Modélisation d'écosystèmes I: équations mathématiques

UE modélisation et quantification

Céline Casenave
UMR INRA-SupAgro 0729 MISTEA, Montpellier France,
celine.casenave@supagro.inra.fr

Modélisation d'écosystèmes
Plan de la première partie

1. Introduction
2. Démarche de modélisation
3. Schéma conceptuel
4. Formulation mathématique des processus

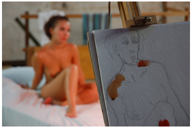
Partie 1: Introduction

Qu'est ce qu'un modèle?

Exemples de modèles

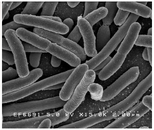
Dans la vie de tous les jours:

- modèle de réussite
- modèle de peintre
- modèle réduit, maquette

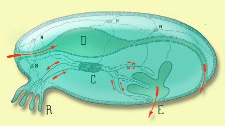


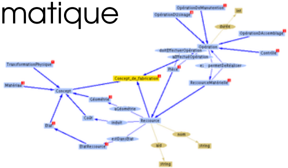
En sciences:

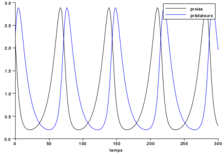
- organisme modèle
- modèle graphique
- modèle informatique
- modèle mathématique



$$\begin{cases} \dot{x} & = & ax - bxy \\ \dot{y} & = & -cy + dxy \end{cases}$$







Qu'est ce qu'un modèle?
Définitions

Minsky, 1965

*"Pour un observateur, un objet M est un modèle d'un objet O dans la mesure où l'observateur peut utiliser M **pour répondre à des questions qui l'intéressent au sujet de O**"*

Drouin, 1988

*"Le modèle est "quelque chose" (objet concret, représentation imagée, système d'équations...) qui **se substitue au réel** trop complexe, ou inaccessible à l'expérience, et **qui permet de comprendre ce réel** par un intermédiaire plus connu ou plus accessible à la connaissance."*

Qu'est ce qu'un modèle?
Définitions

Legay, 1997

"*Un modèle est ce à quoi on se rapporte* ***pour représenter quelque chose***".

Soler, 2000

Un modèle est "*un* ***cadre représentatif****, idéalisé et ouvert, reconnu* ***approximatif*** *et schématique, mais jugé fécond par rapport à un but donné*", fécond c'est à dire que "*les résultats de mesure (sur le réel) s'avèrent suffisamment conformes aux prédictions du modèle*".

Qu'est ce qu'un modèle?
Définitions

Dans ces définitions, on retrouve les notions de:

- représentation
- approximation de la réalité
- élément de substitution
- utilisation pour répondre à des questions sur le réel

Un modèle est une représentation simplifiée de la réalité utilisée comme outil pour répondre à certaines problématiques spécifiques.

A quoi sert un modèle mathématique?

Rôles d'un modèle mathématique

3 utilisations principales:

1. **améliorer la compréhension** d'un système
2. **prédire le comportement** d'un système
3. réaliser des **expériences numériques** (laboratoire virtuel).

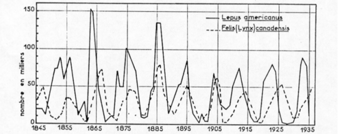


FIG. 54. — *Fluctuations périodiques des populations du lièvre variable* Lepus americanus *et du lynx* Felis canadensis, d'après le nombre de peaux reçues par la Compagnie de la Baie d'Hudson. (D'après MACLULICH, 1937.)

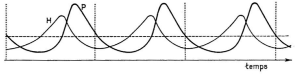
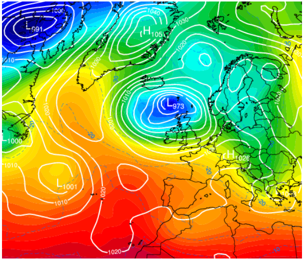
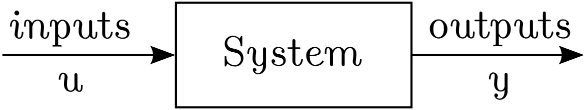


FIG. 109. — *Fluctuations de deux espèces dont l'une dévore l'autre, d'après le modèle de* LOTKA-VOLTERRA. Les variations de H et de P sont en fonction du temps.



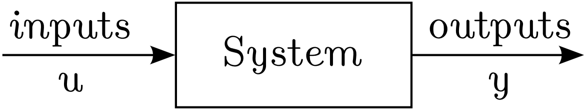
Partie 2: Démarche de modélisation

Comment construire un modèle math.?
Représentation entrée-sortie



Comment construire un modèle math.?

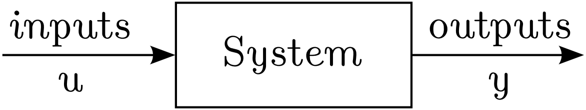
Représentation entrée-sortie



$$u = \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_m \end{bmatrix} \qquad y = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_p \end{bmatrix}$$

Comment construire un modèle math.?

Représentation entrée-sortie



$$u = \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_m \end{bmatrix}$$

Différents modèles:

- empirique/mécaniste
- statique, dynamique
- temporel, spatial
- continu/discret
- stochastique/déterministe
- linéaire/non linéaire
- EDO, EDP, integro-différentielle
- individu-centré, bilan de masse

$$y = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_p \end{bmatrix}$$

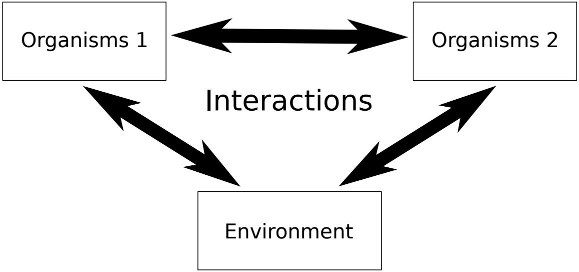
Comment construire un modèle math.?
Choix du modèle

Le choix de construction d'un modèle va dépendre:

- du **type de système** à représenter
- des **connaissances et données** disponibles
- de l'**objectif** du modèle

Modélisation d'écosystèmes
Définition d'un écosystème

Un écosystème
=
ensemble de populations d'organismes vivants
interagissant entre eux
et avec l'environnement dans lequel ils vivent



Modélisation d'écosystèmes
Choix de construction

Objectif: améliorer la compréhension de la dynamique des écosystèmes en validant des hypothèses par comparaison aux données

Connaissances et données: disponibles grâce aux études précédentes

Type de modèles: systèmes d'équations différentielle ordinaires, a priori non linéaires

$$\frac{dX}{dt} = f(X, E)$$

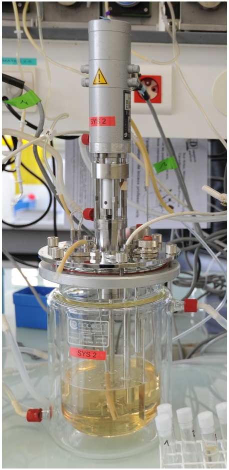
X vecteur des variables d'état de l'écosystème
E variables externes

Modélisation d’écosystèmes
Eléments d’un modèle d’écosystème

D’après Jorgenson et Fath (2001 - ’*Fundamentals of Ecological Modeling*’), un modèle d’écosystème comprend 5 éléments:

1. **fonctions de forçage ou variables externes**: intensité lumineuse, température, pluviométrie
2. **variables d’état**: organismes vivants (poissons, bactéries, plantes, etc...) et éléments chimiques (azote, phosphore, etc)
3. **équations mathématiques**
4. **paramètres**: coefficients dans les équations
5. **constantes universelles**: constante des gaz parfaits, masses molaires

Modélisation d’écosystèmes
Exemple



$$\frac{dX}{dt} = \left(\mu(S) - \frac{Q}{V}\right) X$$
$$\frac{dS}{dt} = -k_1 \mu(S) X + \frac{Q}{V} (S_{in} - S)$$

avec $\mu(S) = \mu_{max} \frac{S}{K+S}$

- variables externes: Q, S_{in}
- variables d’état: S, X
- paramètres: μ_{max}, K
- constantes universelles: k_1

Démarche de modélisation

d'après Jorgenson et Fath (2001)

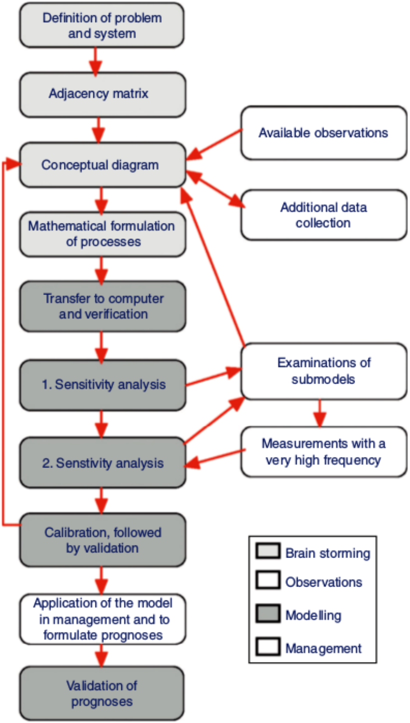


FIGURE 2.2 A tentative modelling procedure is shown. Ideally, as mentioned in the text, one should determine the data collection based on the model, not the other way around. Both possibilities are shown because models in practice have often been developed from available data, supplemented by additional observations. This diagram shows that examinations of submodels and intensive measurements should follow the first sensitivity analysis. Unfortunately, many modellers do not have the resources to do so and instead have bypassed these two steps and even the second sensitivity analysis. It is strongly recommended to follow the sequence of first sensitivity analysis, examinations of submodels and intensive measurements, and second sensitivity analysis. Notice that there are feedback arrows from calibration and validation to the conceptual diagram. The diagram shows that modelling should be considered an iterative process.

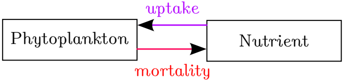
Partie 3: schéma conceptuel

Schéma conceptuel
Des boîtes et des flèches

Dans un schéma conceptuel, on représente:

- les **variables d'état** dans des **boites**: on parle aussi de modèles en boites

- les **transferts de matière entre les boites** par des **flèches**: chaque flèche represente un **processus**



- les **entrées ou sorties de matière** du système, également par des **flèches** qui arrivent ou partent d'une boite

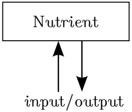
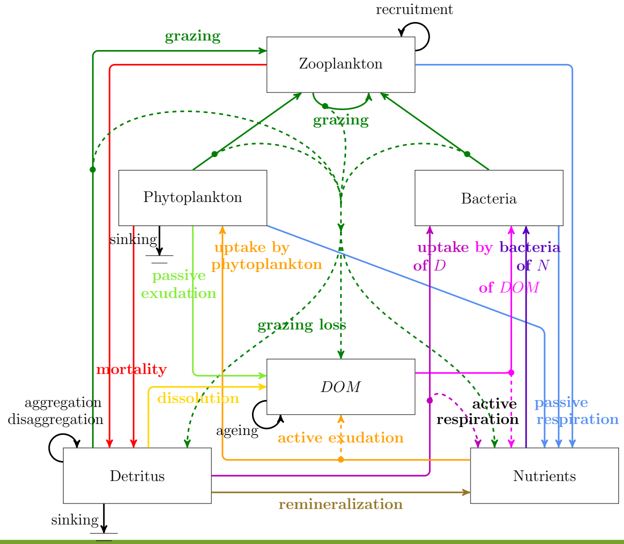


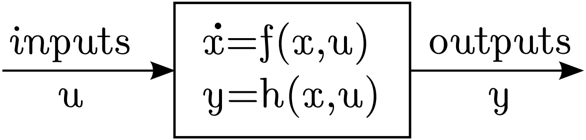
Schéma conceptuel
Un exemple d'un modèle d'écosystèmes lacustres



Partie 4: Formulation mathématique des processus

Référence:
Bastin G., Cours "**Modélisation et analyse des systèmes dynamiques**", Université Catholique de Louvain-la-neuve, Belgique

Modélisation de systèmes dynamiques
Représentation d'état



$$u = \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_m \end{bmatrix} \qquad y = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_p \end{bmatrix}$$

Différents modèles:

- empirique/mécaniste
- statistique, dynamique
- temporel, spatial
- continu/discret
- stochastique/deterministe
- linéaire/non linéaire
- EDO, EDP, integro-differentiel

Modélisation de systèmes dynamiques

Représentation d'état

$$\xrightarrow[u]{\text{inputs}} \boxed{\begin{array}{l} \dot{x} = f(x,u) \\ y = h(x,u) \end{array}} \xrightarrow[y]{\text{outputs}}$$

$$u = \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_m \end{bmatrix} \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad f = \begin{bmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix} \quad h = \begin{bmatrix} h_1 \\ \vdots \\ h_p \end{bmatrix} \quad y = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_p \end{bmatrix}$$

- x = **variable d'état** : $x(t)$ caractérise l'état du système à l'instant t, ce qui signifie que connaissant $x(t)$ (et u) on doit être capable de calculer le futur du système.
- modèle = **modèle ou représentation d'état**

Modélisation d'un schéma réactionnel

Qu'est ce que c'est?

Schéma réactionnel d'une réaction
= l'ensemble des réactions biologiques et chimiques élémentaires qui composent une réaction

Exemple: décomposition du dioxyde d'azote en monoxyde d'azote et oxygène:

$$2NO_2 \longrightarrow 2NO + O_2$$

peut être décomposée en 2 réactions élémentaires:

$$\begin{array}{cccc} 2NO_2 & \longrightarrow & \boxed{NO_3} & + \; NO \\ \boxed{NO_3} & \longrightarrow & NO & + \; O_2 \end{array}$$

Modélisation d'un schéma réactionnel
Composants caractéristiques

Représentation générique:

r **réactions élémentaires** avec *n* **espèces** X_i

$$\sum_{i=1}^{n} \gamma_{ij} X_i \longrightarrow \sum_{i=1}^{n} \delta_{ij} X_i, \quad j = 1 : r, \quad \gamma_{ij} \geqslant 0, \quad \delta_{ij} \geqslant 0.$$

- γ_{ij}, δ_{ij} = **coefficients stoechiométriques**
- **réactifs** de la $j^{\text{ème}}$ réaction = espèces telles que $\gamma_{ij} > \delta_{ij}$
- **produits** de la $j^{\text{ème}}$ réaction = espèces telles que $\gamma_{ij} < \delta_{ij}$
- **catalyseurs** de la $j^{\text{ème}}$ réaction = espèces telles que $\gamma_{ij} = \delta_{ij}$
- **cinétiques des réactions** = vitesse des réactions: $r_j, \; j = 1 : r$

Modélisation d'un schéma réactionnel
Composants caractéristiques

Exemple: décomposition du dioxyde d'azote en monoxyde d'azote et oxygène:

$$
\begin{array}{lcccc}
2NO_2 & \longrightarrow & 1NO_3 & + & 1NO \\
1NO_3 & \longrightarrow & 1NO & + & 1O_2
\end{array}
$$

- réactifs: NO_2, NO_3
- produits: NO_3, NO, O_2
- pas de catalyseur
- coefficients stoechiométriques en rouge, qui signifient: "2 moles de NO_2 produira 1 mole de NO_3 et 1 mole de NO" (première réaction)

Modélisation d'un schéma réactionnel

Catalyseurs et autocatalyseurs

Représentation de la $j^{\text{ème}}$ réaction élémentaire:

$$\sum_{i=1}^{n} \gamma_{ij} X_i \longrightarrow \sum_{i=1}^{n} \delta_{ij} X_i$$

Si $\gamma_{kj} \neq 0$ et $\delta_{kj} \neq 0$, alors X_k est:

un **catalyseur** si $\gamma_{kj} = \delta_{kj}$	un **autocatalyseur** si $\gamma_{kj} < \delta_{kj}$

Représentation équivalente:

$$\sum_{i=1, i \neq k}^{n} \gamma_{ij} X_i \xrightarrow[X_k]{} \sum_{i=1, i \neq k}^{n} \delta_{ij} X_i + (\delta_{kj} - \gamma_{kj}) X_k$$

Modélisation d'un schéma réactionnel
Catalyseurs et autocatalyseurs

Exemples:

- **Catalyse**: réaction de décomposition du peroxyde d'hydrogène (H_2O_2) en ion fer (Fe^{3+})

$$2H_2O_2 \xrightarrow[Fe^{3+}]{} 2H_2O + O_2$$

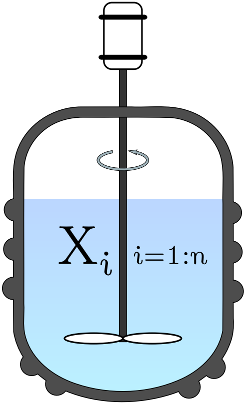
- **Autocatalyse**: Oxydation de la solution d'acide oxalique ($C_2H_2O_4$) par une solution acidifié de permanganate (MnO_4^-):

$$2MnO_4^- + 6H^+ + 5C_2H_2O_4 \xrightarrow[Mn^{2+}]{} 2Mn^{2+} + 10CO_2 + 8H_2O$$

Modélisation d'un schéma réactionnel

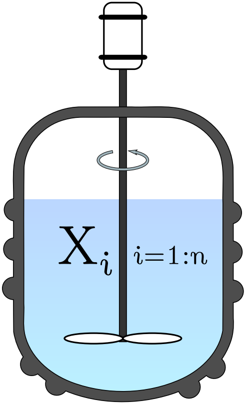
Bilan de masse

Pour la $i^{\text{ème}}$ espèce X_i dans un domaine de **volume** V:



Modélisation d'un schéma réactionnel
Bilan de masse

Pour la $i^{\text{ème}}$ espèce X_i dans un domaine de **volume** V:

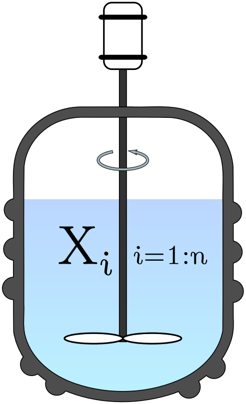


- $x_i(t)$ = **concentration de l'espèce** X_i au temps t dans le domaine.
  $x = (x_1, \ldots, x_n)^T$

Modélisation d'un schéma réactionnel

Bilan de masse

Pour la $i^{\text{ème}}$ espèce X_i dans un domaine de **volume** V:

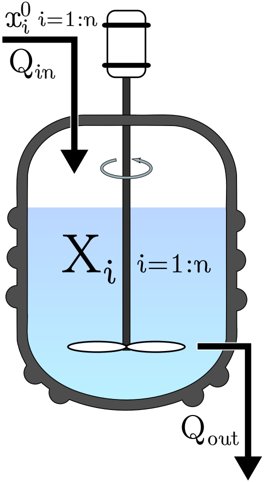


$$\underbrace{\frac{d(x_i V)}{dt}}_{\substack{\text{variation de}\\ \text{la quantité de } X_i\\ \text{par unité de temps}}} = \underbrace{\sum_{j=1}^{r} \left[\delta_{ij} - \gamma_{ij}\right] r_j(x) V}_{\substack{\text{production}-\text{consommation}\\ \text{au cours de la réaction}\\ \text{par unité de temps}}}$$

- $x_i(t)$ = **concentration de l'espèce** X_i au temps t dans le domaine. $x = (x_1, \ldots, x_n)^T$

Modélisation d'un schéma réactionnel
Bilan de masse

Pour la $i^{\text{ème}}$ espèce X_i dans un domaine de **volume** V:



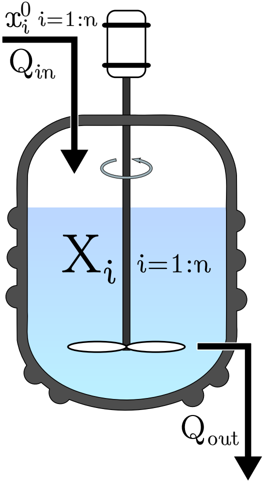
$$\underbrace{\frac{d(x_i V)}{dt}}_{\substack{\text{variation de} \\ \text{la quantité de } X_i \\ \text{par unité de temps}}} = \underbrace{\sum_{j=1}^{r} \left[\delta_{ij} - \gamma_{ij}\right] r_j(x) V}_{\substack{\text{production}-\text{consommation} \\ \text{au cours de la réaction} \\ \text{par unité de temps}}}$$

- $x_i(t)$ = **concentration de l'espèce** X_i au temps t dans le domaine. $x = (x_1, \ldots, x_n)^T$
- $x_i^0(t)$ = **concentration en entrée de** X_i au temps t (dans le milieu d'alimentation)
- Q_{in} et Q_{out} = **débits entrant et sortant**

Modélisation d'un schéma réactionnel

Bilan de masse

Pour la $i^{\text{ème}}$ espèce X_i dans un domaine de **volume** V:



$$\underbrace{\frac{d(x_i V)}{dt}}_{\substack{\text{variation de} \\ \text{la quantité de } X_i \\ \text{par unité de temps}}} = \underbrace{\sum_{j=1}^{r} [\delta_{ij} - \gamma_{ij}]\, r_j(x) V}_{\substack{\text{production}-\text{consommation} \\ \text{au cours de la réaction} \\ \text{par unité de temps}}} + \underbrace{Q_{in} x_i^0 - Q_{out} x_i}_{\substack{\text{flux entrant}-\text{flux sortant} \\ \text{par unité de temps}}}$$

- $x_i^0(t)$ = **concentration en entrée de** X_i au temps t (dans le milieu d'alimentation)
- Q_{in} et Q_{out} = **débits entrant et sortant**

Modélisation d'un schéma réactionnel

Représentation d'état

Pour les n espèces X_i de la réaction dans un domaine de volume V:

$$\begin{cases} \dfrac{d(x_i V)}{dt} = \displaystyle\sum_{j=1}^{r} \left[\delta_{ij} - \gamma_{ij}\right] r_j(x) V + Q_{in} x_i^0 - Q_{out} x_i \\ \dfrac{dV}{dt} = Q_{in} - Q_{out} \end{cases}$$

Modélisation d'un schéma réactionnel
Représentation d'état

Pour les n espèces X_i de la réaction dans un domaine de volume V:

$$\begin{cases} \dfrac{d(x_i V)}{dt} = \displaystyle\sum_{j=1}^{r} \left[\delta_{ij} - \gamma_{ij}\right] r_j(x) V + Q_{in} x_i^0 - Q_{out} x_i \\ \dfrac{dV}{dt} = Q_{in} - Q_{out} \end{cases}$$

Avec $\dfrac{d(x_i V)}{dt} = x_i \dfrac{dV}{dt} + V \dfrac{dx_i}{dt}$:

$$\boxed{\begin{cases} \dfrac{dx_i}{dt} = \displaystyle\sum_{j=1}^{r} \left[\delta_{ij} - \gamma_{ij}\right] r_j(x) + \dfrac{Q_{in}}{V} \left(x_i^0 - x_i\right) \\ \dfrac{dV}{dt} = Q_{in} - Q_{out} \end{cases}}$$

Modélisation d'un schéma réactionnel
Représentation d'état

Pour les n espèces X_i de la réaction dans un domaine de volume V:

$$\boxed{\left\{\begin{array}{rcl} \dfrac{dx}{dt} & = & Cr(x) + \dfrac{Q_{in}}{V}\left(x^0 - x\right) \\ \dfrac{dV}{dt} & = & Q_{in} - Q_{out} \end{array}\right.}$$

où:
- C est la **matrice stoechiométrique**: $C = \left[\delta_{ij} - \gamma_{ij}\right]_{i,j}$
- $(x, V)^T = (x_1, \dots, x_n, V)^T$: vecteur des **variables d'état**
- $r(x) = (r_1(x), \dots, r_n(x))^T$: vecteur des **vitesses de réaction**
- $(x^0)^T = (x_1^0, \dots, x_n^0)^T$

Modélisation d'un schéma réactionnel
Représentation d'état

Exemple: décomposition du dioxyde d´azote en monoxyde d´azote et en oxygène:

$$\begin{array}{lccccccc} \text{réaction 1:} & 2NO_2 & \longrightarrow & 1NO_3 & + & 1NO \\ \text{réaction 2:} & 1NO_3 & \longrightarrow & 1NO & + & 1O_2 \end{array}$$

$$\boxed{\left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{dx}{dt} & = & \begin{bmatrix} -2 & 0 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_1(x) \\ r_2(x) \end{bmatrix} + \dfrac{Q_{in}}{V}\left(x^0 - x\right) \\ \dfrac{dV}{dt} & = & Q_{in} - Q_{out} \end{array} \right.}$$

avec: $x = (NO_2, NO_3, NO, O_2)^T$

Modélisation d'un schéma réactionnel
Cinétique de réaction

Hypothèses sur r_j, la vitesse de réaction de la $j^{\text{ème}}$ réaction élémentaire:

1. r_j ne dépend que de x
2. $r_j(x) \geqslant 0, \forall x \in \mathbb{R}_+^n$
3. $r_j(x) = 0$ si $x_i = 0$ pour tout i tel que $\gamma_{ij} > \delta_{ij}$ (i.e. pour tous les réactifs de la $j^{\text{ème}}$ réaction)

Loi d'action de masse:

$$r_j(x) = k_j \prod_{i \text{ t.q. } \gamma_{ij} > \delta_{ij}} x_i^{\gamma_{ij}}$$

Modélisation d'un schéma réactionnel
Cinétique de réaction

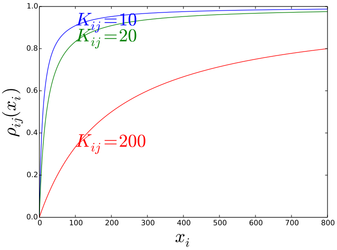
Généralisation de la loi d'action de masse:

$$r_j(x) = k_j \prod_{\substack{i \text{ tel que} \\ \gamma_{ij} > \delta_{ij}}} \rho_{ij}(x_i)$$

avec $\rho_{ij} : \mathbb{R}^+ \mapsto \mathbb{R}^+$ telle que $\begin{cases} \bullet \quad \rho_{ij}(x_i) \geqslant 0, \forall x_i \geqslant 0 \\ \bullet \quad \rho_{ij}(0) = 0 \end{cases}$

fonction de Michaelis-Menten:

$$\rho_{ij}(x_i) = \frac{x_i}{K_{ij} + x_i}$$



Modélisation d'un schéma réactionnel

Cinétique de réaction: inhibition et catalyse

Généralisation de la loi d'action de masse:

$$r_j(x) = k_j \prod_{\substack{i \text{ tel que} \\ \gamma_{ij} > \delta_{ij}}} \rho_{ij}(x_i) \prod_{\substack{i \text{ tel que} \\ x_i \text{ inhibiteur}}} \rho^I_{ij}(x_i) \prod_{\substack{i \text{ tel que} \\ x_i \text{ catalyseur} \\ \text{ou autocatalyseur}}} \rho^A_{ij}(x_i)$$

avec $\rho_{ij} : \mathbb{R}^+ \mapsto \mathbb{R}^+$ telle que
- $\rho_{ij}(x_i) \geqslant 0, \ \forall x_i \geqslant 0$
- $\rho_{ij}(0) = 0$

Inhibiteurs:

$$\rho^I_{ij}(x_i) = \frac{K_{ij}}{K_{ij} + x_i} \text{ or } e^{-K_{ij} x_i}$$

Notez que $\rho^I_{ij}(0) = 1 \neq 0$

Catalyseurs et autocatalyseurs:

$\rho^A_{ij}(x_i)$ fonction croissante t.q.:

- $\rho^A_{ij}(0) = 0$ si X_i est un activateur de la réaction.
- $\rho^A_{ij}(0) = 1$ sinon

Modélisation d'un schéma réactionnel
Cinétique de réaction

Exemple: (1)

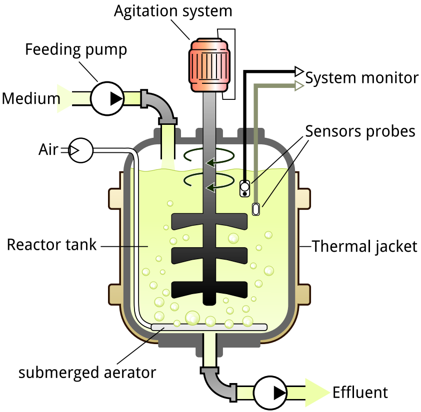
$$\begin{array}{rcl} X_1 + X_2 & \longrightarrow & 2X_3 \\ 2X_3 & \longrightarrow & X_4 \end{array}$$

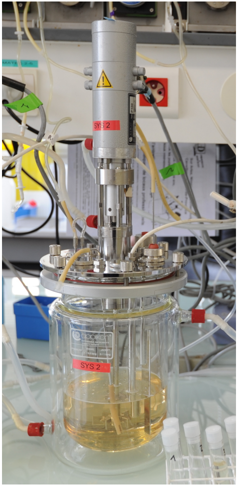
+ inhibition de la première réaction par X_4

Cinétique de réaction:

$$\begin{array}{rcl} r_1(x) & = & k_1 x_1 x_2 e^{-K x_4} \\ r_2(x) & = & k_2 x_3^2 \end{array}$$

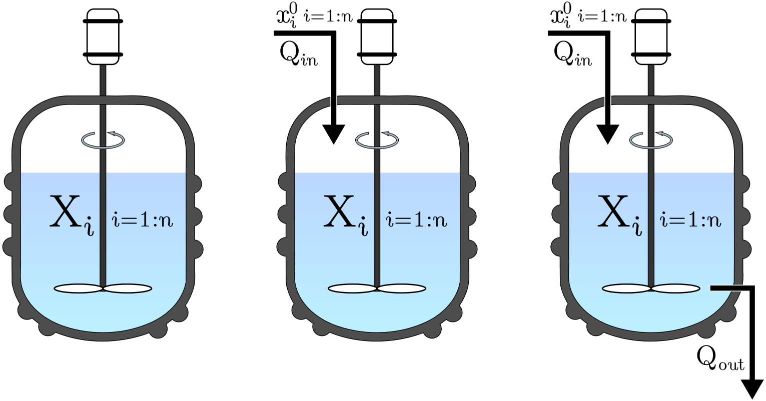
Modélisation d'un bioréacteur
Différents types de réacteurs





Modélisation d'un bioréacteur

Différents types de réacteurs



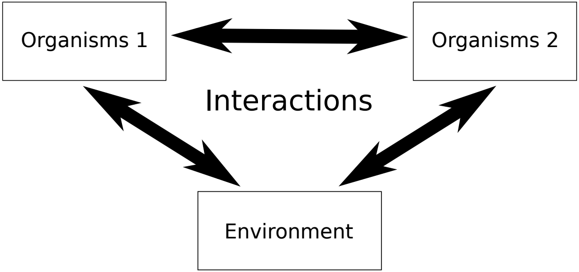
Batch
$Q_{in} = Q_{out} = 0$
V constant

Fed-batch
$Q_{out} = 0$
V variable

Continu
$Q_{in} = Q_{out} \neq 0$
V constant

Modélisation d'un écosystème
Définition d'un écosystème

Un écosystème
=
ensemble de populations d'organismes vivants
interagissant entre eux
et avec l'environnement dans lequel ils vivent



Modélisation d'un écosystème
Un schéma réactionnel particulier

Croissance d'une population d'organismes vivants X se nourrissant sur Y:

$$kY \underset{X}{\longrightarrow} X$$

- X = autocatalyseur et activateur de la réaction de croissance
- Y = un nutriment ou un autre organisme vivant (prédation)

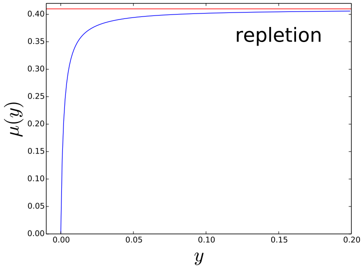
Cinétique de réaction: $\boxed{r(x,y) = \underbrace{\mu(y)}_{\text{taux de croissance}} x}$

avec $\mu(y) \geqslant 0,\ \forall (y) \in \mathbb{R}_+$, et $\mu(0) = 0$

Modélisation d'un écosystème
Un schéma réactionnel particulier

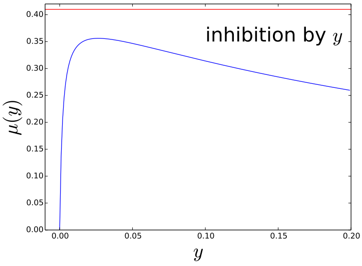
Exemple de taux de croissance

fonction de Monod



$$\mu(y) = \mu_{max} \frac{y}{K+y}$$

fonction de Haldane



$$\mu(y) = \mu_{max} \frac{y}{K+y+K_I y^2}$$