quelques exemples de travaux de recherche en mathématiques appliquées

par ***Mme Maria J. Esteban***, directeur de recherche au CNRS, Centre de Recherche de Mathématiques de la Décision, (URA CNRS n° 749), CNRS et Université Paris Dauphine.

Je vais essayer d'expliquer ici comment des travaux de mathématiques aident aujourd'hui à faire avancer la science et la technologie dans deux domaines différents : la physique moléculaire et le traitement d'images et de films par ordinateur.

Mathématiques et physique moléculaire.

Pour comprendre le comportement d'une substance donnée, il faut remonter jusqu'à la structure fine, sa composition.

Une matière donnée est déterminée par les molécules qui la composent. Les molécules sont à leur tour des agglomérats d'atomes et ceux-ci sont formés par des noyaux atomiques et des électrons. Les atomes existent parce que les noyaux, chargés positivement, attirent les électrons, à charge électrique négative. Ces forces d'attraction expliquent en grande partie l'existence des atomes, des molécules et de la matière en général. D'autres forces facilitent l'existence et la cohésion des noyaux.

Certaines combinaisons d'atomes créent des molécules parce que les forces de cohésion sont suffisantes pour maintenir l'ensemble "en une seule pièce". D'autres combinaisons ne peuvent exister que sous l'action extérieure de l'homme, mais se désintègrent immédiatement, car leur composition n'étant pas favorable, les forces de désintégration sont plus fortes que celles de cohésion.

Les physiciens, les chimistes connaissent beaucoup de molécules. Certaines sont vieilles et existent "depuis toujours" dans la nature. D'autres ont été synthétisées récemment pour créer de nouveaux matériaux, de nouveaux médicaments, etc.

On ne trouve pas les nouvelles molécules au hasard, on les cherche en fonction des propriétés (électriques, de conductivité, optiques, etc.) que l'on souhaite atteindre.

Des chimistes, des biologistes, cherchent donc une molécule avec telle ou telle propriété. Les propriétés se déduisent à partir de la structure interne, atomique.

Existera-t-il une telle molécule ? C'est là que le mathématicien peut intervenir. Dans la suite, je vais essayer d'expliquer comment cette intervention du mathématicien appliqué peut aider à trouver une certaine substance.

En chimie, il existe beaucoup de manières de décrire la matière, beaucoup de modèles. Aucun de ces modèles n'est exact. Ils ne permettent qu'une description approximative du comportement des matériaux. Ils sont donc améliorables. Et c'est à cela que travaillent beaucoup de chimistes, à trouver un meilleur modèle. Et c'est là que les mathématiciens peuvent les aider.

Comment trouve-t-on ces modèles ? Sur quoi se basent-ils ? Le principe de base est un principe simple qui s'applique à toute la physique et qui reçoit le nom de "Principe de moindre action". Il dit que tout système physique libre d'actions extérieures, choisit un état dans lequel il effectue "le moindre effort possible", "le minimum d'énergie possible".

Avant de continuer avec nos atomes et molécules, essayons de voir le bien-fondé du principe de moindre action à travers quelques exemples simples.

Exemple A.

Fixons un élastique aux points P_1 et Q_1 et tirons-en vers le haut. Après, libérons-le. Après quelques mouvements vers le haut et vers le bas, dans quelle position va s'arrêter l'élastique ?

Il va finir par être bien droit, entre P_1 et Q_1. Pourquoi ceci ? Parce que l'élastique a cherché à occuper la position dans laquelle il est le plus court possible, dans laquelle il subit un minimum de tension.

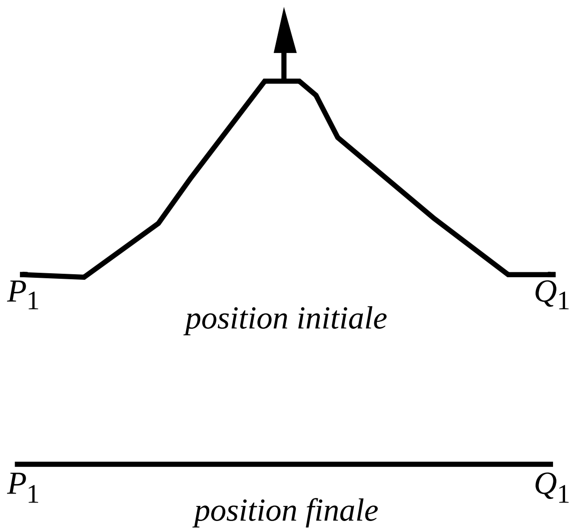
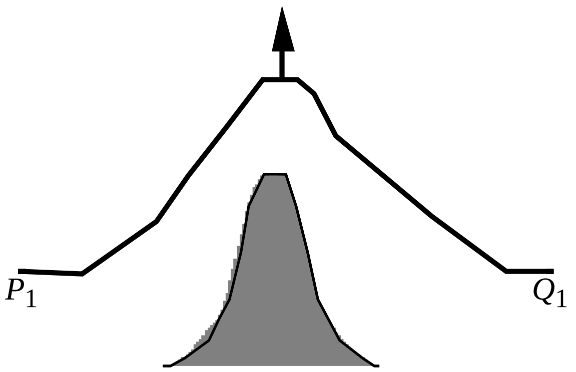


figure 1.

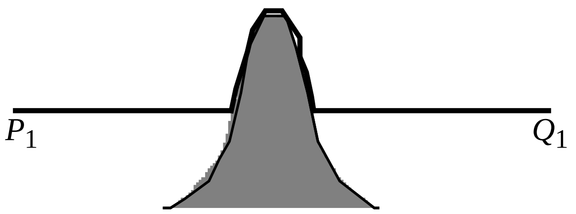
Exemple B.

Faisons maintenant la même expérience, mais en mettant un obstacle solide entre P_1 et Q_1.

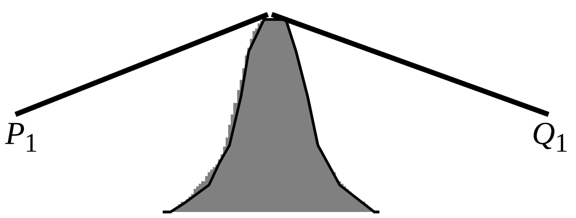
La ligne droite ne sera plus possible car l'élastique ne peut pas traverser l'obstacle. Il essaiera de s'approcher de la ligne droite le plus possible, mais sans perdre de vue cet obstacle qui lui barre le chemin naturel. Regardons sur les dessins :



position initiale



position finale impossible



position finale observée

figures 2.

Dans les deux dessins B_2 et B_3, l'élastique occupe un segment droit en dehors de l'obstacle. Pourquoi B_3 est une meilleure possibilité que B_2 ?

Parce que pendant toutes les configurations possibles de segments droits à droite et à gauche du morceau d'élastique posé sur l'obstacle, celle représentée dans B_3 correspond à une longueur finale minimale.

Dans ces deux exemples, l'élastique a cherché à minimiser sa longueur, après avoir tenu compte de toutes les contraintes présentes.

Pourquoi la nature cherche à minimiser quelque chose lorsqu'on la laisse libre de choisir son état naturel ? Parce que les états d'effort minimum sont plus stables, “durent plus longtemps, plus facilement”.

Illustrons ceci par un autre petit exemple …

Exemple C.

Imaginons une pelouse pas complètement lisse, avec des trous et des bosses.

Jouons avec une petite balle sur cette pelouse. Si nous la posons soigneusement par terre, dans quels endroits restera-t-elle sans bouger ?

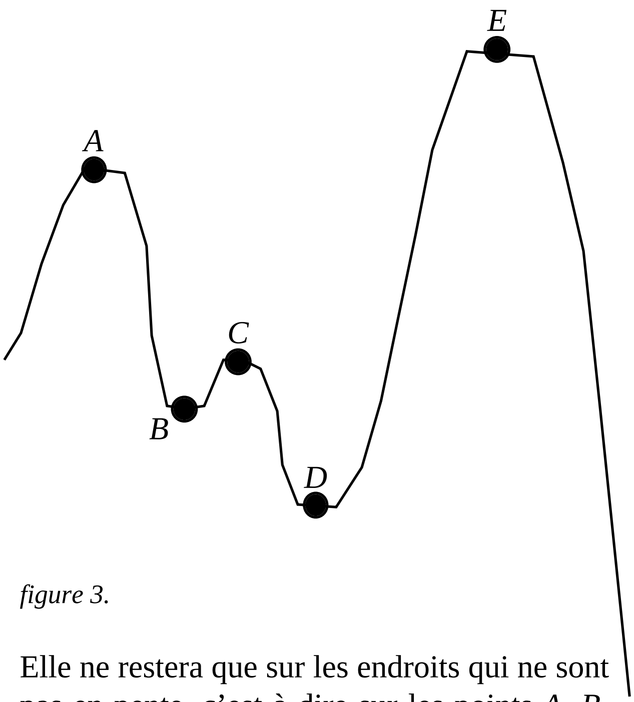


figure 3.

Elle ne restera que sur les endroits qui ne sont pas en pente, c'est-à-dire sur les points *A*, *B*, *C*, *D* et *E*. Mais parmi ces cinq points, sur lesquels la balle sera-t-elle plus stable ?

Observons que si nous la posons sur *A*, *C* ou *E* et qu'un petit vent souffle, elle tombera rapidement vers le bas et ne reviendra pas vers la position initiale, car elle n'arrivera pas à remonter la pente.

Par contre, si nous la posons sur *B* ou sur *D*, même si elle est poussée légèrement en dehors, elle y retombera rapidement.

De nouveau, nous observons que *B* et *D* correspondent à des points de minimum du relief. Et c'est ces points-là qui sont privilégiés, préférés.

Retournons à nos modèles moléculaires. Comme dans l'exemple précédent, il s'agira de trouver les points de minimum d'une certaine fonction. S'ils existent. Mais, bien entendu, les fonctions à considérer seront beaucoup plus compliquées que celle qui sont apparues dans les exemples ci-dessus.

Dans les modèles moléculaires, la fonction à étudier contient trois morceaux.

> Le premier représente l'énergie cinétique (de mouvement) des électrons qui sont “autour” des noyaux des atomes composant la molécule.
>
> Le deuxième, l'énergie d'attraction entre les noyaux (chargés positivement à cause des protons qu'ils contiennent) et les électrons.
>
> Enfin, le troisième morceau correspond à la répulsion entre les électrons.

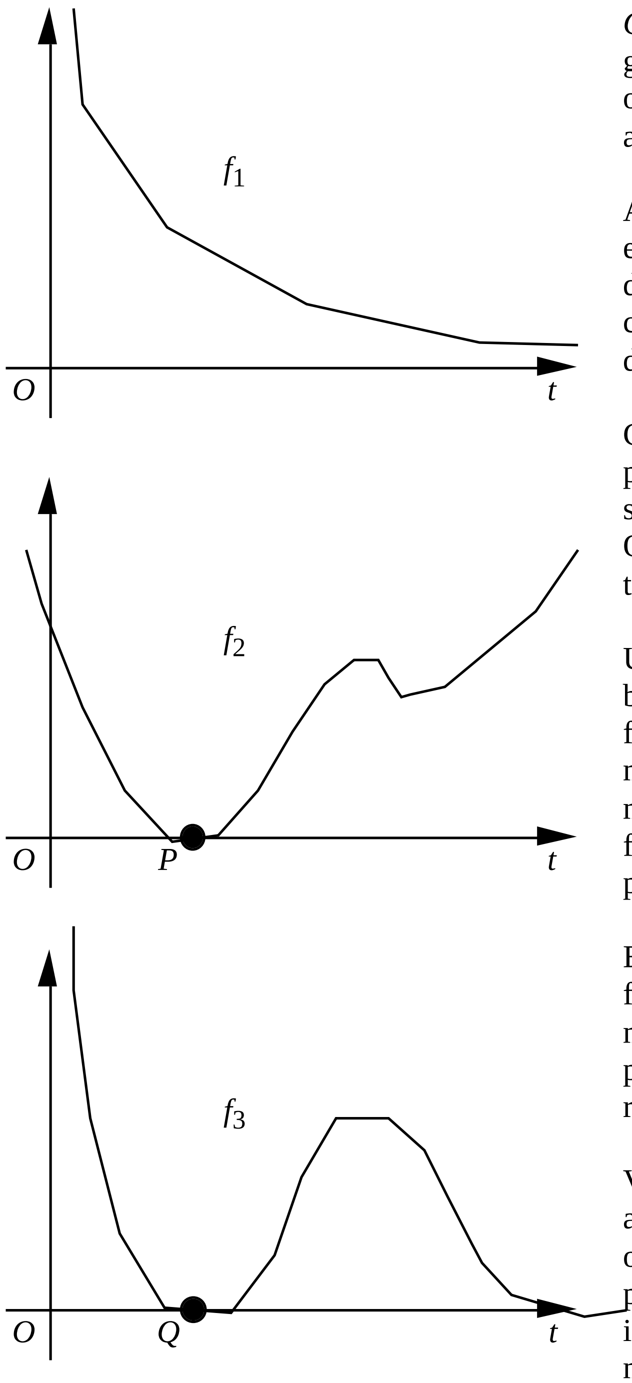
Cette fonction d'énergie totale, que nous appellerons E, est compliquée. Et ses arguments sont des fonctions ϕ qui appartiennent à un certain ensemble X. Le problème à résoudre consiste donc à prouver l'existence (ou la non-existence) d'un élément ϕ_0 de X tel que :

$$E(\phi_0) = \text{infimum de } E \text{ dans l'ensemble } X.$$

Le problème paraît simple. Pourquoi est-il si compliqué ? Parce que la fonction E et l'ensemble X exacts sont beaucoup trop compliqués pour travailler avec. On cherche à en construire de plus simples et maniables. Parce qu'il faut les étudier théoriquement et aussi les traiter à l'aide de l'ordinateur. Plus un modèle (E, X) est simple, plus il est inexact. Il faut donc trouver un équilibre entre la simplicité et la bonne approximation d'un modèle.

Les physiciens et les chimistes proposent des modèles, c'est-à-dire, des fonctions E et des ensembles X qui correspondent à peu près à la molécule souhaitée.

Les mathématiciens étudient ces modèles. D'abord, il faut vérifier qu'ils sont bien pertinents. C'est-à-dire qu'il faut vérifier que pour un modèle (E, X) donné, il existe bien un ϕ_0 dans X où E atteint son infimum. Ceci consiste à distinguer parmi plusieurs situations possibles. Elles sont de trois types différents :



figures 4.

a) f_1 ne correspond pas à un bon modèle, car l'infimum 0 n'est pas atteint.

b) f_2 a un point de minimum P. D'ailleurs, s'approcher de P constitue la seule manière de s'approcher du minimum de f_2, 0.

c) f_3 a un point de minimum Q, mais on peut s'approcher du minimum de f_3, 0, allant vers Q, mais aussi prenant des t de plus en plus grands. C'est-à-dire, allant dans une direction où nous descendons de plus en plus sans attendre le minimum de f_3.

Analyser lequel de ces trois cas est présent est très difficile dans le cas de fonctions E et des ensembles X "très gros" et très complexes. Dans ces cas-là, on ne peut pas dessiner pour voir ce qui se passe.

C'est là que des méthodes mathématiques performantes ont été inventées pour décider si l'on est devant un cas de type f_1, f_2 ou f_3. On peut ainsi traiter beaucoup de cas, pas tous malheureusement.

Une fois qu'on a trouvé que le modèle est bon, c'est-à-dire que l'on est devant une fonction de type f_2 ou f_3, qui atteint son minimum, il faut trouver ce point de minimum. Et pour cela, vu la complexité des fonctions en jeu, il faut utiliser l'ordinateur pour faire des calculs numériques.

Et là, pour réaliser ce programme de calcul, il faut souvent une bonne collaboration des mathématiciens et des chimistes (ou physiciens) pour aboutir à quelque chose de raisonnable.

Voici donc comment un mathématicien peut aider à la synthèse d'un nouveau médicament ou à trouver un nouveau matériau qui a des propriétés de conductivité particulières intéressantes. Il intervient à plusieurs moments du processus total.

Et son travail consiste en fait à "résoudre" un problème de minimisation d'une fonction donnée dans un certain ensemble.

Problème simple apparemment, mais très compliqué dans la pratique. De nouvelles mathématiques très sophistiquées ont été développées récemment pour attaquer ce type de problèmes. Il s'agit d'un domaine en plein développement, qui est loin d'être clos. Ni du point de vue de la chimie ni de la physique.

Et il s'agit d'un domaine où l'interdisciplinarité, la collaboration entre divers domaines scientifiques, est fondamentale pour l'avancement de la science.

Traitement d'images et de films.

Dans de nombreuses situations de la vie, on se trouve actuellement avec des images que l'on voudrait plus claires, plus propres. Il s'agit d'images satellite, de vieux films, d'images radars. Souvent les objets qu'on souhaite "voir", identifier, classer, compter, ne sont pas clairs, sont cachés derrière du bruit, des taches, des images parasites. Voici un autre domaine où les mathématiques peuvent aider. Il s'agit d'inventer des méthodes efficaces et sûres pour nettoyer les images.

Une image isolée peut être traitée à la main, mais lorsqu'un satellite envoie quotidiennement des milliers d'images, ou un film est à traiter, il faut disposer des méthodes le plus automatiques possibles. Comment les trouver ?

Commençons par décrire ce qu'est une image. Prenons le cas simple d'une image noir et blanc. Il s'agit alors d'un rectangle quadrillé, où certains petits carrés sont noirs et les autres blancs. Plus le nombre de carrés sera grand, plus nette et belle sera l'image. Si l'on appelle Q_1, …, Q_N les petits carrés du quadrillage, une image sera identifiable à une fonction u qui à chaque carré Q_i associe les nombres 0 (blanc) ou 1 (noir).

S'il s'agit d'une image avec du blanc, du noir et de différents niveaux de gris, on sera alors devant une fonction :

$$u : \{ Q_1, \dots , Q_N \} \rightarrow \{0, 0.1, 0.2, \dots , 0.9, 1\}$$

où 0 = blanc
1 = noir
0.1 = gris très clair
0.2 = gris un peu moins clair
etc…

Examinons la différence très visible qui existe entre deux images d'un même cercle noir sur fond blanc en fonction de la quantité de petits carrés Q_i.

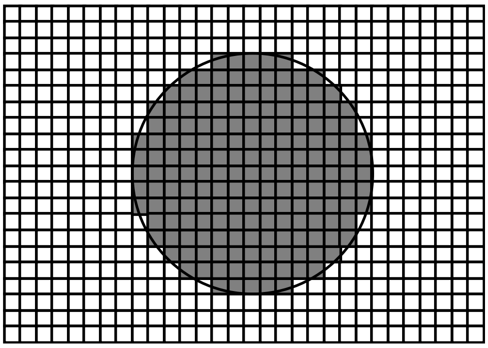


figure 5.1.— Image avec 630 carrés.

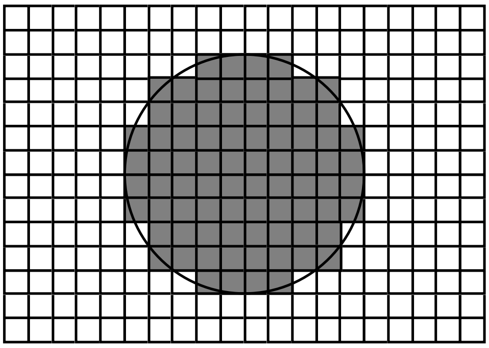


figure 5.2.— Image avec 280 carrés.

Évidemment, la bonne résolution de la première image demande un plus grand nombre de carrés Q_i, donc, plus grande complexité de la fonction u et plus de données à stocker.

Lorsqu'un grand nombre d'images est à traiter, une résolution moyenne, mais pas trop grande est souvent nécessaire afin de limiter l'espace mémoire à utiliser.

Une fois que nous disposons d'une image, c'est-à-dire d'une fonction u, que veut dire l'action de la traiter ? Il s'agit d'une certaine action L qui transforme l'image donnée par u en Lu.

Ceci peut se faire en un certain nombre d'étapes :

$$u = u_0 \xrightarrow{L_1} u_1 \xrightarrow{L_2} u_2 \ \ldots$$

En général, un traitement peut se faire avec divers paramètres, avec plus ou moins de résolutions, etc … Ceci veut dire que partant d'une image $u(0)$, nous la traitons par le traitement L_t et nous obtenons ainsi une image $u(t)$. Plus formellement nous pouvons écrire :

$$u(t) = L_t\, u(0)$$

et $u(t)$ sera l'image $u(0)$ traitée à résolution t, où $t > 0$.

Les buts d'un traitement d'image peuvent être divers, mais un des buts les plus courants est celui du nettoyage, de l'enlèvement du bruit, du gommage des impuretés, des imperfections.

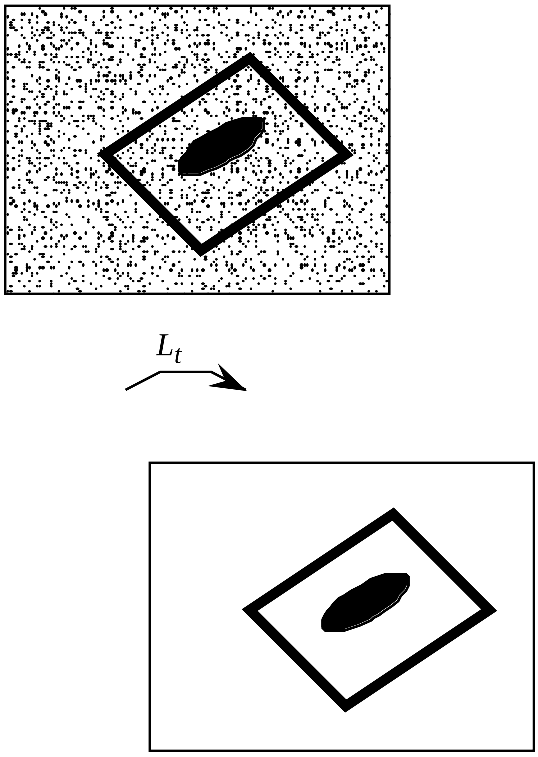


figure 6.

Selon le traitement que l'on veut faire à une image, il faut exiger des propriétés différentes au traitement en question. Certaines propriétés sont toujours requises et semblent bien naturelles. Citons-en quelques-unes :

1) Commutativité du traitement avec

- agrandissements / réductions.
- changements de contraste.

2) Conservation des relations d'ordre entre les objets. C'est-à-dire, si un objet est à l'intérieur d'un autre avant traitement, il doit le rester aussi après.

Nous pouvons représenter ces propriétés par le diagramme suivant :

$$\begin{tikzcd}
u(0) \arrow[r, "L_t"] \arrow[d, "R"'] & u(t) = L_t\, u(0) \arrow[d, "R"] \\
R\, u(0) \arrow[r, "L_t"] & L_t\,(\, Ru(0)\,) = R\, u(t)
\end{tikzcd}$$

où R = agrandissement, réduction, changement de contraste, de luminosité, etc …

Il se trouve que le fait que le diagramme ci-dessus ait lieu pour un certain nombre de transformations R permet d'identifier la fonction L_t, le traitement d'images recherché.

Ceci a été démontré récemment par un groupe de mathématiciens du CEREMADE (Département de Mathématiques Appliquées de l'Université Paris-Dauphine et équipe associée au CNRS, URA 749).

Il a été aussi clairement mis en évidence que l'augmentation du nombre des transformations R à considérer améliore sensiblement la qualité du traitement en question.

Il a été prouvé que L_t est donné par la résolution d'une équation mathématique. Diverses équations ont été utilisées, avec des améliorations sensibles dans les dernières années. Pour l'exemple, donnons des équations assez utilisées pour le traitement (nettoyage d'images) :

Années 70 : $\dfrac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = 0$

Années 80 : $\dfrac{\partial u}{\partial t} - \dfrac{\Delta u}{|\nabla u|^2} = 0$

Années 90 : $\dfrac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}\left(\dfrac{\nabla u}{|\nabla u|}\right) = 0$

où : $\Delta u = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial x_2^2}$; $\nabla u = \left(\dfrac{\partial u}{\partial x_1} , \dfrac{\partial u}{\partial x_2}\right)$;

$$\operatorname{div}\left(v_1 , v_2\right) = \frac{\partial v_1}{\partial x_1} + \frac{\partial v_2}{\partial x_2} .$$

Ces trois équations, appliquées à une image initiale $u(0)$ donnée, permettent de trouver au temps t une image $u(t)$.

Voyons sur un exemple la différence entre ces trois traitements …

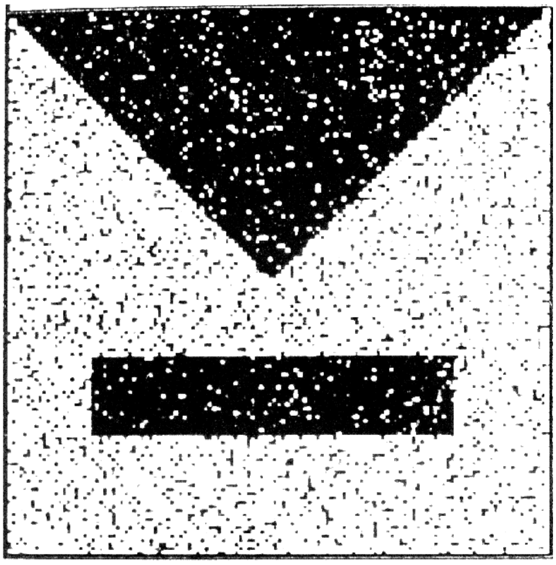


figure 7.1. — image faiblement bruitée

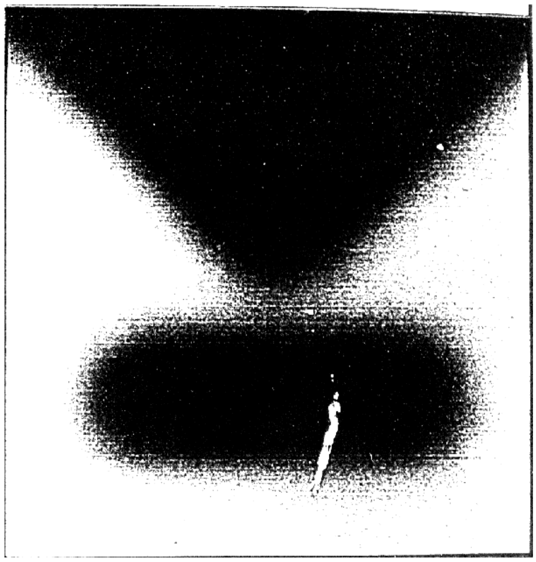


figure 7.2. — image traitée, années 70.

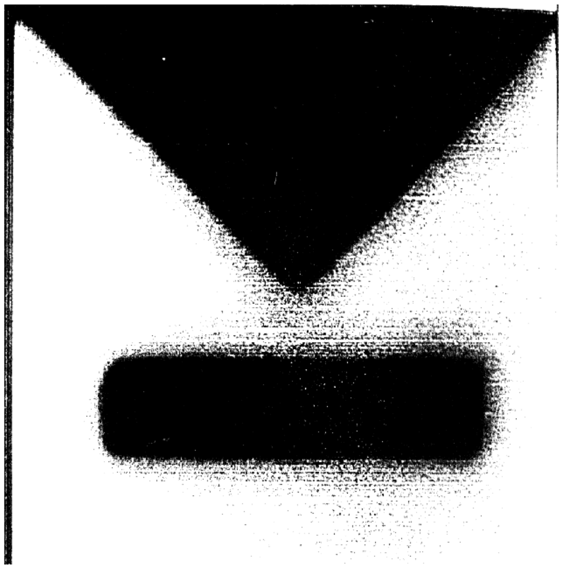


figure 7.3. — image traitée, années 80.

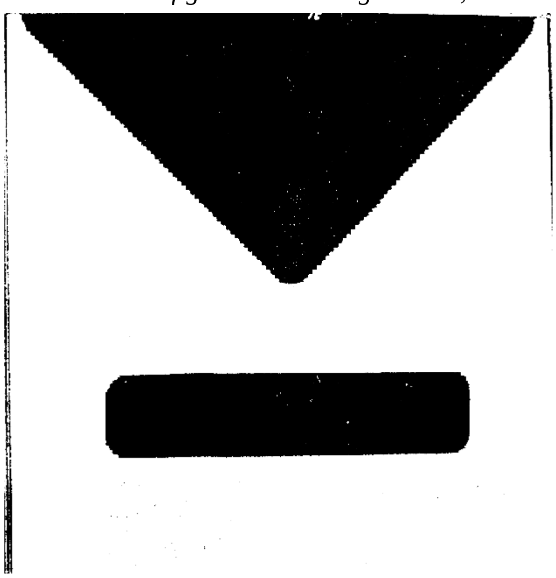


figure 7.4. — image traitée, années 90.

La différence des trois traitements est notoire. Plus on a considéré des traitements performants, ayant plus de propriétés a priori, meilleur a été le résultat. Et cette différence peut se lire sur les trois équations qui sont à la base du traitement.

Ce nettoyage d'image a été fait à l'aide des mathématiques, en utilisant des équations inventées à cet effet et les résolvant analytiquement et par ordinateur. Des mathématiciens se sont donc associés à des ingénieurs, à des informaticiens et de cette collaboration naît une méthode qui permet le traitement systématique et fiable d'images médicales (scanner, échographies, etc ...), d'images satellite, etc ...

Pour finir, montrons encore sur le même exemple que tout à l'heure, mais à partir d'une image beaucoup plus "sale" et méconnaissable ce que ce type de traitement d'images peut faire, allant parfois au-delà des capacités de l'œil humain :

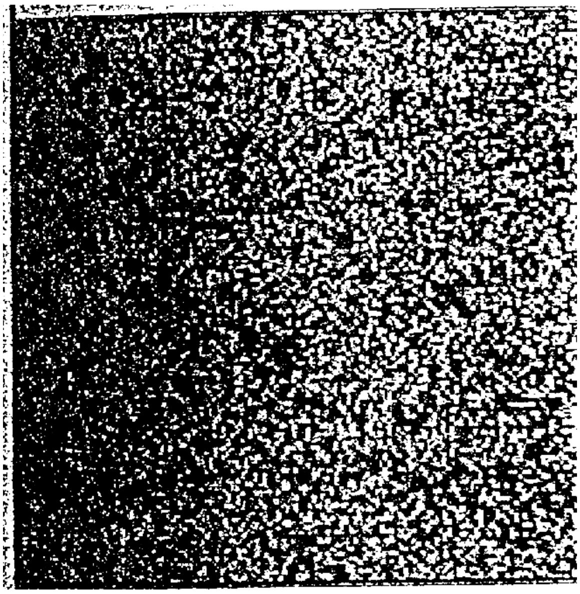


figure 8.1. — image fortement bruitée.

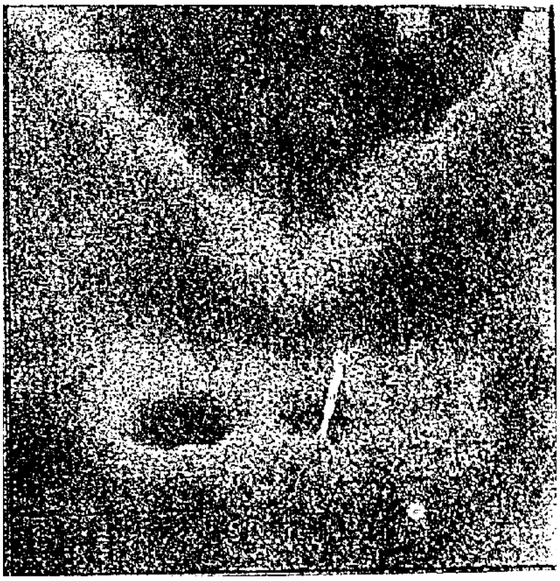


figure 8.2. — image traitée, années 80.

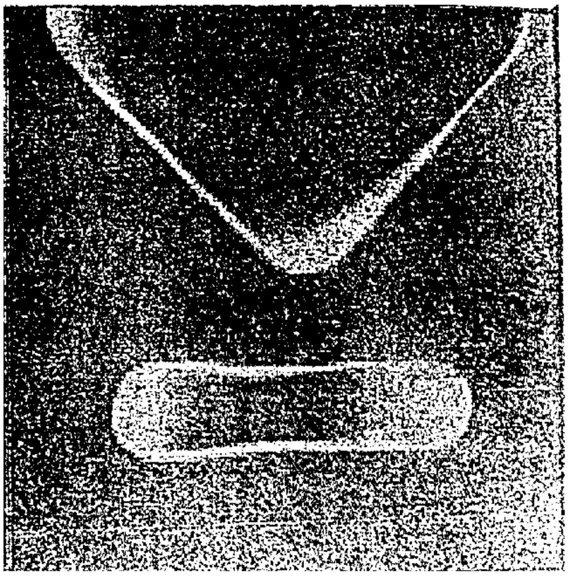


figure 8.3. — image traitée, années 90.

Étonnant, n'est-ce pas ?

Voilà donc un autre domaine où les mathématiques peuvent aider à résoudre des problèmes importants.

En conclusion, je voudrais simplement indiquer que les mathématiques interviennent dans un grand nombre de situations, parfois de manière surprenante, et que de plus en plus elles servent à résoudre des problèmes réels. Elles ont déjà commencé comme cela, aux temps anciens, pour aider les hommes avec les mesures, les transactions, les constructions. Et maintenant, dans une période de grandes avancées technologiques, les mathématiques peuvent encore aider les autres sciences à se développer et les hommes à comprendre le monde et l'améliorer.

Remerciements.

Je souhaiterais remercier l'équipe de mathématiciens qui au CEREMADE travaillent sur le traitement d'images. Ils ont mis à ma disposition tout le matériel que j'ai utilisé pour préparer la deuxième partie de cet exposé.