139, 110057, 2020. doi: 10.1016/j.chaos.2020.110057. Epub 2020 Jun 28. PMID: 32834610; PMCID: PMC7321055
- [9] Nawaz SA, Li J, Bhatti UA, Bazai SU, Zafar A, Bhatti MA, et al. (2021) A hybrid approach to forecast the COVID-19 epidemic trend. PLoS ONE, 16, 10, e0256971, 2021 <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0256971>
- [10] Howard Weiss, The SIR model and the Foundations of Public Health, MATerials MATemàtics, Publicació electrònica de divulgació del Departament de Matemàtiques de la Universitat Autònoma de Barcelona, 2013
- [11] Suzanne Touzeau, Modèles épidémiologiques, AgroParisTech (cours au format PDF), 2010
- [12] Roda, W. C., Varughese, M. B., Han, D. & Li, M. Y. Why is it difficult to accurately predict the COVID-19 epidemic?. Infect. Dis. Model., 5, pp.271–281, 2020 <https://doi.org/10.1016/j.idm.2020.03.001>

CHAPITRE IV

-

APPLICATION DE LA THEORIE DE VERHULST GENERALISEE A L'ESSAI DE FRAGMENTATION DES FIBRES

Sommaire

1. Introduction

2. L'essai de fragmentation
 - 2.1. Description précise de l'essai

 - 2.2. Résultats classiques des essais de fragmentation

 - 2.3. Modélisation classique de l'essai de fragmentation
 - 2.3.1. Modèle de Cox
 - 2.3.2. Modèle de Kelly et Tyson
 - 2.3.3. Autres travaux sur la fragmentation multiple d'un mono-filament
 - 2.3.4. Conclusion sur l'analyse mécanique de l'essai de fragmentation

3. Modélisation de l'évolution du nombre de fragments
 - 3.1. L'approche statistique de Weibull

 - 3.2. Etat de l'art sur cette modélisation

 - 3.3. Nouvelle modélisation par loi logistique

 - 3.4. Résultats du modèle

4. Développements possibles à l'échelle du composite

5. Conclusion

6. Bibliographie

RESUME DU CHAPITRE IV - MODELISER LES SYSTEMES COMPLEXES

Dans ce quatrième chapitre, nous proposons une autre utilisation de notre modèle en vue de la construction d'une loi physique, accompagnée d'une nouvelle compréhension d'un phénomène complexe en mécanique des matériaux, ici la fragmentation d'un mono-filament par l'intermédiaire d'une loi logistique.

L'essai de fracturation consiste à exercer une traction sur un ensemble constitué d'un mono filament inséré dans une matrice et il est bien connu. Les phénomènes physiques qui l'accompagnent ont été étudiés en détail et plusieurs modèles permettent, depuis les années 60, de comprendre et d'interpréter les résultats d'essais. Ils mettent en évidence notamment la longueur critique des fibres l_c comme étant un paramètre important de l'adhésion entre la fibre et la matrice, et permettent également de caractériser la contrainte de cisaillement maximale à l'interface. Ce dernier paramètre est fondamental dans toute utilisation de matériaux composites car il pilote le transfert de charge vers les fibres.

Avec une analyse détaillée des processus mis en jeu, nous montrons que le raisonnement initial de Verhulst peut être utilisé ici à condition d'identifier correctement les variables favorisant la fragmentation de la fibre ou au contraire la réduisant. Ces fonctions de contrôle, inhérent à notre modélisation, sont alors construites avec des variables physiques explicites. Nous en déduisons une nouvelle équation différentielle dont la solution est présentée et qui décrit très bien le cumul du nombre de fragments en fonction de la déformation dans le composite. Auparavant, cette courbe n'était approchée que par une loi dont les paramètres n'avaient pas de signification physique ou par une approche de Weibull. La solution obtenue constitue une nouvelle approche de la fragmentation, elle est simple et ajoute un nouveau moyen d'identification pour obtenir la contrainte de cisaillement critique de l'interface entre les fibres et la matrice.

On présente enfin différentes applications de notre modélisation pour des essais de fragmentation variés de la littérature, des fibres classiques jusqu'à des fibres dont la surface est architecturée par nanofils de ZnO, ce qui modifie fortement les contraintes de cisaillement critiques.

Ainsi, les principaux résultats de notre modélisation sont ici : au niveau local, la mise en place d'une équation différentielle avec des variables physiques explicites et son intégration pour identifier les essais de fragmentation. Au niveau global, nous proposons de reconsidérer les approches d'endommagement des composites grâce à ces approches de ce type.

1. Introduction

On a vu dans la première partie de cette thèse l'intérêt que pouvait présenter une décomposition d'un phénomène complexe en somme finie de modélisations élémentaires continues, décrivant des phénomènes discrets, eux-mêmes caractérisés par des lois logistiques représentées par des équations de Verhulst. Nous développerons ici principalement la partie du discret au continu dans le cadre de l'essai de fragmentation. L'étape suivante serait le passage à l'endommagement du composite. Cette approche simplifiée donnait des résultats tout à fait intéressants dans le cas de l'analyse du développement d'une épidémie décrit dans la partie précédente. On va maintenant étudier une situation de systèmes complexes en mécanique des matériaux, situation susceptible d'être modélisée de la même façon.

En effet, de nombreuses situations de physiques macroscopiques peuvent être approchées par des modélisations telles que celle que nous proposons. Il s'agit en particulier des cas où un phénomène macroscopique est induit par une série d'événements discrets bien identifiés. La rupture macroscopique d'un objet peut être concernée comme dérivant de cette situation, surtout lorsque la cause initiale est localisée de façon certaine. On pense notamment au cas des matériaux composites renforcés par des fibres longues. En effet, lorsqu'un matériau composite unidirectionnel (que l'on abrégera dans la suite par le terme UD), c'est-à-dire lorsque des fibres longues, toutes parallèles entre elles, renforcent une matrice pour former un matériau UD, la rupture globale du matériau est principalement initiée par la rupture locale de certains des constituants, en fonction de la nature du comportement mécanique de chacun d'eux. Dans le cas général, lorsque l'échantillon d'un composite UD est sollicité en traction pure dans la direction des fibres, deux situations distinctes peuvent alors se présenter.

Soit la déformation à rupture de la matrice est plus faible que celle des fibres $\varepsilon_m^R < \varepsilon_f^R$, situation plutôt générée dans le cas des composites à matrice céramique, alors la matrice va se fragmenter progressivement au fur et à mesure que l'essai est effectué, c'est-à-dire au fur et à mesure que le chargement augmente. Cette microfissuration de la matrice peut entraîner celle des fibres.

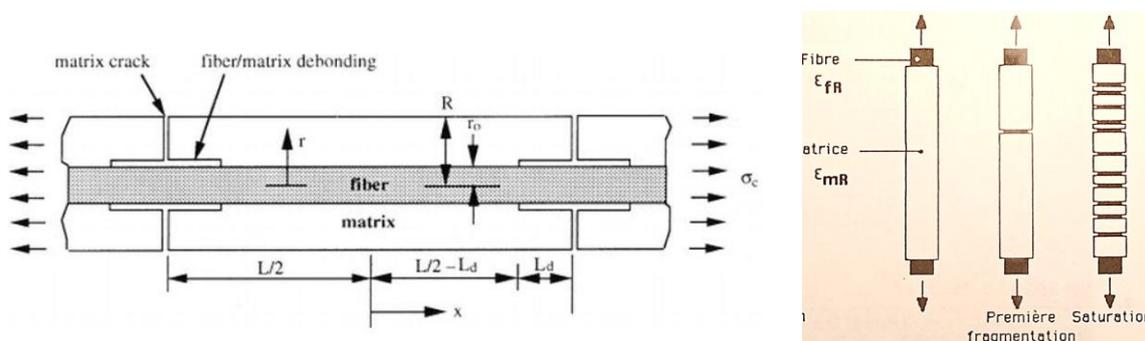


Figure 37 : Représentation de la fragmentation progressive de la matrice dans un essai de traction d'une fibre insérée dans une matrice céramique, d'après Chengzheng Zhu, 2020, à gauche [3], et d'après J.P. Favre et al., à droite [4].

On voit sur la figure 47 une description du phénomène local qui a été l'objet de nombreuses analyses [1], [2], [3].

Dans un autre cas plus courant, c'est la fibre qui dispose d'une déformation à rupture plus faible que celle de la matrice, $\varepsilon_f^R < \varepsilon_m^R$, c'est le cas des fibres classiques de verre, de carbone ou d'aramide, associées à des matrices organiques (polyester ou poly-époxyde). Dans ce cas, on verra apparaître dans l'éprouvette une série de ruptures de fibres individuelles augmentant progressivement au cours du chargement, accompagnées parfois de déchaussements locaux, c'est-à-dire accompagnées d'une rupture localisée de l'interface fibre-matrice au voisinage de la rupture de la fibre, jusqu'à ce que la résistance résiduelle du matériau sain ne puisse plus supporter le chargement ou qu'une microfissure devienne instable et se propage de façon macroscopique.

La matrice peut également se fissurer, mais nous nous focaliserons sur la rupture des fibres et ses conséquences, car ce sont elles qui apportent l'essentiel de la rigidité et de la résistance au matériau.

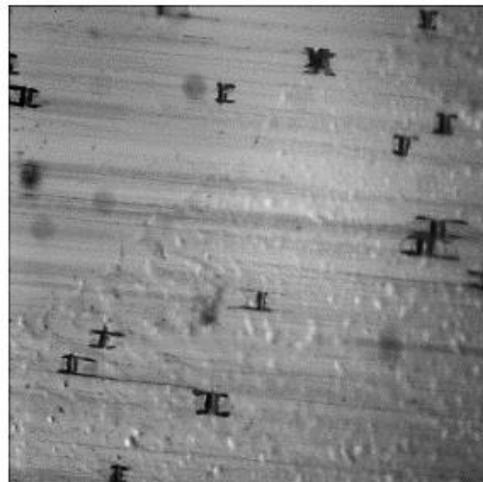


Figure 38: Exemple de rupture de fibres en traction dans un composite unidirectionnel de fibres de verre (diamètre 20 mm) renforçant une matrice poly-époxyde, le matériau est sollicité dans la direction des fibres, c'est-à-dire la direction horizontale sur la photo, d'après A. Chateauminois [5], document ESPCI. Les ruptures des fibres sont clairement visibles, des segments sombres au voisinage des ruptures fragiles des fibres sont la signature de la rupture locale des interfaces.

https://www.simm.espci.fr/sites/www.simm.espci.fr/IMG/pdf/ptes_rupture.pdf

On voit sur la photographie représentée Figure 48, un grand nombre de ruptures de fibres de verre. L'effort de traction est exercé horizontalement. Pour chacune des ruptures de fibre, on remarque également un léger déchaussement de la fibre par rapport à la matrice, il s'agit d'une rupture de l'interface fibre-matrice, relativement localisée.

Afin de compléter la description de ces types d'essais qui conduisent à des ruptures de fibres en traction, on doit également mentionner les essais de fatigue sur composites unidirectionnels. Dans ce cas, on retrouvera des ruptures progressives des fibres, mais aussi

d'autres types d'endommagement matérialisés par des ruptures de la matrice et des interfaces comme le montre la Figure 49, issue de la thèse de Fabrizio Pagano, 2019, [6].

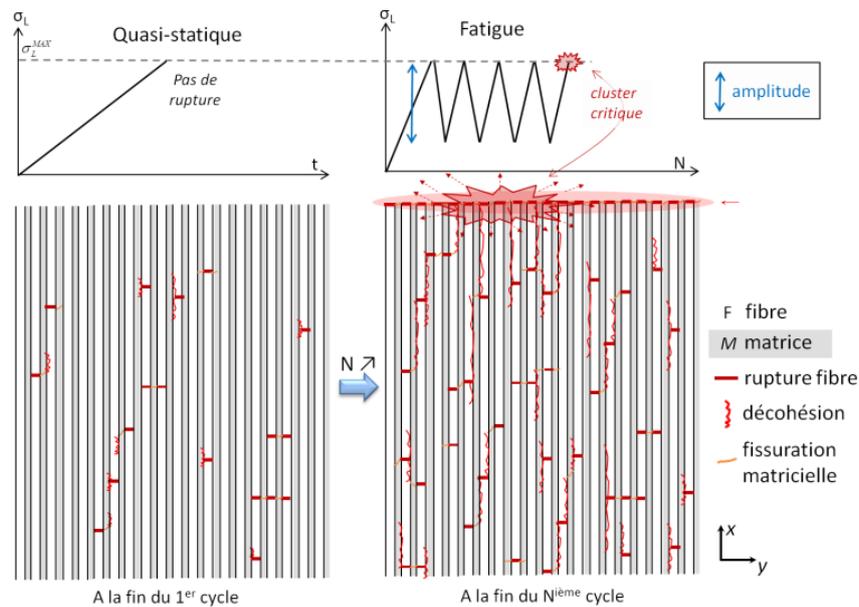


Figure 39 : Modes de rupture d'un composite unidirectionnel en fatigue, mélange de rupture de fibres, de rupture des interfaces fibre-matrice, et fissuration de la matrice, d'après F. Pagano, thèse de doctorat de l'université PSL, Mines ParisTech, 2019, [6]

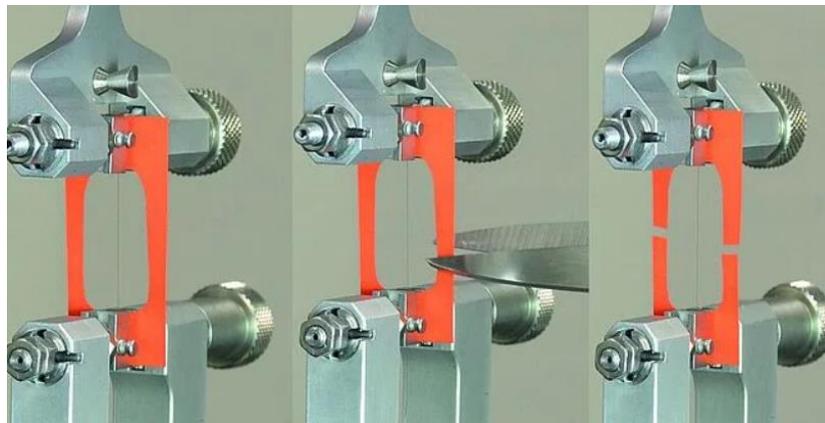


Figure 40 : Procédure de réalisation d'un essai de traction sur fibre seule, selon la norme ISO 11566, d'après Zwick-Roell, <https://www.zwickroell.com/fr/secteurs-dactivite/composites/essais-de-traction/>, [7]

On peut souhaiter solliciter, non pas le composite dans son ensemble, mais effectuer un essai de traction à l'échelle de la fibre, sur un filament individuel. Plusieurs approches restent alors possibles. Soit l'on teste une mèche de fibres [21], soit une fibre individuelle, libre de toute matrice, soit l'on insère cette fibre individuelle dans une matrice. On a alors accès à la mesure de nombreux paramètres, comme la résistance en traction de cette fibre, sa déformation à rupture, ou ses propriétés interfaciales.

Au sujet de la résistance et de la déformation à rupture, ces deux paramètres sont la plupart du temps liés car la majorité des fibres utilisées en renforcement sont fragiles (Verre, Carbone, Aramide), leur rupture apparait alors à la limite de leur comportement linéaire élastique [6], [7].

La réalisation de ce type d'essai est assez délicate et les modalités sont comme souvent, définies par des normes, comme l'ISO 11566 dans ce cas. La fibre est d'abord insérée dans un cadre papier pour l'installation dans la machine d'essai et son alignement dans l'axe de l'effort à appliquer, puis on vient couper ce cadre, l'essai peut alors démarrer comme on le voit sur la Figure 50.

Enfin, on peut également réaliser un essai mécanique de traction en agissant sur une fibre unique noyée dans une matrice afin d'évaluer les propriétés mécaniques de l'interface fibre-matrice. On observe alors une série de ruptures de la fibre au cours du chargement, la fibre se rompant progressivement en morceaux ou fragments, de plus en plus petits. Il s'agit de ce que l'on appelle un essai de fragmentation. C'est celui qui va nous intéresser dans la suite et que l'on va présenter dans le paragraphe suivant afin d'en apporter une nouvelle modélisation.

2. L'essai de fragmentation

Lorsqu'on exerce une traction sur une éprouvette de polymères au sein de laquelle est inséré un mono-filament, les contraintes de traction sont continuellement transmises à la fibre au travers de l'interphase par des contraintes de cisaillement interfaciales. Lorsque ces contraintes de cisaillement induisent une force de traction suffisante dans la fibre, on atteint la contrainte de rupture de la fibre, celle-ci se casse alors en deux morceaux distincts, la rupture se localisant à l'endroit le plus faible de la fibre en raison de la présence d'un défaut en son sein, ou à cause d'une hétérogénéité de sa surface.

Cette rupture s'accompagne d'une redistribution des déformations et des contraintes dans la matrice au voisinage du lieu de la fracture, et donc induit une redistribution des contraintes dans la fibre. Puis la déformation de l'éprouvette continuant à croître, on atteint de nouveau un seuil de contrainte à rupture dans l'un des fragments restants de la fibre qui continue à se fracturer ainsi progressivement, jusqu'à ce que les fragments restants ne soient plus assez longs pour générer, par cisaillement, une force de traction suffisante pour les rompre de nouveau. Il y a alors saturation du processus. On peut voir le principe d'un essai de fragmentation sur la Figure 51.

Cet essai semble avoir été mis au point pour la première fois par J. Aveston et al. [8], à partir des années 1971, sur la base d'un premier article de A. Kelly et W.R. Tyson publié en 1965 [12], puis largement développé par la suite.

On en trouve une excellente synthèse dans un document expérimental du laboratoire national RISO du Danemark [7] et plus récemment dans un document spécialisé de l'INSA de Lyon [17].

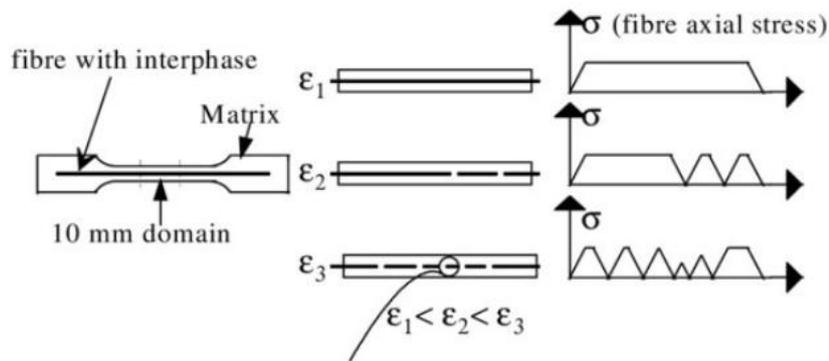


Figure 41 : Principe de l'essai de fragmentation d'une fibre. Le nombre de fragments augmente progressivement jusqu'à saturation lorsque les contraintes de cisaillement intégrées sur la longueur restante ne sont plus suffisantes pour casser de nouveau le fragment, d'après W. Wu et al. [18]

2.1. Description précise de l'essai

Dans le cas des matériaux composites à matrice thermodurcissable, la réalisation d'un essai de fragmentation sur des fibres classiques, carbone, verre, ou même fibres naturelles, nécessite la mise de place une fibre élémentaire au sein d'une éprouvette en résine epoxy ou polyester de type os (dogbone) ou haltère, Figure 52, [8], [11]. La démarche globale est bien décrite dans le document [11] du laboratoire national RISO du Danemark. On en rappelle certains éléments dans la suite de ce paragraphe.

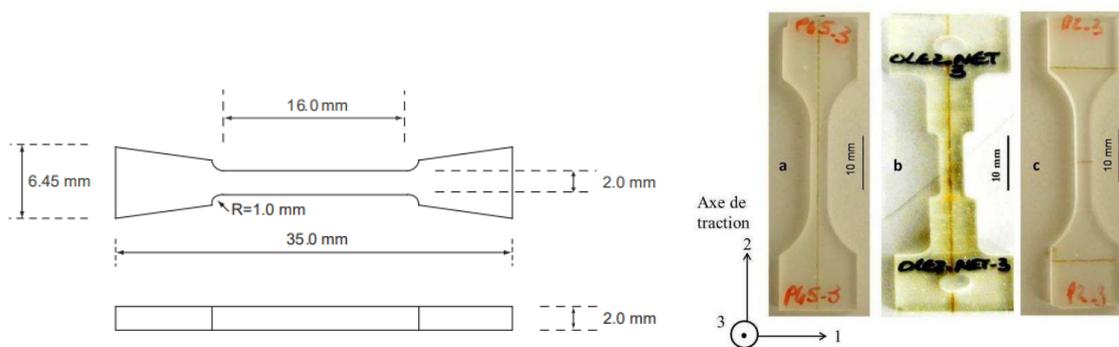
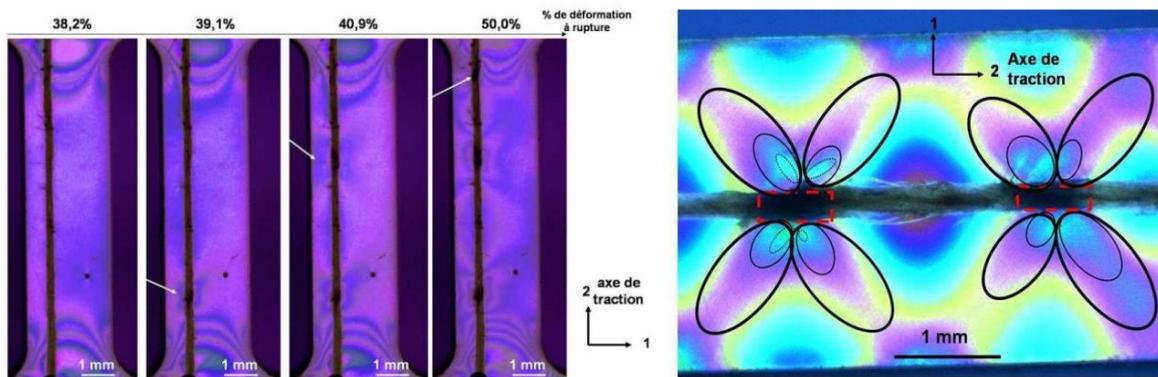


Figure 42 : Exemple d'éprouvettes en résine thermodurcissable utilisée pour réaliser un essai de fragmentation d'une fibre en traction, la fibre n'est pas représentée à gauche, d'après [8], et avec une fibre de chanvre dans une matrice époxy à droite [9].

Les éprouvettes sont ensuite placées dans un dispositif de traction, soit une machine de traction standard, soit un petit dispositif spécifique car les efforts à appliquer sont assez faibles. Pour suivre la fragmentation de la fibre au cours du chargement, plusieurs méthodes existent car il faut suivre les fracturations optiquement. Certains les identifient en plaçant l'éprouvette dans un polariscope à champ sombre, un traitement des images obtenues par caméra haute résolution permet d'observer les isochromes associées à la rupture de la fibre, [9], Figure 53. D'autres placent le dispositif dans un microscope et suivent directement les

ruptures de la fibre. Dans tous les cas, une précontrainte est appliquée afin de démarrer l'essai dans de bonnes conditions de transmission d'effort entre la matrice et la fibre.



2.2. Résultats classiques des essais de fragmentation

Les résultats des essais de fragmentation sont obtenus en traçant classiquement le nombre de ruptures individuelles de la fibre en fonction de la contrainte moyenne appliquée à l'éprouvette ou de sa déformation. Il existe de nombreux exemples dans la littérature de résultats de tels essais. On voit sur la Figure 54, un exemple tiré de [8] montrant l'augmentation progressive du nombre de fragments en fonction de la déformation pour une fibre de « verre E » insérée dans une matrice polyester.

Les courbes correspondent à différents types de traitement de surface de la fibre, ayant pour conséquence de modifier la contrainte de cisaillement d'interface et donc de modifier le transfert des efforts de la matrice à la fibre.

En particulier, les interfaces sont notées avec un traitement TMPP : (TriMethoxysilylPropyl modified Polyethylenimine) ou avec un traitement AHAT : (N-(6- AminoHexyl) Amino-propylTrimethoxysilane).

Les deux autres courbes correspondent à deux polyester différents, l'ensemble des résultats permettant aux auteurs de calculer une courbe de fragmentation avec une interface supposée infiniment adhésive, c'est-à-dire une adhésion parfaite. Cela conduit à une augmentation indéfinie du nombre de fragments.

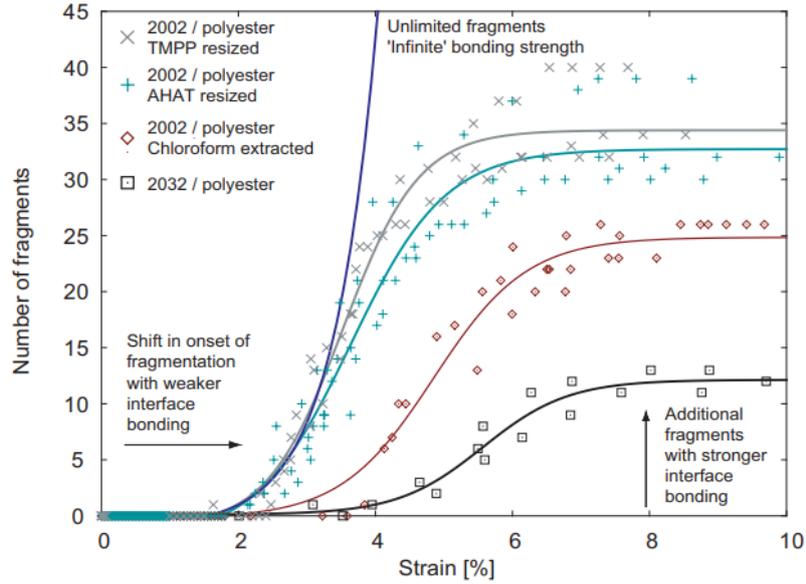


Figure 44 : Evolution du nombre de fragments pour une fibre de « verre E » insérée dans une matrice polyester d'après [8]

On peut également présenter les résultats sous la forme de l'évolution d'une densité de fragments par unité de longueur en fonction de la déformation macroscopique appliquée. C'est le cas de B. Kim et al. [10] qui comparent ainsi les propriétés interfaciales de deux fibres : une fibre de carbone AS4 et une fibre de « verre E ». Voir Figure 55.

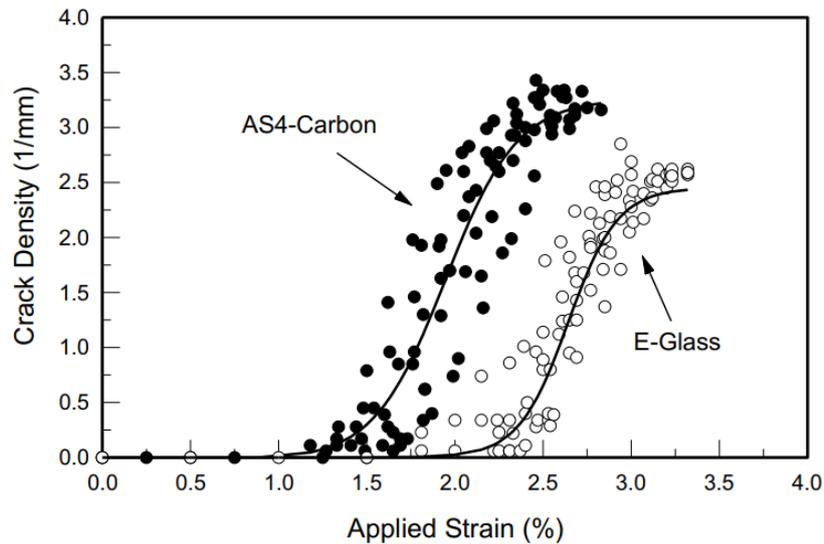


Figure 45 : Comparaison des densités de rupture pour deux fibres, la fibre de carbone AS4 et la fibre de « verre E » d'après [10]

Les plus récentes avancées en nanotechnologie permettent d'obtenir des résultats particulièrement intéressants. C'est le cas des travaux de P. Marashizadeh et al. [20] qui viennent greffer des nanofils d'oxyde de zinc (ZnO) créant ainsi une interphase très spécifique entre une fibre de carbone et la matrice. Les résultats comparatifs sont montrés sur la Figure 56. On voit clairement l'intérêt d'une telle solution et la capacité de cet essai pour le mettre en évidence.

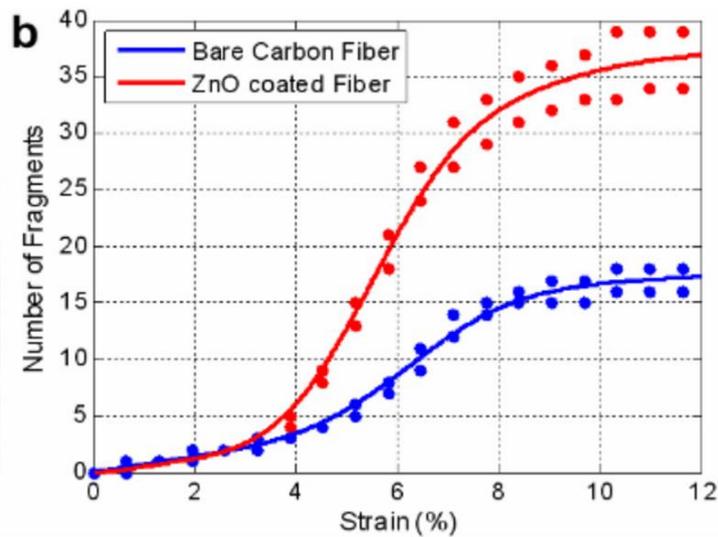


Figure 46 : Résultats de tests de fragmentation sur des éprouvettes comportant une fibre de carbone seule (courbe bleue), ou présentant une greffe d'interphase de nanofils de ZnO (courbe rouge) d'après [20]

On pourra également observer la nature de ces interphases de nanofils de ZnO sur les résultats de microscopie électronique ci-dessous, Figure 57, des mêmes auteurs [20].

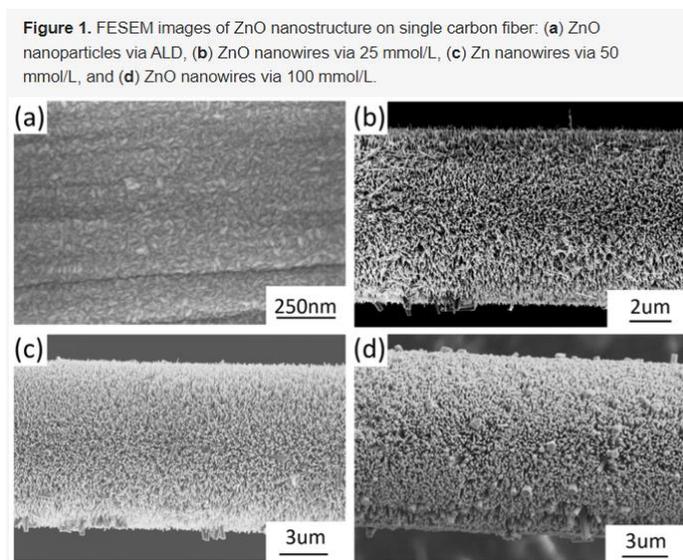


Figure 47 : Observation des interphases de ZnO greffées sur des fibres de carbone d'après P. Marashizadeh et al., 2019, [20]. Selon les conditions expérimentales, la longueur des nanofils varie de 15 à 30nm, et leur épaisseur de 7 à 15nm.

De nombreux autres résultats existent dans la littérature, il n'est pas question de les rappeler tous ici. Ils décrivent ainsi de multiples types de fibres, collées à des matrices variées, et pour lesquelles les interfaces peuvent être modifiées chimiquement.

Nous en ferons un rapide bilan dans le paragraphe IV.2.3.3. La question reste de savoir comment l'on peut modéliser cet essai en vue d'une interprétation physique des résultats.

2.3. Modélisations classiques de l'essai de fragmentation

Rappelons d'abord que l'essai de fragmentation sert en premier lieu à l'identification des propriétés mécaniques interfaciales d'un matériau composite, c'est-à-dire, l'identification des propriétés de transmission des efforts entre les fibres et la matrice. Ces propriétés sont déterminées principalement par leur limite de résistance, au-delà desquelles plus aucun effort n'est transmissible, l'interface est rompue.

Pour caractériser cela, on parle souvent d'IFSS, pour *Interfacial Shear Strength*, notion introduite en 1965 par Kelly et Tyson [12] et encore récemment modifiée par L. Aliotta et A. Lazzeri en 2020 [13] dans le cas de fibres très courtes, pour lesquelles la connaissance de la contrainte de cisaillement au voisinage des extrémités des fibres est très importante.

Lorsqu'une fibre est insérée dans une matrice et que l'on sollicite l'ensemble en traction, en supposant que la fibre est plus rigide que la matrice et que la liaison fibre/matrice est parfaite, il se produit un effet renforçant car la fibre va limiter la déformation de la matrice comme on le voit dans la figure ci-dessous (Figure 58) extraite du document *Matériaux Composites* de A. Chateauinois, ESPCI, [14].

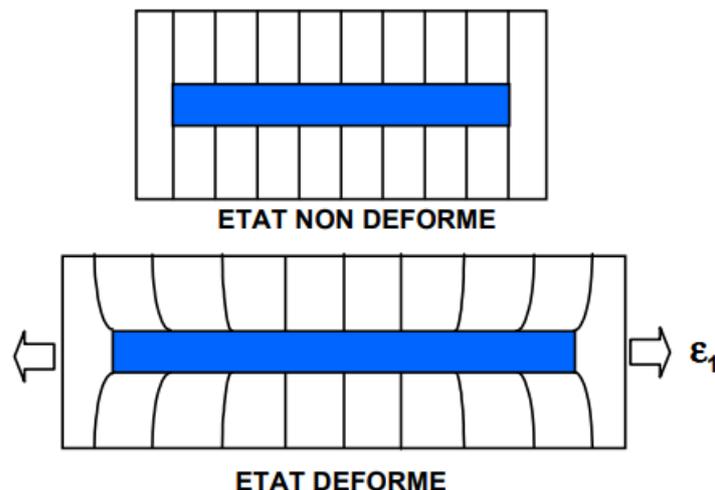


Figure 48 : Effet renforçant d'une fibre (bleue) insérée dans une matrice cylindrique, les lignes verticales noires ne sont que des marqueurs de l'effet renforçant et on peut observer la déformation interne de la matrice, très variable en espace. Illustration également du volume élémentaire représentatif (VER) du modèle de H.L. Cox [15], d'après A. Chateauinois, ESPCI [14].

Rappelons essentiellement les deux modèles de base qui ont établi les premiers résultats sur ce problème. Il s'agit d'une part du modèle de Cox [15] qui date de 1952 et était à l'origine appliqué aux fibres de papier, et d'autre part du modèle de Kelly et Tyson [12] datant de 1965.

2.3.1. Modèle de Cox

Il s'agit d'un modèle quasi 1D, simplifié et bien connu (*shear-lag*). On suppose que la fibre est cylindrique de diamètre d et est noyée dans un cylindre de matrice de diamètre D . Les matériaux ont des propriétés purement élastiques. Le résultat provient d'un simple équilibre des forces pour un élément de longueur infinitésimal donné, dx , de la fibre. Cet élément de fibre est soumis aux contraintes σ_x et $\sigma_x + d\sigma_x$ sur ses bases, et à la contrainte τ sur sa surface latérale. On notera que la fraction volumique de fibres s'exprime très simplement par $V_f = \frac{d^2}{D^2}$

Une simple équation d'équilibre permet d'écrire :

$$\pi d^2 d\sigma_x = -4\pi d \tau dx, \quad (\text{IV.1})$$

ce qui conduit à :

$$\frac{d\sigma_x}{dx} = -\frac{4\tau}{d} \quad (\text{IV.2})$$

Ainsi, en appelant E_f le module d'Young de la fibre, et G_m le module de cisaillement de la matrice, on obtient après quelques lignes de calcul les évolutions de la contrainte normale et de la contrainte de cisaillement à l'extrémité d'une fibre incluse dans le composite. Les conditions aux limites sont alors :

$$\sigma_x|_{x=0} = 0 \text{ et } \sigma_x|_{x=\infty} = \sigma_\infty = E_f \varepsilon_x \quad (\text{IV.3})$$

On en déduit les évolutions des contraintes normales et de cisaillement interfacial le long de la fibre à partir d'une extrémité ou d'une rupture intermédiaire [15] :

$$\sigma(x) = E_f \varepsilon_x \left[1 - \exp\left(-\frac{2\beta x}{d}\right) \right] \text{ avec } \beta^2 = \frac{2G_m}{E_f \ln(D/d)} \quad (\text{IV.4a})$$

$$\tau(x) = -\frac{\beta E_f \varepsilon_x}{2} \exp\left(-\frac{2\beta x}{d}\right) \quad (\text{IV.4b})$$

On voit que la contrainte normale est nulle lorsque $x = 0$, et atteint le plateau $E_f \varepsilon_x$ relativement lentement lorsque x augmente. Dans la solution au voisinage de l'extrémité de la fibre, elle est beaucoup trop lente par rapport à une solution exacte proposée par J. Naim en 1992 pour un composite carbone epoxy [17], comme le montre le graphe ci-dessous rappelé par D. Rouby dans [16], voir Figure 59.

A l'inverse, la solution du modèle de Cox montre une contrainte de cisaillement interfaciale maximale à l'extrémité de la fibre, puis qui diminue exponentiellement. Cette solution n'est

pas physiquement réaliste car cette contrainte est au minimum bornée par une limite d'élasticité et/ou un début de plasticité.

Malgré ses imperfections, le modèle de Cox rend des services par sa simplicité et permet une première identification des contraintes de cisaillement aux interfaces.

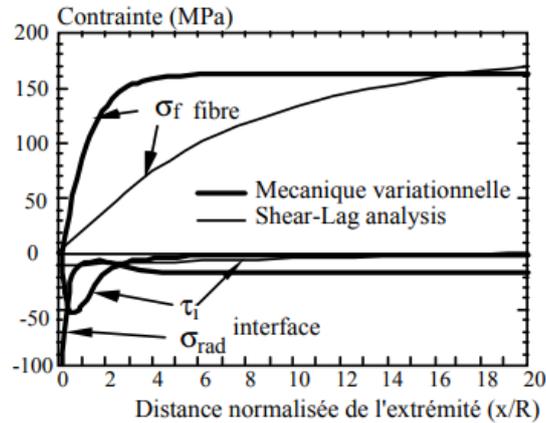


Figure 49 : Comparaison du modèle de Cox (shear-lag) avec la solution exacte pour un carbone-epoxy, donnée par J.A. Naim (1992) [17] et rappelé par D.Rouby en [16]

2.3.2. Modèle de Kelly et Tyson [12]

Dans ce modèle, les auteurs font l'hypothèse d'une contrainte de cisaillement constante dans la zone de transfert de charge de la fibre, et d'une contrainte de cisaillement nulle partout ailleurs. Cette contrainte constante aux extrémités peut s'associer à un glissement après plastification. Les évolutions des contraintes normales et de cisaillement le long de la fibre sont bien représentées graphiquement dans [14] avec le détail des calculs. On en donne une illustration dans la Figure 60 ci-dessous.

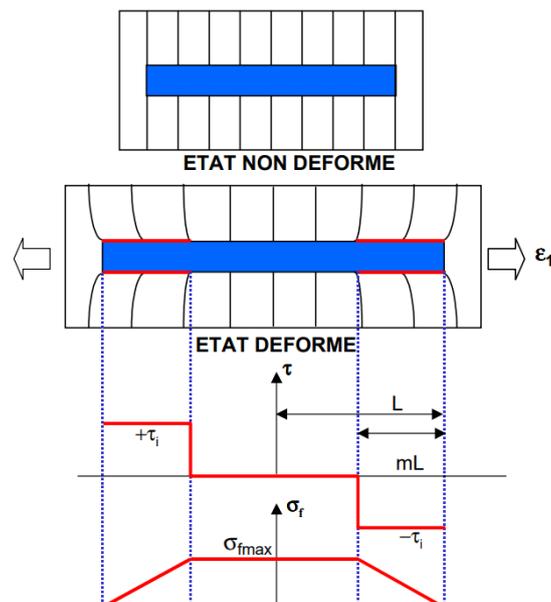


Figure 50 : Evolutions des contraintes normales et de cisaillement interfacial le long de la surface extérieure de la fibre avec le modèle de Kelly et Tyson [14]

Dans le cas de la rupture d'une fibre au cours de l'essai, la situation est également étudiée depuis longtemps et la solution dans le cadre du modèle de Kelly & Tyson, est connue. On l'illustre dans la Figure 60, toujours d'après [14]. La contrainte de cisaillement τ_i est toujours nulle dans la partie centrale et constante au voisinage des extrémités, dans ce cas elle prend la valeur $\tau_i = \tau^*$, c'est la limite élastique de la matrice en cisaillement.

La contrainte normale dans la fibre, constante dans la partie centrale, décroît progressivement aux extrémités, jusqu'à la valeur nulle. Dans la partie centrale, elle vaut :

$$\sigma_f = E_f \varepsilon_f \quad (\text{IV.5})$$

A proximité de la rupture, elle vaut :

$$\sigma_f = -\frac{4\tau^*}{d} x \quad (\text{IV.6})$$

En appliquant la relation d'équilibre (IV.1) établies en IV.2.3.1 pour le modèle de Cox, on obtient alors la relation suivante :

$$y = \frac{d\sigma_f}{2\tau^*} \quad (\text{IV.7})$$

où y représente la longueur de fibre au sein de laquelle la contrainte normale varie jusqu'à 0, et où la contrainte de cisaillement interfaciale est nulle.

On appelle cette dimension y la **longueur critique de la fibre** et est baptisée l_c lorsque σ_f atteint la contrainte à rupture. Elle dépend bien sûr de nombreux facteurs mécaniques et chimiques.

Enfin pour la contrainte dans la matrice, la symétrie du problème, ses hypothèses et la nature des conditions aux limites permettent d'écrire :

$$\sigma_x = V_f \sigma_f + V_m \sigma_m \text{ avec } V_f + V_m = 1 \quad (\text{IV.8})$$

On voit tout de suite que dans la zone où cette contrainte est constante, elle vaut $E_m \varepsilon_f$. La valeur maximale de cette contrainte vaut :

$$\sigma_{max} = \frac{\sigma_x}{V_m} \quad (\text{IV.9})$$

ce qui peut aussi s'écrire :

$$\sigma_{max} = E_m \varepsilon_f (1 + \eta) \text{ avec } \eta = \frac{E_f V_f}{E_m V_m} \quad (\text{IV.10})$$

Enfin, la contrainte dans la matrice dans le chevron variant entre ces deux valeurs (zones B'A puis AB de la Figure 61) s'exprime par une fonction affine : sur le segment AB, on aura par exemple :

$$\sigma_m = E_m \varepsilon_f (1 + \eta) + \frac{V_f}{V_m} \frac{4\tau^*}{d} x \quad (\text{IV.11})$$

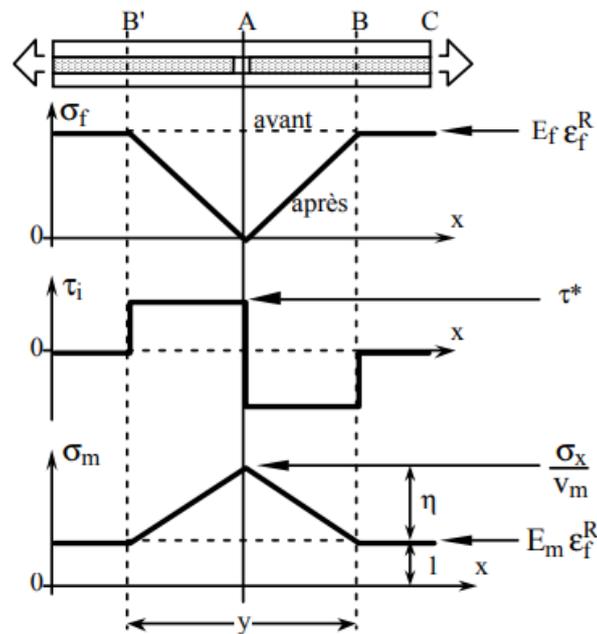


Figure 51 : Evolutions de la contrainte normale dans la fibre, ici σ_f , contrainte normale dans la matrice, ici σ_m , et contrainte de cisaillement interfaciale, ici τ_i , avec le modèle de Kelly & Tyson, d'après D. Rouby, document INSA de Lyon [16]

En conclusion, ce modèle de Kelly & Tyson reste évidemment simplifié, la contrainte normale réelle dans la fibre, dans la zone centrale, ne reste pas totalement constante, mais ce modèle est bien pratique, bien que quasi 1D également comme le modèle de Cox, et il fournit de bons moyens de mesure de la contrainte interfaciale aux expérimentateurs. Seules des approches réellement 3D sont susceptibles de donner des approximations nettement meilleures des évolutions des différentes contraintes à l'intérieur de cette petite structure. On en donnera un aperçu dans le paragraphe suivant.

Remarque sur le cas de la fragmentation multiple :

Une analyse similaire et très détaillée a été présentée en [16] avec l'analyse d'une rupture progressive d'une fibre unitaire dans le cadre du modèle de Kelly & Tyson.

La rupture progressive des fibres se produit au fur à mesure du chargement de la structure jusqu'à saturation du nombre de fragments, ceux-ci sont alors suffisamment petits (inférieurs à la longueur critique l_c , ce qui ne permet pas aux contraintes de traction d'être transmises à la fibre afin d'obtenir une rupture supplémentaire.

La multiplication progressive des fragments est également illustrée sur la Figure 62. Sur ce graphe, la première rupture se produit au point A. Au point B se situe la rupture qui peut produire le fragment le plus court. Il possède la longueur $l_{min} = \frac{l_c}{2}$. Une rupture au point E génèrerait le fragment le plus long,

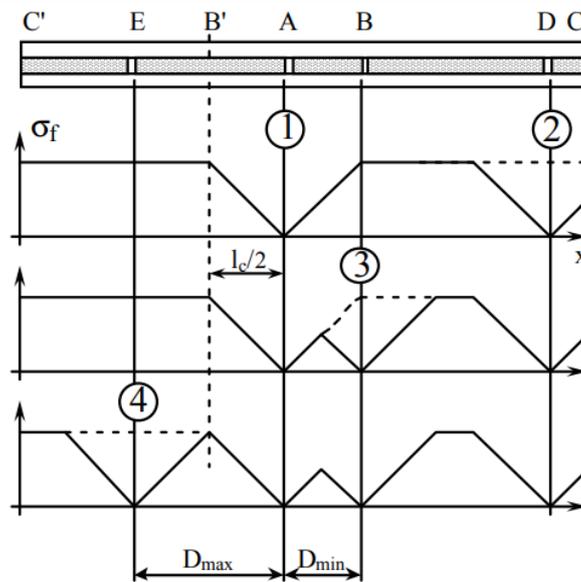


Figure 52 : Evolution de la contrainte normale dans la fibre lors de multiples fragmentations, la première rupture apparaissant en A, on indique dans le texte la signification des rupture potentielles successives, d'après D. Rouby, document INSA de Lyon, [16]

Fragment AE, qui ne pourrait plus se rompre ultérieurement, sa longueur est $l_{max} = l_c$. En supposant une répartition uniforme des longueurs, la longueur moyenne d'un fragment sera de :

$$l_{moy} = \frac{1}{2} \left(l_c + \frac{l_c}{2} \right) = \frac{3}{8} \frac{d\sigma_{fr}}{|\tau^*|} \quad (IV.12)$$

où d est le diamètre de la fibre, et σ_{fr} la contrainte à rupture de la fibre. On obtient ainsi une méthode de caractérisation de la contrainte de cisaillement interfaciale :

$$\tau^* = \frac{3}{8l_{moy}} d \cdot \sigma_{fr}(l_{moy}) \quad (IV.13)$$

Notons que comme la contrainte à rupture de la fibre dépend de la longueur de fibre sollicitée. C'est pourquoi la valeur de cette contrainte à rupture sera prise par rapport à la longueur moyenne [18] :

$$\sigma_{fr} = \sigma_{fr}(l_{moy}) \quad (IV.14)$$

2.3.3. Autres travaux sur la fragmentation multiple d'un monofilament

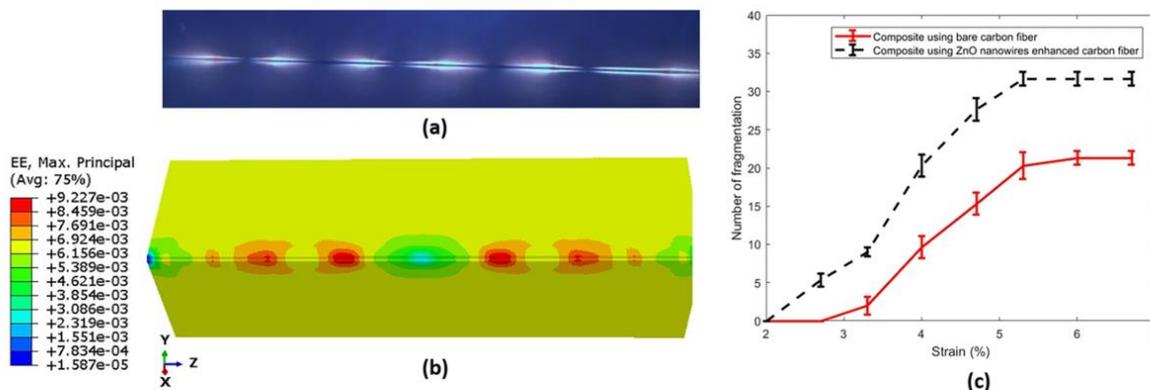
De très nombreux papiers ont été consacrés à la meilleure compréhension des phénomènes physiques liés à la fragmentation des fibres, à l'amélioration de la précision des modèles de fragmentation ou à leur critique par des analyses soit simplifiées, soit plus exactes faisant intervenir des approches variationnelles ou des méthodes numériques variées, à l'amélioration des techniques expérimentales, etc. Ce n'est pas l'objet de cette thèse de se plonger au plus près de ces travaux pour en donner une synthèse précise, puisque, rappelons-

le, nous souhaitons d'abord illustrer les capacités d'une décomposition de certains problèmes complexes en somme de problèmes élémentaires, modélisables par des équations de type Verhulst. La fragmentation des fibres en est une excellente illustration, mais le lecteur devra se référer à des travaux plus spécifiques pour l'analyse détaillée de la littérature. Nous présentons ci-dessous les travaux les plus importants. Le choix s'est porté soit sur des références majeures sur le sujet, soit sur des travaux très récents, montrant d'ailleurs que la thématique est toujours aussi importante et comporte de nombreuses zones d'imperfection. Ainsi les travaux de C.W. Rodricks et al. [37], montrant qu'une modification géométrique de l'interface par perlage, conduit à une amélioration notable des effets de renforcement.

On trouvera par ailleurs dans les travaux suivants, les principaux résultats qui nous ont paru importants pour notre étude [38-44].

En 2019, Marashizadeh *et al.* [20], ont apporté une dernière analyse montrant comment le processus de rupture progressive s'effectuait, et ont validé expérimentalement leur analyse par des expériences sur des fibres de carbone simple, puis sur des fibres de carbone entourée d'une interphase de ZnO. Dans les deux cas, la contrainte de cisaillement maximal transmis par la matrice à la fibre varie beaucoup, ce qui induit un nombre très différent de fracturations dans une fibre de longueur donnée.

La Figure 63, d'après [20], montre une micrographie de la fibre fragmentée, un calcul de simulation du champ des déformations sur un volume élémentaire représentatif (VER), ainsi que l'évolution du nombre de fragments en fonction de la déformation appliquée au composite.



(a) Typical micrograph of SFFT showing the fiber break and damages around the crack tip, (b) redistribution of strain around the fracture area obtained from FEM, (c) experimental fragmentations density for bare and ZnO coating fiber.

Figure 53: Calcul du champ de déformations lors d'une fragmentation progressive d'une fibre, et comparaison avec le résultat d'une fibre recouverte de nanofils de ZnO, d'après [20]

2.4. Conclusion sur l'analyse mécanique de l'essai de fragmentation

On a vu dans ce rapide survol des travaux majeurs dans le domaine, combien le processus de fragmentation d'une fibre insérée dans une matrice et soumise à une traction progressive, était la somme de processus complexes. Les essais sont délicats à réaliser. De nombreuses analyses mécaniques ont été proposées. Dans tous les cas, on montre que cet essai est

important car il permet d'approcher de façon réaliste le comportement interfacial d'une fibre au sein d'une matrice, or les phénomènes de cisaillement, qui permettent le transfert des chargements de la matrice vers la fibre, sont cruciaux pour la meilleure conception de matériaux et de structures composites permettant un très fort allègement de matière à résistance égale, et souvent à rigidité améliorée. Nous allons détailler la question de la modélisation de l'évolution du nombre de fragments au cours de l'essai dans le paragraphe suivant, en montrant en quoi notre modélisation de Verhulst généralisée apporte de nouveau.

3. Modélisation de l'évolution du nombre de fragments

3.1. Etat de l'art sur cette modélisation

A partir des travaux de Widom [45], et Aveston [46], des modélisations Monte Carlo de Fraser [47], d'une solution exacte d'un problème approché développé par Hui et al. [33] sur la base des travaux de Nairn [32], et des travaux fondamentaux de Curtin [48], Hild [49], des analyses très détaillées des processus ont été proposées. Elles sont complexes mais tiennent compte de l'ensemble des paramètres tant géométriques que mécaniques. Dans tous les cas, elles sont fondées sur une fonction de densité de probabilité de Weibull [50-52], donnée par :

$$f(t) = \frac{\beta(t-\gamma)^{\beta-1}}{\sigma^\beta \exp\left(-\left\{\frac{t-\gamma}{\sigma}\right\}^\beta\right)} \quad (\text{IV.15})$$

Où les trois paramètres vérifient : $\beta > 0$, $\sigma > 0$, et $t > \gamma$. On donne dans la Figure 64 les graphes de la fonction de densité et de la fonction de répartition de Weibull [53, 54].

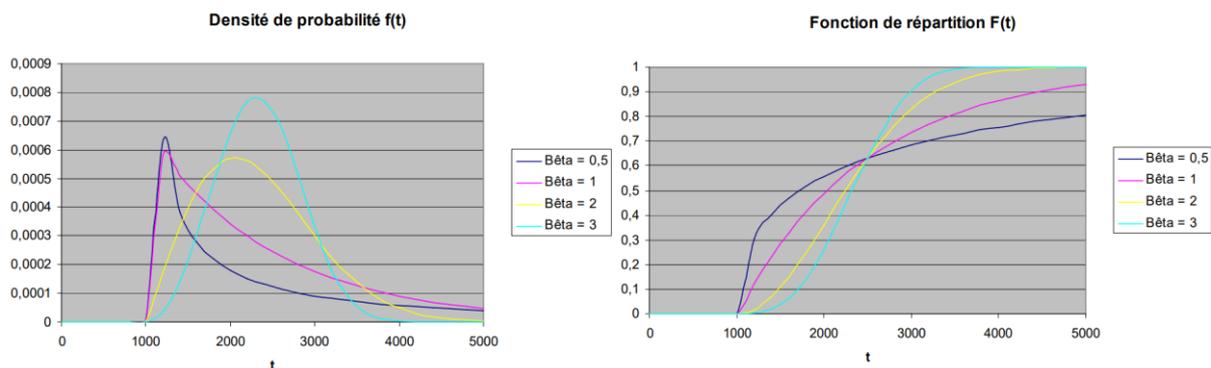


Figure 54 : Graphes de la fonction de densité de probabilité et de la fonction de répartition de Weibull, d'après [52]

Cette fonction de densité de probabilité, que nous avons déjà mentionnée dans la présentation de notre modèle généralisé, conduit les auteurs qui l'utilisent dans un cadre de mécanique des matériaux, à définir d'autres paramètres afin de modéliser la dispersion de la

valeur de la densité d'activation de défauts. Ainsi on utilise couramment le module de Weibull, noté m , et le paramètre de Weibull, encore appelé facteur d'échelle, que l'on caractérise par le rapport λ_0/σ_0^m .

Avec ces définitions, on peut déterminer la probabilité de survie P_S d'un élément de volume V , ce qui permet d'écrire la probabilité de rupture P_F comme son inverse :

$$P_F = 1 - P_S \quad (\text{IV.16})$$

Avec les paramètres de Weibull ainsi définis, la probabilité de rupture s'écrira :

$$P_F = 1 - \exp\left(-\frac{V}{V_0}\left\{\frac{\sigma}{\sigma_0}\right\}^m\right) = 1 - \exp\left(-V\lambda_0\left\{\frac{\sigma}{\sigma_0}\right\}^m\right) \quad (\text{IV.17})$$

Cette probabilité peut naturellement être utilisée pour construire la fonction de distribution des ruptures d'une fibre individuelle. Toutefois, certains auteurs, qui sont d'ailleurs à l'origine des modèles les plus sophistiqués dans l'étude de la fragmentation comme J.A. Nairn et al. [10], n'hésitent pas à caractériser les courbes de densité linéaire de fragmentation par une approximation exponentielle pour plus de simplicité :

$$f(x) = \frac{A}{1 + \exp(B(x-C))} + D \quad (\text{IV.18})$$

Cette fonction présente quatre constantes indépendantes qu'il faut identifier. Dans le cas d'un essai de fragmentation sur une fibre de carbone AS4 et sur une fibre de « verre E », déjà présenté sur la Figure 55, ils déterminent ainsi les valeurs de ces quatre coefficients qui sont données dans le tableau IV.1 ci-dessous :

Fibers	A	B	C	D	COD*	SD**
AS4-Carbon	- 3.2968	0.1886	50.5947	3.2641	0.8761	0.0441
E-glass	- 2.4527	0.2742	68.6883	2.5561	0.8925	0.0325

*Coefficient of Determination

**Standard Deviation

Tableau 13 : Valeurs des coefficients de la courbe de densité de fragmentation en fonction de la déformation appliquée, relatifs aux essais donnés Figure 55, d'après Kim et Nairn [10]

On voit sur la Figure 55 que cette modélisation sur la base d'une fonction exponentielle à quatre paramètres est évidemment très bonne. On verra que la forme de la fonction choisie, particulièrement intéressante, n'est pas le fruit du hasard.

3.2. Nouvelle Modélisation de la fragmentation d'un mono filament par un processus de Verhulst

On a vu précédemment que la modélisation de la rupture progressive des fibres lors d'un essai de fragmentation était bien documentée. Tant sur le plan expérimental que sur le plan théorique, de nombreuses approches existent. Toutefois, elles sont toutes fondées sur une fonction de densité de probabilité de Weibull, dont la caractéristique n'est pas de permettre une signification physique simple des paramètres nécessaires. Nous allons voir maintenant s'il est possible de construire une modélisation de ces ruptures à partir d'une fonction de densité de probabilité de Verhulst, et dans ce cas, si la description physique est améliorée.

Lors d'un essai de fragmentation, nous appellerons n_{fmax} , le nombre maximal de fracturations présentes dans une fibre. Ce nombre est naturellement dépendant de la longueur de la fibre considérée.

On cherche ici à comprendre et modéliser le nombre de fracturation progressivement croissant au cours du chargement pendant cet essai.

Pour le matériau composite unidirectionnel complet (composite UD), son nombre total de fracturations, noté $N_{fmax}(\varepsilon)$, sera la somme discrète du nombre de fracturation de chacune des fibres.

$$N_{fmax}(\varepsilon) = \sum_{i=1}^{i=N} n_{fmax_i}(\varepsilon) \quad (IV.19)$$

Nombre de fracturations et nombre de fragments

A l'instant t , c'est-à-dire pour une déformation ε , en considérant un essai de traction à déformation constante, le nombre de fragments est une fonction croissante de ε , et est égale au nombre de fracturations ajoutée de 1, puisque la fibre entière avant sa première fragmentation compte pour un fragment.

Modélisation du nombre de fragments à déformation donnée

Appelons $y(\varepsilon)$ cette fonction. Il s'agit ici, on l'aura compris, de modéliser un phénomène discret - le nombre croissant de fragmentations au cours de l'essai - par une fonction continue dont la valeur serait comparée aux valeurs entières de fragmentations d'une fibre singulière. Pour un composite unidirectionnel constitué d'un grand nombre de fibres, la plage de valeurs possibles serait naturellement beaucoup plus grande.

On appelle ε , la déformation du cylindre macroscopique entourant la fibre, autrement dit, la déformation appliquée à l'éprouvette contenant la fibre.

$$n_{fragments}(\varepsilon) = n_{fracturation}(\varepsilon) + 1 = y(\varepsilon) \quad (IV.20a)$$

$$\text{Et} \quad n_{fragments}(\varepsilon) = 1 \text{ pour } \varepsilon = 0 \quad (IV.20b)$$

La vitesse de croissance de cette fragmentation sera donnée par la dérivée de $y(\epsilon)$ par rapport à ϵ .

$$y'(\epsilon) = \frac{dy}{d\epsilon} \quad (IV.21)$$

Cette vitesse de croissance du nombre de fragmentations va être proportionnelle au nombre de fragments existants sous une déformation donnée ϵ du composite. Elle va également être proportionnelle à la différence entre une fonction $N(y)$ favorisant le nombre de fragments, et une fonction $M(y)$ freinant sa croissance, en utilisant l'approche de Verhulst.

$$y'(\epsilon) = \frac{dy}{d\epsilon} = y[N(y) - M(y)] \quad (IV.22)$$

Détermination de l'équation différentielle

Analysons ces deux fonctions dans leur dépendance aux principaux paramètres mécaniques du premier ordre. Rien n'empêchera des études ultérieures de complexifier ces termes pour obtenir davantage de précision :

Le terme favorisant le nombre de fragments $N(y)$ doit être proportionnel à la longueur initiale de la fibre : l_0 . Plus celle-ci est longue, plus elle sera susceptible de se fragmenter en morceaux, donc plus le nombre de fragments sera susceptible d'augmenter.

On obtient ainsi $N(y) = \alpha l_0$, où α est une constante positive à identifier.

De même, le terme de frein à l'augmentation du nombre de fragments $M(y)$ va être, toujours au premier ordre, inversement proportionnel à la contrainte maximale de cisaillement τ transmettant les efforts de traction à la fibre par l'intermédiaire de l'interphase. En effet, plus cette contrainte de cisaillement est faible, moins le fragment de fibre concerné sera sollicité et moins il se rompra de nouveau.

Ce terme de frein sera aussi inversement proportionnel à la longueur moyenne du fragment concerné l_i . En effet, c'est l'effort transmis au fragment qui est susceptible de la rompre, or cet effort F est égal à la contrainte de cisaillement intégrée sur la moitié de la surface latérale de la fibre :

$$F = \int_{\text{Surface latérale}} \tau dS \quad (IV.23)$$

et la surface latérale est proportionnelle à la longueur du fragment l_i qui est égale à la longueur initiale l_0 , divisée par le nombre de fragments y .

Ce qui se traduit par

$$l_i = \frac{l_0}{y} \quad (IV.24)$$

On obtient donc le terme de frein donné par :

$$M(y) = \frac{1}{\tau l_i} = \frac{y}{\tau l_0} \quad (IV.25)$$

L'expression de l'équation d'évolution devient :

$$y'(\epsilon) = \frac{dy}{d\epsilon} = y[N(y) - M(y)] = y[\alpha l_0 - \beta \frac{y}{\tau l_0}] \quad (IV.26a)$$

$$y(0) = 1 \quad (IV.26b)$$

Avec α et β deux coefficients relatifs au poids respectifs des termes d'augmentation et de frein de la vitesse de croissance de la fragmentation de la fibre. Ils peuvent également prendre en compte des phénomènes plus complexes qui se produisent au cours de la fracturation progressive de la fibre et qui ne sont pas pris en compte ici, comme les effets de relaxation des contraintes aux alentours de la rupture, la plastification, d'éventuels effets visqueux, la fissuration concomitante de la matrice dans ce voisinage et la nature tridimensionnelle du champ de contraintes qui peut y régner

On obtient ainsi une équation différentielle du premier ordre, similaire à l'équation de Verhulst modélisant la dynamique des populations.

Cette équation différentielle peut aussi s'écrire :

$$\frac{dy}{d\epsilon} = \alpha y [l_0 - \beta \frac{y}{\alpha \tau l_0}] = \alpha y \left[l_0 - \frac{y}{K} \right] \quad (IV.27a)$$

$$y(0) = 1 \quad (IV.27b)$$

$$\text{Avec } K = \frac{\alpha \tau l_0}{\beta} \quad (IV.27c)$$

Il s'agit d'une équation logistique élémentaire à deux coefficients constants (α, β) ou (α, K), avec τ comme paramètre physique, et dont la solution fut exprimée pour la première fois par Pierre-François Verhulst en 1838, appliquée à des dynamiques de population, comme on l'a vu déjà dans les chapitres précédents II et III. Elle est légèrement différente ici.

Solution de l'équation différentielle

L'équation de type Verhulst précédente possède une solution immédiate donnée par :

$$n_{fragments}(\epsilon) = y(\epsilon) = \frac{\alpha \tau l_0}{\beta + (\alpha \tau l_0 - \beta) e^{-\alpha \epsilon}} \quad (IV.28a)$$

$$\text{on a bien } y(0) = 1 \quad (IV.28b)$$

On peut encore noter cette solution par :

$$n_{fragments}(\varepsilon) = y(\varepsilon) = \frac{K}{1 + (K - 1)e^{-a\varepsilon}} \quad (IV.29)$$

Avec

$$K = \frac{\alpha\tau l_0}{\beta}$$

Naturellement, pour adopter cette solution, il faut ici faire l'hypothèse que la contrainte de cisaillement τ qui est ici présent dans la constante K , représente la contrainte critique de cisaillement, c'est-à-dire sa valeur à rupture. Par ailleurs, l'intégration nécessite de considérer que cette valeur de τ est uniforme le long de la fibre, ce qui est approximativement vrai sauf aux extrémités, comme on l'a vu précédemment.

Conditions aux limites

On voit aisément que $\lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} y(\varepsilon) = \frac{\alpha\tau l_0}{\beta} = K$, nombre maximal de fragments dans la fibre. Ce nombre de fragments à saturation est aisément obtenu au cours d'un essai. La relation précédente nous donne donc un lien entre les deux constantes α et β , paramétré par τ .

La courbe de fragmentation est donc représentée par cette fonction $n_{fragments}(\varepsilon)$ qui décrit l'augmentation cumulée du nombre de fragments au cours de l'essai, c'est-à-dire, au cours de l'augmentation de la déformation. Cette équation dépend de deux paramètres K et α et d'une variable physique τ , K étant déjà défini par la relation $\lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} y(\varepsilon) = \frac{\alpha\tau l_0}{\beta} = K$, ce qui correspond au nombre maximum de fragments obtenus à la fin de l'essai. Il reste donc un seul paramètre, α , à déterminer ainsi que l'identification de τ , contrainte de cisaillement à rupture de l'interface.

Pour cela, notons que lors de la première fracture de la fibre, c'est-à-dire lorsqu'on l'on dénombre seulement deux fragments ($n_{fragments}(\varepsilon) = 2$), l'équation ci-dessus nous donne l'expression de ce paramètre. En effet, la première rupture est obtenue lorsque la fibre sur toute sa longueur arrive à sa déformation de rupture, ou à sa contrainte de rupture (les deux sont reliées par la loi de Hooke puisque les fibres dont nous parlons sont toutes élastiques fragiles. La rupture apparaît donc dans la zone de comportement élastique et dans ce cas, nous avons la plus grande longueur de fibre sollicitée par cisaillement, les effets de bord sont alors les moins sensibles.

On a :

$$y(\varepsilon, \varepsilon = \varepsilon_R) = 2 = \frac{K}{1 + (K - 1)e^{-a\varepsilon_R}} \quad (IV.30)$$

D'où :

$$\alpha = -\frac{1}{\varepsilon_R} \ln\left(\frac{K+2}{2}\right) \quad (IV.31)$$

Equation dans laquelle ε_R représente la valeur de la déformation du composite lorsque la fibre admet sa première rupture, et K toujours le nombre maximal de fragments obtenus après saturation.

On obtient donc l'équation finale de la courbe de fragmentation :

$$n_{fragments}(\varepsilon) = y(\varepsilon) = \frac{K}{1 + (K - 1)e^{-\frac{\varepsilon}{\varepsilon_R} \ln \left(\frac{K+2}{2}\right)}} \quad (IV.32)$$

L'équation de fragmentation est donc définie par une fonction dépendant du rapport $\frac{\varepsilon}{\varepsilon_R}$, rapport entre la déformation appliquée à l'éprouvette et la déformation du composite à la première rupture de la fibre.

Enfin, l'identification de la contrainte de cisaillement interfaciale à rupture sera donnée par : $\tau = \frac{K\beta}{\alpha l_0}$ mais la valeur de beta dans ce cas devient un nouveau paramètre.

Paramètres	Signification	Unités
$n_{fragments}(\varepsilon)$	Nombre de fragments dans la fibre pour ε donné	-
ε	Déformation macroscopique appliquée au composite comportant une fibre unique	-
ε_R	Déformation macroscopique du composite générant la première rupture de la fibre	-
α, β	Coefficient d'augmentation (de diminution) de la fracturation	$\alpha : [Pa]^{-1}[m]^{-2}$
l_0	Longueur initiale de la fibre	[m]
τ	Contrainte de cisaillement critique transmise à la fibre par la matrice	[Pa]
$K = (\alpha/\beta)\tau l_0$	Nombre maximal de fragments dans la fibre	-

Tableau 14 : Définitions des principaux paramètres du modèle de fragmentation d'une fibre en utilisant la fonction de densité de probabilité de Verhulst

3.3. Application

On voit sur la Figure 65, un essai de fragmentation d'une fibre de carbone insérée dans une matrice polymère, puis le même essai lorsque la fibre de carbone est entourée d'une interphase de ZnO (Nanofils). Nous allons appliquer notre résultat à ces deux expériences.

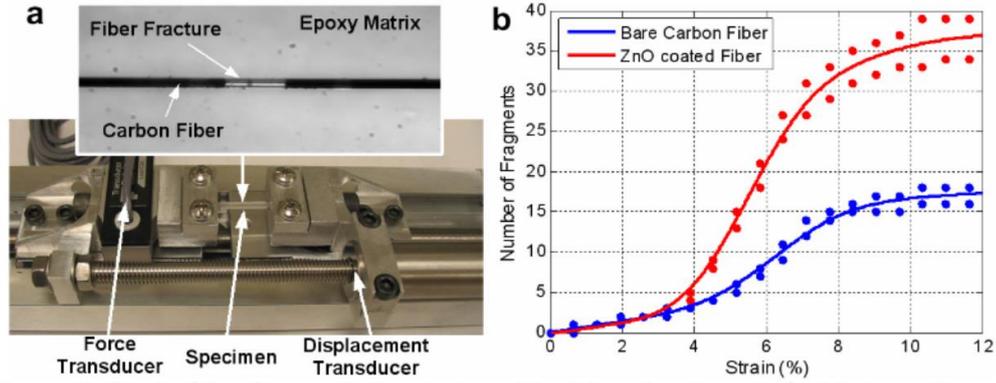


Figure 4. Single fiber fragmentation test used to determine the interfacial shear strength of the nanowire coated carbon fiber. (a) Experimental setup used for testing with the insert depicting a typical fiber fracture in the polymer dog bone specimen. (b) Results of fragmentation testing depicting a significant increase in the fracture density when ZnO nanowires are grown on the fiber surface corresponding to an increase in interfacial shear strength from 15.87 to 33.87 MPa with the ZnO nanowire interface, or 113%.

Figure 55 : Evolution de la fragmentation d'après [24], en fonction de la contrainte de cisaillement

Le nombre de fragments est donné par

$$n_{fragments}(\epsilon) = y(\epsilon) = \frac{K}{1 + (K - 1)e^{-\alpha\epsilon}} \quad (IV.33)$$

Entre ces deux cas, d'après l'analyse des résultats expérimentaux des auteurs de [4], la contrainte de cisaillement maximale passe de 15,87 MPa lorsque la fibre est directement en contact avec la matrice, à 33,87 MPa lorsqu'on ajoute une interphase de ZnO.

La meilleure identification des courbes indiquant la croissance du nombre de fragments en fonction de la déformation

Soit les deux équations suivantes, simulations des courbes expérimentales,

Pour $\tau = 15,87 \text{ MPa}$, $K = 18$ et $\alpha = 0,53$; d'où pour $l_0 = 1 \text{ mm}$, $\beta = \left(\frac{\alpha}{K}\right)\tau l_0 = 0,47 \cdot 10^{-3}$

$$y(\epsilon) = \frac{18}{1 + 17e^{-0,53\epsilon}} + 1 \quad (IV.34)$$

Pour $\tau = 33,87 \text{ MPa}$, $K = 39$ et $\alpha = 0,65$; d'où pour $l_0 = 1 \text{ mm}$, $\beta = \left(\frac{\alpha}{K}\right)\tau l_0 = 0,56 \cdot 10^{-3}$

$$y(\epsilon) = \frac{39}{1 + 38e^{-0,65\epsilon}} + 1 \quad (IV.35)$$

On remarque que les valeurs de α et β sont très similaires dans les deux cas. Avec ces valeurs on identifie de façon très satisfaisante les courbes expérimentales.

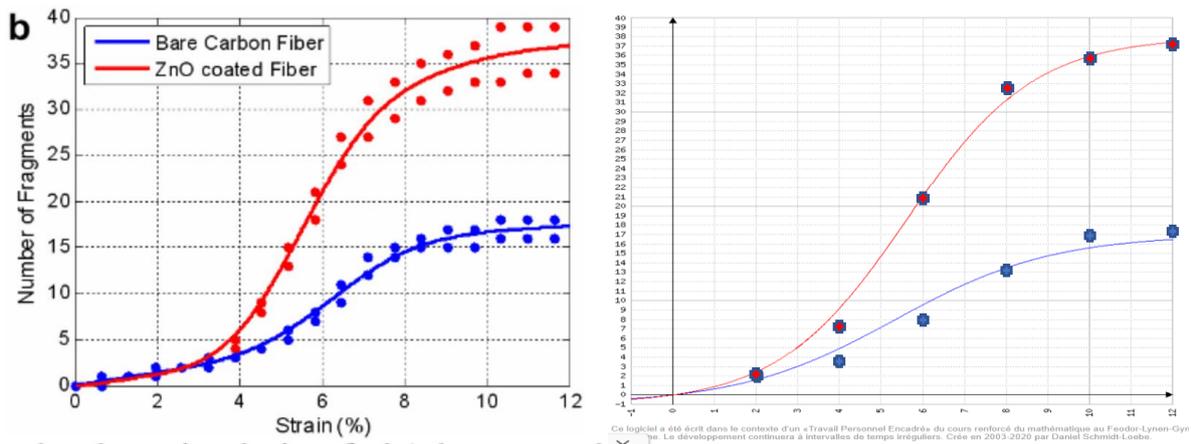


Figure 56 : A gauche, données expérimentales d'après les auteurs de [24] ; à droite, comparaison des points expérimentaux rouges et bleus issus de [24] avec notre modèle de Verhulst généralisé (lignes continues rouges et bleues) appliqué à la fragmentation d'une fibre de carbone avec ou sans interphase de nanofils de ZnO

L'analyse plus approfondie de l'identification permet de voir que l'on a :

$$\alpha = \frac{\ln\left(\frac{K+2}{2}\right)}{\varepsilon_R} \text{ d'où } \varepsilon_R = \frac{\ln\left(\frac{K+2}{2}\right)}{\alpha} \quad (\text{IV.36})$$

On en déduit dans le cas de la fibre de carbone seule : $\varepsilon_R = 4,34\%$, ce qui dépend bien sûr de la valeur du module d'Young de la matrice.

Cette valeur représente donc la déformation macroscopique du composite conduisant à une première rupture de la fibre. Il faudra dans un travail ultérieur comparer cette valeur de la déformation macroscopique du composite à la valeur de la déformation à rupture de la fibre dans les différents modèles exposés précédemment pour mieux préciser le modèle. En effet, aucune publication ne propose des résultats expérimentaux précis sur ce point et une campagne d'essais complémentaires sera nécessaire.

3.4. Conclusion

La modélisation de la fracturation progressive d'une fibre de carbone insérée dans une matrice epoxy et soumise à un essai de traction à taux de déformation constant, obéit à une loi de type croissance de population. Les lois classiques qui sont fondées sur des fonctions de densité de probabilité de type Weibull sont naturellement efficace, mais elles ne permettent pas d'introduire correctement les variables physiques du problème. En revanche, l'utilisation d'une fonction de densité de probabilité de Verhulst le permet. L'identification des facteurs d'augmentation et de frein à la vitesse de croissance de la fracturation a permis d'écrire l'équation différentielle qui pilote les mécanismes physiques mis en jeu. La résolution de cette équation ne pose pas de difficulté particulière et permet d'obtenir une loi de croissance de population, similaire à la loi de Verhulst. La comparaison avec les résultats expérimentaux est très satisfaisante et permet de confirmer le pilotage de ces quantités par la valeur du

cisaillement maximal à l'interphase, qui constitue le facteur prépondérant de ces mécanismes. Il restera à mener d'autres campagnes expérimentales pour vérifier les rapports des déformations macroscopiques des éprouvettes composites avec les déformations internes de la fibre pour terminer l'étude, en les situant par rapport aux différents modèles existants afin de conserver le côté très simplifié de cette approche dans cette modélisation.

4. Perspectives

Pour un composite unidirectionnel ou stratifié macroscopique, le nombre global de ruptures par fragmentation dans un pli à un niveau de déformation donné sera naturellement fourni par la somme des fracturations individuelles de chaque fibre.

$$N_f(\varepsilon) = \sum_{i=1}^{i=N} n_{fi}(\varepsilon) \quad (IV.37)$$

La signature de ces fracturations globales sont expérimentalement données par le nombre d'événements acoustiques enregistrées au cours d'un essai.

Par une déconvolution des événements acoustiques dus à la rupture de l'ensemble des fibres, ou par intégration des événements individuels sur l'ensemble du matériau, on pourrait analyser de façon nouvelle les expériences acoustiques devenues maintenant classiques. Cela pourrait faire l'objet d'une nouvelle thèse du laboratoire. Une extension complémentaire pourrait aussi être faite sur d'autres types d'événements de rupture, comme les fissurations matricielles, les décohésions interfaciales et les délaminages, voir la Figure 67 ci-dessous [55].

L'endommagement d'une fraction macroscopique de matériau composite pourra alors être relié à la quantité de fracturation subie par le matériau pour l'ensemble des fibres. De la même façon, mais cela reste à modéliser, on peut utiliser ce genre d'approche pour l'endommagement résultant de tous types de rupture pour tout type de matériaux, les exemples ne manquent pas. En revenant aux composites, l'évolution de l'endommagement $D(\varepsilon)$ sera alors une fonction de ces k types de fracturations et sera susceptible d'être modélisé par une fonction de Verhulst généralisée, prenant en compte et séparant chacune de ces populations, correspondant à chaque fois à des phénomènes physiques différents.

La sommation globale permettant la reconstitution de l'endommagement macroscopique.

Ceci ouvre des perspectives importantes dans la modélisation analytique de l'endommagement, par la simplicité de la modélisation proposée de ce genre de systèmes complexes.

$$D(\varepsilon) = g\left(\sum_k N_f^k(\varepsilon)\right) = g\left(\sum_k \sum_i n_{fi}^k(\varepsilon)\right) \quad (IV.38)$$

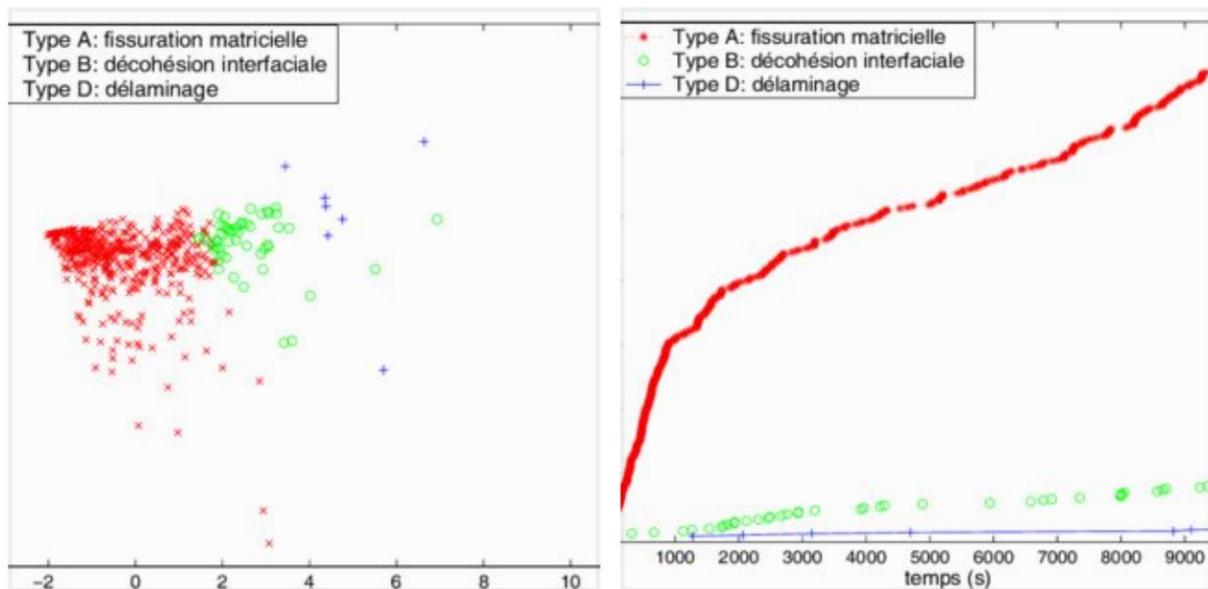


Figure 57: Evénements acoustiques lors de l’endommagement d’un composite en fluage d’après [55], l’endommagement est enregistré en fonction du temps, à gauche on observe l’analyse en composantes principales de chaque événement acoustique, séparé en fonction de sa nature ; à droite, la chronologie d’apparition des différents types d’endommagement. On notera ici que la rupture des fibres ne fait pas partie de phénomènes majeurs, s’agissant d’un composite stratifié $[+ - 62^\circ]_{12S}$

5. Bibliographie

- [1] J. Lamon, A micromechanics-based approach to the mechanical behavior of brittle-matrix composites, *Composites Science and Technology*, 61, 15, pp. 2259-2272, 2001
- [2] C. Chateau, L. Générard, M. Bornert, J. Crépin, D. Caldemaison, C. Sauder, Modeling of damage in unidirectional ceramic matrix composites and multi-scale experimental validation on third generation SiC/SiC minicomposites, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 63, pp. 298-314, 2014
- [3] C. Zhu, Multiple Matrix Cracking of Fiber-Reinforced Ceramic-Matrix Composites during Operation, in “Safety and Risk Assessment of Civil Aircraft during Operation”, Ed. by Longbiao Li, DOI: 10.5772/intechopen.930744, 2020
- [4] J.P. Favre, G. Désarmot, V. Orliouet, F. Saint Antonin, Techniques de fragmentation pour la mesure de l’adhésion fibre-matrice, *Actes des Comptes-Rendus des JNC5*, C. Mathias et D. Menkes, Pluralis Editions, pp. 209-223, 1986
- [5] A. Chateaubinois, cours ESPCI, disponible en ligne en décembre 2022, https://www.simm.espci.fr/sites/www.simm.espci.fr/IMG/pdf/ptes_rupture.pdf
- [6] F. Pagano, Mécanismes de fatigue dominés par les fibres dans les composites stratifiés d’unidirectionnels, Thèse de doctorat, université PSL, Mines ParisTech, 4 octobre 2019

- [7] Document technique de Zwick-Roell, Essais de traction, disponible en janvier 2022, <https://www.zwickroell.com/fr/secteurs-dactivite/composites/essais-de-traction/>
- [8] J. Aveston, G.A. Cooper, A. Kelly, Single and multiple fracture, The properties of fiber composites, Conf. Proc. National Physical Laboratory, IPC, London, 1971, pp. 15-26, 1971
- [9] C. Bonnafous, Analyse multi échelle des mécanismes d'endommagement de composites chanvre/époxy à renforts tissés, caractérisation de l'interface fibre/matrice, Thèse de doctorat, ENSMA Poitiers, 2010
- [10] B.W. Kim, J.A. Nairn, Observations of fiber fracture and interfacial debonding phenomena using the fragmentation testing single fiber composites, Journal of Composite Materials, 26, pp.1825-1858, 2002
- [11] J. Aveston, A. Kelly, Thor of multiple fracture of fibrous composites, Journal of Materials Science, 8, pp. 352-362, 1973
- [12] A. Kelly, W.R. Tyson, Tensile properties of fiber-reinforced metals: copper/tungsten and copper/molybdenum. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 13, pp. 329-350, 1965
- [13] L. Aliotta, A. Lazzeri, A proposal to modify the Kelly-Tyson equation to calculate the interfacial shear strength (IFSS) of composites with low aspect ratio fibers, Composites Science and Technology, 186, 107920, 2020
- [14] A. Chateauminois, cours ESPCI, disponible en ligne en décembre 2022, https://www.simm.espci.fr/sites/www.simm.espci.fr/IMG/pdf/transfert_charge.pdf
- [15] H.L. Cox, The elasticity and strength of paper and other fibrous materials, British Journal of Applied Physics, 3, 1, pp.72-79, 1952
- [16] D. Rouby, Micromécanique des composites, Document INSA de Lyon, 2005, <http://docinsa.insa-lyon.fr/polycop/download.php?id=155764&id2=0>
- [17] S. Feih, K. Wonsyld, D. Minzari, P. Westermann, and H. Lilholt, Testing Procedure for the Single Fiber Fragmentation Test, RISO National Laboratory, RISO-R-1483, Roskilde Denmark
- [18] W. Wu, I. Verpoest, J. Varna, Determination of interfacial fracture toughness from the fragmentation test fata by variational models, Proc. Conf. ICCM 12, Paris, Juillet 5-9, p.324, 1999
- [19] C. Ahlstrom, Interface fibre de verre / matrice polyepoxy : introduction d'une interface à propriétés contrôlées, Thèse de doctorat, INSA de Lyon, 1991
- [20] P. Marashizadeh, M. Abshirini, J. Wang, M.C. Saha, Y. Liu, Multiscale modeling of fiber fragmentation process in aligned ZnO nanowires enhanced single fiber composites, Scientific Reports, 9, 19964, 2019
- [21] J.P. Dumont, P. Ladevèze, M. Poss, Y. Rémond, Damage mechanics for 3D composites, Composites Structures, 8, 2, pp. 117-141, 1987

- [22] F. Pagano, M. Kaminski, A. Thionnet, Evolution de la rupture en fatigue dans un composite unidirectionnel à fibres longues, Colloque MECAMAT, Janvier 2017, hal-01708344/document
- [23] A. Marec, J.H. Thomas, R. El Guerjouma, Etude multivariable par émission acoustique de l'endommagement et de la rupture des matériaux composites sollicités en fluage, 8ème congrès français d'acoustique, Tours, Avril 2006
- [24] Y. Lin, G.J. Ehlert, H.A. Sodano, Increased interface strength in carbon fiber composites through a ZnO nanowire interface, *Advanced Functional Materials*, 19, 16, pp. 2654-2660, 2009
- [25] H. D. Wagner, O. Lourie, Y. Feldman, R. Tenne, Stress-induced fragmentation of multiwall carbon nanotubes in a polymer matrix, *Appl. Phys. Lett.* 72, 188, 1998
- [26] J. Schultz, L. Lavielle, C. Martin, The role of the interface in carbon fibre-matrix composites, *The Journal of Adhesion*, 23, 1, pp. 45-60, 1987
- [27] P.J. Herrera-Franco, L.T. Drzal, Comparison of methods for the measurement of fibre/matrix adhesion in composites, *Composites*, 23, 1, pp. 2-27, 1992
- [28] J.A. Nairn, On the use of shear-lag methods for analysis of stress transfer in unidirectional composites, *Mechanics of Materials*, 26, 2, pp. 63-80, 1997
- [29] F.R. Jones, A Review of Interphase Formation and Design in Fibre-Reinforced Composites, *Journal of Adhesion Science and Technology*, 24, 1, pp. 171-202, 2010
- [30] M.R. Piggott, Why interface testing by single-fibre methods can be misleading, *Composites Science and Technology*, 57, 8, pp. 965-974, 1997
- [31] D. Tripathi, F.R. Jones, Single fibre fragmentation test for assessing adhesion in fibre reinforced composites, *Journal of Materials Science*, 33, 1, pp. 1-16, 1998
- [32] J.A. Nairn, A variational mechanics analysis of the stresses around breaks in embedded fibers, *Mechanics of Materials*, 13, 2, pp. 131-154, 1992
- [33] C.Y. Hui, S.L. Phoenix, M. Ibnabdeljalil, R.L. Smith, An exact closed form solution for fragmentation of Weibull fibers in a single filament composite with applications to fiber-reinforced ceramics, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 43, 10, pp. 1551-1595, 1995
- [34] M.S. Madhukar, L.T. Drzal, Fiber-Matrix Adhesion and Its Effect on Composite Mechanical Properties: I. Inplane and Interlaminar Shear Behavior of Graphite/Epoxy Composites, *Journal of Composite Materials*, 25, 8, pp. 932-957, 2016
- [35] H.D. Wagner, A. Eitan, Interpretation of the fragmentation phenomenon in single-filament composite experiments, *Appl. Phys. Lett.* 56, 20, pp. 1965-1967, 1990
- [36] T. Lacroix, B. Tilmans, R. Keunings, M. Desaeger, L. Verpoest, Modelling of critical fibre length and interfacial debonding in the fragmentation testing of polymer composites, *Composites Science and Technology*, 43, 4, pp. 379-387, 1992

- [37] C.W. Rodricks, I. Greenfeld, B. Fiedler, H.D. Wagner, Fragmentation of beaded fibres in a composite, *Materials (Basel)*, 15, 3, 890, 2022
- [38] P. Ehrburger, J.B. Donnet, Interface in composite materials. *Philos. Trans. R. Soc. London Ser. A Math. Phys. Sci.* 294, pp. 495–505, 1980
- [39] P. Feillard, G. Désarmot, J.P. Favre, A critical assessment of the fragmentation test for glass/epoxy systems. *Compos. Sci. Technol.*, 49, pp. 109–119, 1993
- [40] M. Detassis, A. Pegoretti, C. Migliaresi, H.D. Wagner, Experimental evaluation of residual stresses in single fibre composites by means of the fragmentation test. *J. Mater. Sci.*, 31, pp. 2385–2392, 1996
- [41] J. Andersons, R. Joffe, M. Hojo, S. Ochiai, Fibre fragment distribution in a single-fibre composite tension test. *Compos. Part B Eng.*, 32, pp. 323–332, 2001
- [42] R.J. Sager, P.J. Klein, D.C. Lagoudas, Q. Zhang, J. Liu, L. Dai, J.W. Baur, Effect of carbon anotubes on the interfacial shear strength of T650 carbon fiber in an epoxy matrix. *Compos. Sci. Technol.*, 69, pp. 898–904, 2009
- [43] A. Awal, G. Cescutti, S. Ghosh, J. Müssig, Interfacial studies of natural fibre/polypropylene composites using single fibre fragmentation test (SFFT) *Compos. Part A Appl. Sci. Manuf.*, 42, pp. 50–56, 2011
- [44] N. Graupner, J. Rößler, G. Ziegmann, J. Müssig; Fibre/matrix adhesion of cellulose fibres in PLA, PP and MAPP: A critical review of pull-out test, microbond test and single fibre fragmentation test results. *Compos. Part A Appl. Sci. Manuf*, 63, pp. 133–148, 2014
- [45] B. Widom, Random sequential addition of hard spheres to a volume, *J. Chem. Phys.*, 44, pp. 3888-3894, 1966
- [46] J. Aveston, G.A. Cooper, A. Kelly, *The Properties of Fibre Composites, Single and multiple fracture: The properties of fibre composites. Conference Proceedings, National Physical Laboratory, IPC Science and Technology Press, Ltd, Teddington, U.K, pp. 15-26, 1971*
- [47] W.A. Fraser, F.H. Ancker, A.T. DiBenedetto, B. Elbirli, Evaluation of surface treatments for fibers in composite materials, *Polym. Compos.*, 4, pp. 238-249, 1983
- [48] W.A. Curtin, Exact theory of fibre fragmentation in a single-filament composite, *J. Mater. Sci.*, 26, pp. 5239-5253, 1991
- [49] F. Hild, J.M.-P. Domergue, F.A. Leckie, A.G. Evans, Tensile and flexural ultimate strength of fiber-reinforced ceramic matrix composites, *Int. J. Solid Struct.*, 1994
- [50] W. Weibull, A Statistical Distribution Function of Wide Applicability, *ASME Journal of Applied Mechanics Paper, Transactions of the American Society of Mechanical Engineer's*, pp.293-297, 1951
- [51] V. Michaut, Modélisation de la fragmentation dynamique par la méthode des éléments discrets, Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Paris, 2011

[52] F. Islam, Caractérisation probabiliste monofilamentaire pour améliorer la modélisation stochastique de la résistance des composites unidirectionnels, Université PSL, Mines ParisTech, 2020

[53] Document <https://cabinnovation.com/sites/default/files/fichiers/TP%202020.pdf>, 2023

[54] D.N. Prabhakar Murthy, M. Xie, R. Jiang, Weibull Models, Wiley-Interscience, 2004

[55] A. Marec, J.H. Thomas, R. El Guerjouma, Etude multivariable par émission acoustique de l'endommagement et de la rupture des matériaux composites sollicités en fluage, 8ème congrès de la société française d'acoustique, Tours, France, 24-27 avril 2006

CONCLUSION ET PERSPECTIVES

Cette thèse a tenté de décrire d'une part notre démarche de construction d'une méthode générale de modélisations adaptées à certains systèmes complexes, ainsi que plusieurs applications dans des domaines très différents. Nous avons vu dans le premier chapitre de cette thèse que la définition même de ces systèmes complexes n'était pas aisée. Le concept de système complexe pouvait être remis en cause dans sa généralité, ce qui est d'ailleurs défendu par certains. Cependant, nous avons tenté de montrer en quoi la démarche scientifique que nous adoptons ainsi que le fameux « démon de Laplace », pouvaient guider notre démarche pour lui donner un contour plus précis. Après avoir exploré les principales théories qui proposent des cadres généraux pour comprendre et modéliser ces systèmes et leurs instabilités, et avoir défini leurs domaines d'application, nous avons abordé certaines approches numériques nouvelles très fondamentales comme la PGD, capables de simuler des problèmes dont le niveau de complexité est tel qu'aucune simulation n'en était envisageable il y a quelques années seulement. Enfin, nous avons rappelé qu'en mécanique des milieux continus, la méthode de l'état local constituait, entre autres et elle aussi, une méthode de modélisation de très nombreux systèmes complexes en physique. Dans tous les cas, nous avons retenu la sensibilité aux conditions initiales, la multiplicité des solutions et le nombre important de paramètres difficiles à décorrélérer, comme étant des indicateurs majeurs de complexité.

Dans le chapitre deux, nous avons présenté notre modèle d'un point de vue mathématique. S'il est construit à partir d'une équation différentielle historique assez simple, ses fondements sont établis dans le champ des fonctions de densité de probabilité et la théorie générale de ces fonctions permet de le situer parmi les modèles suffisamment simples pour être performants, et suffisamment sophistiqués pour être généraux. En outre, nous en présentons une généralisation par somme finie d'éléments de base, ce qui est à notre sens original et susceptible d'une optimisation par *machine learning*.

Nous nous sommes permis dans ce deuxième chapitre de comparer notre modèle au cadre général de la PGD pour mieux faire ressortir ses conditions d'utilisation qui nous semblent bien spécifiques. En effet dans ce domaine, la particularité de notre approche se fonde d'une part sur une description analytique locale « a priori », c'est-à-dire que les fonctions décrivant les processus sont données a priori. En contrepartie, la richesse du modèle est retrouvée par la somme finie de processus locaux, ce qui permet un passage à l'échelle macroscopique afin de fournir un modèle global d'évolution du système complexe considéré.

Nous avons également vu que notre modèle s'applique à tous les phénomènes bornés assimilables à des phénomènes de flux saturables dans le temps, dans l'espace ou par rapport à des variables quelconques.

Aussi, dans cette thèse et à titre d'applications, nous nous sommes restreints à étudier deux phénomènes de nature très différente. La première vague épidémique de COVID 19 en Europe fut l'objet de notre première application et sa modélisation est décrite dans le chapitre trois. Enfin la fragmentation d'un mono filament, utilisé couramment dans les matériaux

composites dans ce que l'on nomme généralement : un essai de fragmentation, est décrit dans le chapitre quatre.

Dans le premier cas, nous avons vu que notre modèle donnait des résultats très satisfaisants sur les 22 pays considérés, notamment sur le passage à l'échelle et la précision de la modélisation obtenue. Malgré la très grande instabilité d'un processus épidémiologique et les aléas de sa propagation, tant géographique que temporelle, malgré la complexité biologique du processus d'infection, nous avons pu montrer que notre modélisation permettait une simulation très satisfaisante quand elle était comprise comme une somme d'événements disjoints fondés sur un même processus. Dans notre cas, le choix s'est porté, pour la première vague, sur une somme de deux processus, l'un avant confinement et l'autre après, et nous avons montré que cette démarche était suffisante pour obtenir des résultats satisfaisants, y compris sur le passage à l'échelle. Naturellement, la suite de l'épidémie que nous connaissons tous, avec ces évolutions de variants ou de populations plus ou moins vaccinées, nécessiteraient d'autres fonctions de base que nous n'avons pas explorées, mais qu'il serait intéressant de poursuivre.

Dans la seconde application qui constitue le chapitre quatre de cette thèse, nous avons étudié le cas particulier d'une fibre élémentaire (de verre, de carbone, etc.) insérée dans une matrice polymère et soumise à un essai de fragmentation par traction à taux de déformation constant. Le résultat majeur que nous avons obtenu consiste à montrer que ce processus obéit à une équation différentielle de type « Verhulst » qui pilote les phénomènes physiques. La force de cette approche réside dans l'identification physique de la fonction qui caractérise l'augmentation du taux de fragmentation d'une part, et de celle qui freine cette croissance d'autre part. L'ensemble nous permet d'obtenir des résultats très satisfaisants par rapport aux données expérimentales. Il semble très probable que des développements ultérieurs permettront d'améliorer cette première approche en la couplant avec les nombreuses analyses sophistiquées de ces expériences.

Dans ces deux applications, d'autres perspectives existent et sont nombreuses. Dans le cas de l'épidémie de COVID-19, une comparaison approfondie avec le modèle SIR serait intéressante afin d'enrichir notre modèle par d'autres fonctions de base. L'extension de notre modèle à une échelle de temps plus grande – et donc contenant plusieurs vagues épidémiques ainsi que tous les événements de la gestion de crise qui en ont découlé, tous les phénomènes d'évolution biologiques du virus (y compris les différents modes de vaccination), et tous les phénomènes de population (déplacements, confinements), permettraient là aussi d'enrichir considérablement le spectre de nos fonctions de base. Dans notre application aux matériaux composites par le biais de l'essai de fragmentation d'une fibre, l'extension à d'autres matériaux composites, d'autres fibres et interfaces ne pose aucune difficulté. Ce qui constituerait une perspective importante serait de généraliser cette modélisation à d'autres types d'endommagements des constituants (rupture de la matrice, déchaussements, délaminages, etc.) afin de passer à l'étape macroscopique en tentant de reconstruire l'endommagement global du matériau, compris comme une somme finie de processus d'endommagement élémentaire. Nous n'avons pas pu mener cette étude qui représente un

travail important et une nouvelle approche de la prévision du comportement mécanique de ce type de matériau. Nul doute que cette étude serait également très intéressante.

En insérant notre modèle dans un contexte mathématique plus large dans le chapitre deux, nous avons montré qu'il pouvait être interprété comme un cas particulier d'équations bien plus générales, pouvant être appliquées à bien d'autres phénomènes que l'épidémiologie ou l'endommagement des matériaux que nous avons présentés.

Ainsi, pourrait-on s'intéresser aux modèles mathématiques *World3* développé par le MIT et qui a donné lieu à l'ouvrage « The limits to growth ». Il y est décrit de nombreux processus planétaires associés à des phénomènes « complexes ». Chacune des modélisations qui y sont présentées utilisent les modèles dynamiques que nous avons partiellement abordés dans le chapitre premier. Toutefois aucune d'entre elles n'a exploité l'idée d'une somme de processus élémentaires décrits par une équation différentielle comme nous le proposons, et optimisés par *machine learning* comme nous l'avons décrit. Nous pensons que notre approche, clairement associée à des systèmes bornés, ce qui est bien sûr le cas de toute ressource concrète sur notre planète, pourrait être utilement appliquée comme l'un des outils de base pour leur modélisation et leur simulation.

Mais les phénomènes étudiés peuvent aussi rejoindre les phénomènes économiques dont nombre de variables sont bornées. Ainsi un article de 2022 de P. Gatabazi & al. [1], le *Grey Model* est couplé au modèle de Verhulst, donnant ainsi ce que l'on appelle le *Grey-Verhulst Model* afin de prédire l'évolution du cours du BitCoin. Un autre article de Li Hui & al. [2], a procédé de même pour modéliser la consommation de pétrole en Chine. On voit que le champ d'applications de notre modèle est vaste et que ses perspectives de développement sont importantes.

Enfin, le consultant que j'ai été trouverait très intéressant d'appliquer notre démarche à la création de *business plan*, notamment sur l'acquisition de nouveaux clients.

[1] P. Gatabazi, J.C. Mba, J.C.E. Pindza. Grey Verhulst model and its chaotic behaviour with application to Bitcoin adoption, *Decisions Econ. Finan.* 45, pp.327–341, 2022

[2] L. Hui, L. Yunmei, L. Xilin, D. Huiming, A novel nonlinear multivariable Verhulst grey prediction model: A case study of oil consumption forecasting in China, *Energy Reports*, 8, pp.3424-3436, 2022

Jean RÉMOND**MODÉLISATION ET SIMULATION NUMÉRIQUE DES SYSTÈMES
COMPLEXES PAR SOMME FINIE DE PROCESSUS ÉLÉMENTAIRES****APPLICATION AUX PHÉNOMÈNES DISCRETS PAR GÉNÉRALISATION DES ÉQUATIONS DE VERHULST****Résumé**

On présente une nouvelle approche de la modélisation de systèmes complexes utilisant une généralisation des équations de Verhulst, initialement utilisées pour la croissance de population et qui permettent une modélisation continue de systèmes discrets. Les systèmes complexes et leur évolution sont alors décomposés en somme finie de ces processus et identifiés par *machine learning*. Une première application est proposée dans la modélisation de l'épidémie de SARS-COV2, avec la décomposition des premières vagues en nombre de cas et de décès dans différents pays. Certains phénomènes particuliers, comme l'arrivée d'un confinement, peuvent expliquer l'utilisation de telles sommes afin de reconstruire le phénomène dans son ensemble. Une seconde application concerne les matériaux composites et en particulier, l'essai de fragmentation, pour lequel le même type d'approche permet de reconstruire les résultats d'essais et d'identifier aisément les comportements interfaciaux entre les fibres et la matrice. Sur le même principe, l'endommagement d'un composite en traction sera alors modélisé par des sommes finies des fragmentations pour chaque fibre.

Systèmes complexes, Modélisation numérique, Loi logistique, Verhulst, Mathématiques appliquées, Mécanique, Matériaux Composites, Epidémies

Abstract

We present a new approach to model complex systems using a generalization of Verhulst's equations, originally used for population growth, and which allow continuous modeling of discrete systems. Complex systems and their evolution are then broken down into a finite sum of these processes and identified by machine learning. A first application is proposed in the modeling of the SARS-COV2 epidemic, with the breakdown of the first waves into the number of cases or deaths in different countries. Certain peculiar phenomena, such as the arrival of a confinement, can explain the use of such sums to reconstruct the whole phenomenon. A second application concerns composite materials, and in particular, the fragmentation test, for which the same type of approach makes it possible to rebuild the test results and to easily identify the interfacial behavior between the fibers and the matrix. On the same principle, the damage evolution of a specimen during a tensile test will be modeled by finite sums of the fragmentation for each fiber.

Complex systems, Computational simulation, Logistic laws, Verhulst, Applied mathematics, Mechanics, Composite Materials, Epidemics