



**HAL**  
open science

# Dynamiques microbiennes et modélisation des cycles biochimiques terrestres

Ihab Haidar

► **To cite this version:**

Ihab Haidar. Dynamiques microbiennes et modélisation des cycles biochimiques terrestres. Mathématiques [math]. Université Montpellier 2 (Sciences et Techniques), 2011. Français. NNT: . tel-02803575

**HAL Id: tel-02803575**

**<https://hal.inrae.fr/tel-02803575>**

Submitted on 5 Jun 2020

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

**UNIVERSITÉ MONTPELLIER II**  
**SCIENCES ET TECHNIQUES DU LANGUEDOC**

**THÈSE**

pour obtenir le grade de

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ MONTPELLIER II**

Ecole doctorale : Informations, Structures et Systèmes

Formation doctorale : Mathématiques

Spécialité : Mathématiques Appliquées et Application des Mathématiques

**Ihab HAIDAR**

**DYNAMIQUES MICROBIENNES ET MODÉLISATION DES CYCLES**

**BIOGÉOCHIMIQUE TERRESTRES**

Soutenue le 14 Décembre 2011, devant le jury composé de :

Mohamed	AZAROUAL	BRGM-Orléans	Examineur
Terence	BAYEN	Université Montpellier II	Examineur
Jean-Raynald	DE DREUZY	CNRS-Rennes	Rapporteur
Frédéric	GÉRARD	INRA-Montpellier	Co-Directeur
Jean-Luc	GOUZÉ	INRIA-Sophia Antipolis	Rapporteur
Alain	RAPAPORT	INRA-Montpellier	Directeur



# REMERCIEMENTS

---

*Je dédie ce travail à la mémoire de ma grand-mère...*

Je tiens d'abord à remercier mon directeur de thèse Alain Rapaport. Il y a maintenant trois ans que tu m'as permis de me diriger vers l'écologie mathématique. Durant cette période, tu m'as laissé une grande autonomie tout en sachant me guider. Je n'oublie pas le nombre d'heures que tu as consacré pour relire les différentes versions de cette thèse.

J'arrive naturellement à mon codirecteur de thèse Frédéric Gérard. Je te remercie pour le temps que tu as consacré pour me montrer le domaine de la modélisation des écosystèmes du sol et surtout le temps que tu m'as donné pour me familiariser avec le logiciel de MIN3P.

Je remercie vivement Jean-Luc Gouzé et Jean-Raynald De Dreuzy, d'avoir accepté d'évaluer ce travail. Mohamed Azaroual et Terence Bayen de m'avoir fait l'honneur d'avoir accepté de participer à ce jury.

Je remercie également les membres de l'équipe MODEMIC, vous étiez une vraie famille. Ainsi je remercie Philippe Naudin, Maria Trouche, Cécile Louche et Véronique Sals-Vettorel pour tous leurs services durant ces trois ans.

Je remercie Mes parents, ma soeur Souheir et mes frères Bassem et Rawad, pour leur amour, leur persévérance et leur soutien depuis toujours. Qu'ils trouvent ici le témoignage de ma reconnaissance et de mon amour.

Je n'oublie pas mes meilleures amis, Samer, Hussein-ali, Hussein-toucour, Ahmoud, Aboushreif, Hanhoun et Ali Abdallah avec qui j'ai paratagé des moments distingués et que c'est grâce à eux que je suis arrivé là et je continue mes recherches.

Quels mots suffiraient pour remercier Waed, ma compagne et ma plus fidèle lectrice ! Merci de me soutenir dans les bons comme les mauvais moments avec tout ton amour. Je t'aime ...

Ihab Haidar

ihabhaidar@yahoo.fr

Projet INRA-INRIA MODEMIC– UMR MISTEA, INRA Montpellier

# Table des matières

<b>Remerciements</b>	<b>iii</b>
<b>Figures</b>	<b>1</b>
<b>1 Deux approches pour modéliser un écosystème microbien de type sol</b>	<b>5</b>
1.1 Résumé . . . . .	5
1.2 Introduction . . . . .	6
1.3 Modèles du transport réactif . . . . .	7
1.3.1 Système physico-chimique conceptuel . . . . .	7
1.3.2 Processus de transport et réactions géochimiques dans le sol . . . . .	7
1.3.3 Mouvement de l'eau dans un sol variablement saturé . . . . .	9
1.3.4 Equations fondamentales du transport réactif . . . . .	10
1.3.5 Prise en compte des lois cinétiques microbiennes . . . . .	13
1.3.6 Couplage et échelles spatiaux-temporelles . . . . .	17
1.3.7 Exemple d'un modèle du transport réactif . . . . .	17
1.4 Entre les modèles de sol et le chemostat . . . . .	21
1.5 Approche par le modèle du chemostat . . . . .	23
1.5.1 Définition du chemostat . . . . .	23
1.5.2 Modèle pour une espèce . . . . .	25
1.5.3 Compétition dans le chemostat . . . . .	26
1.5.4 Analyse mathématique . . . . .	27
1.5.5 Modèles spatialement structurés . . . . .	30
1.5.6 Extensions de modèle du chemostat . . . . .	31
1.6 Conclusion . . . . .	35
<b>2 Comparaison des simulations numériques d'un modèle de transport réactif avec des modèles de type chemostat</b>	<b>37</b>
2.1 Résumé . . . . .	37
2.2 Introduction . . . . .	38
2.3 Matériel et méthode . . . . .	39
2.4 Résultats et discussion . . . . .	41
2.4.1 Cas d'une seule espèce . . . . .	42
2.4.2 Cas de deux espèces . . . . .	44
2.5 Stabilité des équilibres . . . . .	47
2.6 Conclusion . . . . .	50

<b>3 Les effets d'une structuration spatiale et de la diffusion sur les performances d'un chemostat</b>	<b>51</b>
3.1 Résumé . . . . .	51
3.2 Introduction . . . . .	52
3.3 Les modèles . . . . .	53
3.4 Analyse des états d'équilibres pour les trois configurations . . . . .	55
3.4.1 Configuration avec un seul compartiment . . . . .	55
3.4.2 Deux compartiments connectés en série . . . . .	55
3.4.3 Deux compartiments interconnectés en parallèle . . . . .	57
3.5 Stabilité exponentielle globale pour l'équilibre non-trivial . . . . .	64
3.5.1 La configuration en série . . . . .	65
3.5.2 La configuration parallèle . . . . .	66
3.6 Généralisation pour une cinétique de croissance de type Monod . . . . .	68
3.7 Simulation numérique et discussion . . . . .	71
3.7.1 Cas d'une cinétique linéaire . . . . .	72
3.7.2 Cas d'une cinétique de type Monod . . . . .	73
3.8 Conclusion . . . . .	75
<b>4 L'effet d'une structuration spatiale sur la stabilité du chemostat pour une croissance non-monotone</b>	<b>77</b>
4.1 Résumé . . . . .	77
4.2 Introduction . . . . .	78
4.3 Définition du problème et notations . . . . .	79
4.4 Analyse du modèle . . . . .	81
4.4.1 Existence et unicité d'un équilibre non-trivial . . . . .	81
4.4.2 Stabilité de l'équilibre non-trivial . . . . .	85
4.4.3 Étude du rendement à l'équilibre . . . . .	87
4.5 Simulation numérique et discussion . . . . .	89
4.6 Conclusion . . . . .	92
<b>5 Conclusion</b>	<b>95</b>
<b>A Annexe</b>	<b>97</b>
A.1 Les systèmes dynamiques . . . . .	97
A.2 Définitions importantes en dynamique du fluide . . . . .	100
<b>Bibliographie</b>	<b>103</b>
<b>Résumé</b>	<b>113</b>

# Table des figures

1.1	Conceptualisation d'un système physico-chimique . . . . .	8
1.2	Cinétiques de type Monod et Haldane, avec $\mu_{max}^i = 5, K_i = 2$ et $I_i = 3$ . . . . .	16
1.3	Gradients des concentrations suivant la profondeur à l'instant $t = 0$ (figure gauche) et $t = 1.10^{-5}$ (figure droite) . . . . .	19
1.4	Gradients des concentrations suivant la profondeur à l'instant $t = 1.10^{-4}$ (figure gauche) et $t = 1.10^{-3}$ (figure droite) . . . . .	20
1.5	Gradients des concentrations suivant la profondeur à l'instant $t = 5.10^{-3}$ (figure gauche) et $t = 1.10^{-2}$ (figure droite) . . . . .	20
1.6	Gradients des concentrations suivant la profondeur à l'instant $t = 5.10^{-2}$ (figure gauche) et $t = 1.10^{-1}$ (figure droite) . . . . .	21
1.7	Gradient de la concentration en oxygène suivant la profondeur à l'instant $t = 1.10^{-5}$ (figure gauche) et $t = 1.10^{-1}$ (figure droite) . . . . .	21
1.8	Un bioréacteur représente une poche d'un sol . . . . .	22
1.9	Un sol poreux peut être vue come un réseau de bioréacteur structuré . . . . .	23
1.10	Un chemostat . . . . .	24
1.11	Un gradostat . . . . .	31
2.1	Une vue schématique d'un chemostat de laboratoire . . . . .	39
2.2	Configuration de trois "contrôle-volume" . . . . .	40
2.3	Comparaison pour trois "contrôle-volume" . . . . .	43
2.4	Comparaison avec plusieurs "contrôle-volume" . . . . .	44
2.5	Deux espèces en compétition dans un seul chemostat . . . . .	46
2.6	Deux espèces en compétition dans un série de chemostats . . . . .	47
3.1	l'ensembles des configurations à étudier. . . . .	54
3.2	Une interconnection possible des compartiments. . . . .	54
3.3	Détermination graphique de $s_2^*$ . . . . .	56
3.4	Détermination graphique de l'équilibre (cas où $\alpha_1 < \alpha_2 < s_{in}$ ). . . . .	59
3.5	La configuration de la zone-morte est un cas particulier de la configuration en parallèle avec $\alpha = 0$ . . . . .	64
3.6	Ensemble de niveau de la fonction $V$ . . . . .	67
3.7	Comparaison des $s_{out}^*$ pour la configuration série. . . . .	72
3.8	Comparaison des $s_{out}^*$ pour la configuration en parallèle ( $s_{in} > 1$ sur la gauche et $s_{in} < 1$ sur la droite). . . . .	73
3.9	Fonctions linéaire et Monod. . . . .	74



3.10	Comparaison de $s_{out}^*$ pour Monod (traits pointillés) et linéaire (traits pleins) pour la configuration série. . . . .	74
3.11	Comparaison de $s_{out}^*$ pour Monod (traits pointillés) et linéaire (traits pleins) pour la configuration parallèle ( $s_{in} > 1$ sur la gauche et $s_{in} < 1$ sur la droite). . . . .	75
4.1	Bi-stabilité avec une cinétique de croissance non-monotone . . . . .	78
4.2	La structure en poche . . . . .	80
4.3	La poche admet un unique équilibre positif et plus petit que $s_{in}$ . . . . .	81
4.4	Plusieurs cas de figure pour : $s_{in} > \lambda_+$ (gauche) et $s_{in} < \lambda_+$ (droite) . . . . .	83
4.5	$s_{in}^-$ est la solution unique de $\mu(s) = \mu(s_{in})$ dans $(0, s_{in})$ . . . . .	88
4.6	La structure en poche garde une concentration positive en biomasse pour $\mu(s) = 10 \frac{s}{1+s+s^2}$ , $s_{in} = 15, r = 0.8$ et $\alpha_1 = 0.4$ . . . . .	90
4.7	comparaison du rendement entre la structure en poche et la structure en un seul compartiment pour $s_{in} = 2.5, r = 0.4$ et $\alpha_1 = 0.3$ . . . . .	91
4.8	comparaison du rendement entre la structure en poche et la structure en un seul compartiment pour $s_{in} = 1.9, r = 0.4, \alpha_1 = 0.8$ et $\theta = 0.98$ . . . . .	91
4.9	Les graphes de $\theta$ par rapport à $\alpha_1$ pour différentes $s_{in}$ . . . . .	92
5.1	La poche de poche . . . . .	96



# Introduction

---

Les activités microbiennes des sols assurent les grandes fonctions de dégradation ou de transformation de matière organique par des micro-organismes, comme la dégradation du carbone sous forme de matière organique, la transformation de l'azote et du phosphore sous des formes assimilables par les plantes, et d'autres phénomènes importants. Comprendre le fonctionnement d'un écosystème microbien est donc un enjeu majeur pour la gestion des ressources et de l'environnement. Cependant ce but reste difficile à atteindre au vu de la complexité des systèmes naturels, tels que les sols où de très nombreux processus de toutes natures interagissent avec des organismes vivants. Pour cela, la modélisation du sol est devenue un champ de recherche important au cours de ces dernières années.

Les modèles numériques de transport réactif proposent une représentation mécaniste des processus géochimiques (spéciation aqueuse, adsorption, dissolution/précipitation, échanges eau-gaz) couplée aux transferts de l'eau, des solutés et des gaz par advection, diffusion et dispersion. Ils fournissent des représentations assez fines de la distribution spatiale de la chimie du sol (par maillage de l'espace et résolution numériques de systèmes d'équations aux dérivées partielles et algébriques). Par contre, les dynamiques microbiennes ne sont pas ou peu considérées dans les équations fondamentales utilisées dans ces modèles.

Les activités microbiennes des sols sont analogues dans leurs principes à la digestion dans les fermenteurs. Il s'agit de populations en très grand nombre d'individus, structurées en communautés en interaction entre elles et en compétition sur des ressources communes. On est donc bien dans un contexte d'écologie. Par contre les spécificités du milieu sol (milieu poreux, triphasique, spatialement structuré,...) comparativement aux milieux plus homogènes de la dépollution en milieu liquide ne permettent pas d'appliquer directement les modèles de bioréacteurs aux écosystèmes terrestres. Une première tentative pour modéliser un écosystème microbien dans le sol, en se basant sur le concept des bioréacteurs, est de considérer cet écosystème comme un ensemble de *hot-spots* microbiens, chacun étant modélisé par un bioréacteur virtuel, interconnectés en réseau.

En partant de cette dernière idée qui constitue l'idée de base du projet VITELBIO, cadre dans lequel s'est déroulée cette thèse, on a d'une part confronté les modèles de transport réactif aux concepts de l'écologie microbienne et d'autre part étudié des questions liées aux effets d'une structuration spatiale et des différents types d'interconnection sur l'activité microbienne dans un bioréacteur structuré.

Le chapitre 1 est consacré à dresser un aperçu de l'état des lieux de deux approches de modélisation des activités microbiennes d'un sol : les modèles numériques de transport réactif et le modèle mathématique du chemostat, qui est couramment utilisé en écologie microbienne. Le chapitre 2 évalue la capacité des modèles du transport réactif et ses implémentations numériques (comme MIN3P) à simuler des simples transformations microbiennes dans les conditions des modèles du chemostat ou du gradostat. Le chapitre 3 étudie l'effet d'une structuration spatiale sur le rendement d'un chemostat à l'équilibre en comparant trois différentes configurations : le parfaitement mélangé, la connection en série et la connection en parallèle avec diffusion. Enfin le chapitre 4 introduit la structure *en poche* qui peut jouer un rôle important dans la stabilisation d'une activité microbienne dans un chemostat à l'équilibre pour des croissances microbiennes non-monotones.

# Chapitre 1

## Deux approches pour modéliser un écosystème microbien de type sol

---

---

### 1.1 Résumé

Ce chapitre est essentiellement consacré à dresser un aperçu de l'état des lieux de deux approches de modélisation des activités microbiennes d'un sol. Les modèles numériques de transport réactif sont capables et performants pour modéliser la biogéochimie d'un milieu poreux variablement saturé en tenant compte de plusieurs paramètres physiques et géochimiques qui régissent les cycles biogéochimiques terrestres. Le modèle mathématique du chemostat est couramment utilisé en écologie microbienne. Dans ce chapitre nous décrirons le modèle de compétition dans le chemostat, ses propriétés asymptotiques ainsi que d'autres processus qui seront utiles dans une optique de confrontation aux modèles numériques de type -transport réactif-. Le modèle de transport réactif MIN3P a été utilisé.

## 1.2 Introduction

Dans les écosystèmes terrestres les sols assurent de multiples fonctions autres que la fonction de production agricole : ils filtrent l'eau, abritent une grande part de la biodiversité microbienne et contiennent des ressources minérales (or, aluminium, fer ...). Ils constituent une composante importante du développement durable des écosystèmes terrestres et des sociétés humaines. Il est donc indispensable qu'ils soient mieux connus par tous pour qu'ils soient mieux gérés dans le futur. Dans ce but, la modélisation dans le sol est devenue un champ de recherche important au cours des dernières années.

Les modèles de transport réactif [13–15, 47, 55, 58, 70, 72, 83, 99] sont très performants pour simuler les transferts de l'eau, des solutés, et des gaz dans un sol sous les effets d'un ensemble de réactions chimiques (spéciation, dissolution/précipitation, adsorption, échanges ioniques...). Les modèles de transport réactif aident par exemple à la compréhension des processus qui contrôlent la composition chimique de l'eau des sols, et donc en grande partie la disponibilité des éléments pour la plante et les micro-organismes. L'objectif principal de cette modélisation est de développer un modèle du transport réactif généralement applicable, qui peut être utilisé pour décrire une large variation de problèmes de transport réactif dans un milieu "poreux variablement saturé". Ces modèles peuvent également être appliqués afin de tester des modèles conceptuels ou comme outil de conception pour des expériences en laboratoire.

Les populations microbiennes dans le sol participent à la transformation des substrats, comme la dégradation de la matière organique et la dénitrification. L'impact de ces populations microbiennes sur les composants du sol et sa structure mérite d'être bien étudié. Les modèles de type chemostat [77,81], et les concepts de l'écologie microbienne (interactions intra- et inter-spécifiques, principes d'exclusion compétitif, biodiversités, ...) sont potentiellement adaptés pour appréhender le fonctionnement des écosystèmes microbiens et sont couramment utilisés en micro-biologie. Avec des modèles du type chemostat, on peut approcher le fonctionnement microbien des sols bien particuliers comme des sols homogènes saturés [37,65] ou des *zone-mortes* [78].

Ce chapitre est organisé comme suit. La section 1.3 fournit un bref résumé sur les modèles du transport réactif, les processus physico-chimiques qui ont lieu dans le sol, l'équation fondamentale de l'écoulement de l'eau, et les équations qui gouvernent le transport réactif dans le sol. La section 1.5 est consacrée à dresser un aperçu de l'état des lieux de la modélisation mathématique de quelques processus biologiques dans le chemostat. Enfin, dans la section 1.3.7, on donne un exemple de modèles de transport

réactif, le modèle “MIN3P”, avec une illustration pour simulation sous MIN3P.

## 1.3 Modèles du transport réactif

### 1.3.1 Système physico-chimique conceptuel

Le sol est un milieu poreux dans lequel l'écoulement de l'eau se fait au sein du réseau poral des vides interstitiels de la phase solide. A l'échelle microscopique, échelle classique de la mécanique de fluides, l'eau représente un milieu continu et les variables définies pour décrire son comportement symbolisent des quantités physiques réelles, mesurables en un point tels que la vitesse de pore ou bien la pression. Cependant, une description fine du milieu poreux à cette échelle s'avère complexe car la complexité géométrique et les hétérogénéités spatiales liées à la structure et la texture du milieu sont importantes. Pour palier cette difficulté de représentation du sol, l'échelle d'étude généralement employée pour l'écoulement de l'eau et le transport de soluté est celle de l'Elément de Volume Représentatif (EVR). L'EVR [4, 60] est défini comme le volume minimal du milieu poreux à partir duquel certaines propriétés intrinsèques de celui-ci apparaissent homogènes. L'EVR pour un modèle de transport réactif comprend trois phases : une phase aqueuse, une phase gazeuse et une phase solide. La phase solide est constituée de minéraux et de matière organique, alors que la phase aqueuse est constituée de l'eau et des espèces dissoutes. La phase gazeuse est composée du gaz de l'atmosphère et peut également contenir d'autres gaz comme le méthane, le sulfure d'hydrogène et le gaz de l'hydrogène. La Figure 1.1 représente la conceptualisation d'un système d'eau souterraine pour le transport réactif dans un milieu poreux variablement saturé. Ce système conceptuel montre que ce milieu comprend des sources internes et externes. Les sources externes sont dues aux processus du transport physique des espèces mobiles de l'extérieur ou bien dans l'EVR. Les débits suivant lesquels les espèces dissoutes et les gaz se transportent sont définis schématiquement sur la Figure 1.1 par  $Q^{a,in}$ ,  $Q^{g,in}$ ,  $Q^{a,out}$  et  $Q^{g,out}$  où  $a$  et  $g$  signifie la phase aqueuse et gazeuse respectivement. D'autre part, les sources internes sont dues à des processus de réactions et décrivent le transfert de masse due aux réactions hétérogènes entre les différentes phases, et sont définis ici par  $Q^{a,s}$ ,  $Q^{a,m}$  et  $Q^{a,g}$  où  $s$  définit les espèces de surface et  $m$  représente les phases minérales.

### 1.3.2 Processus de transport et réactions géochimiques dans le sol

Le transport des solutés en milieux poreux procède par advection, diffusion moléculaire, et par dispersion. Le transport par advection correspond au déplacement des éléments chimiques dissous en même

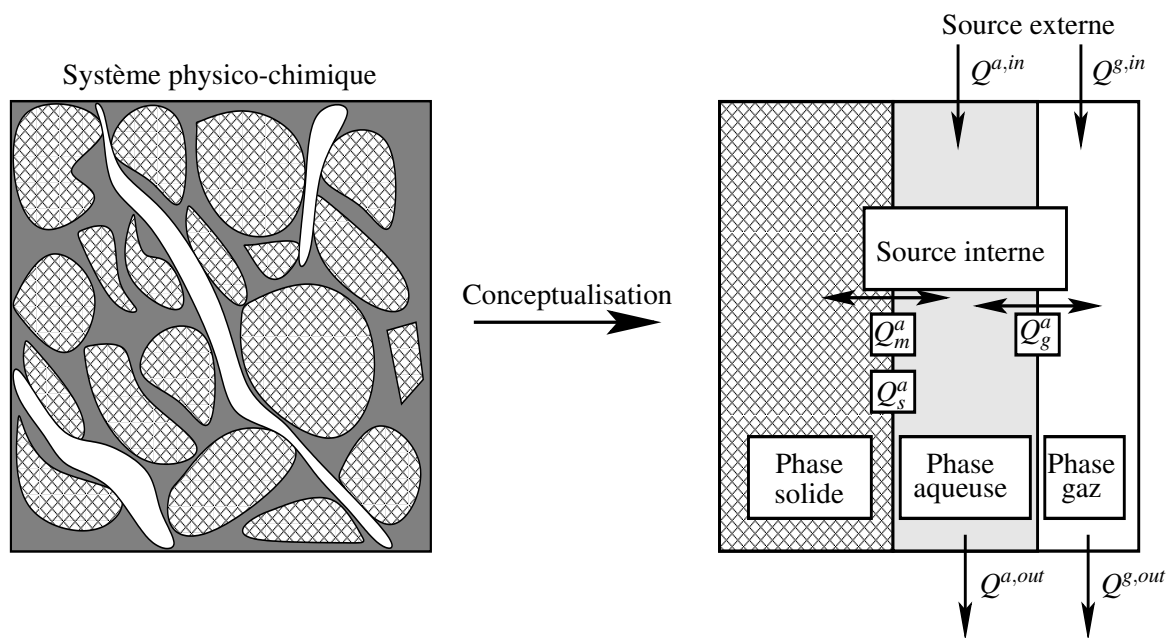


FIG. 1.1 – Conceptualisation d'un système physico-chimique

temps que le solvant ; l'eau. La force motrice de ce mécanisme de transport est le gradient hydraulique. Le gradient de pression dans la phase gazeuse déplace le gaz du sol. Autres importantes processus de transport telles que la dispersion mécanique et la diffusion moléculaire, qui ont également lieu dans les deux phases. La dispersion des solutés est provoquée par un mélange de processus hydraulique du à des variations dans la vitesse d'écoulement d'un pore à un autre. La diffusion moléculaire décrit le transport des espèces dissoutes ou des espèces gazeuses du aux gradients de concentration.

Les réactions chimiques dans les systèmes d'eau souterraine comprennent des réactions homogènes, qui ont lieu en une seule phase ou les réactions hétérogènes qui nécessitent l'échange de masse entre deux ou plusieurs phases [57,60,94]. Les réactions homogènes comprennent les interactions entre les espèces dissoutes dans un milieu aqueux et les réactions d'oxydo-réduction. Les réactions hétérogènes les plus importantes sont la dissolution et la précipitation des minéraux, les réactions d'adsorption et d'échange d'ions, et les réactions de dissolution-exsolution des gaz.

L'approche géochimique consiste à mettre en équations et à prendre en compte la plupart des réactions chimiques impliquant le soluté étudié. Les réactions à l'interface solide/liquide/gaz entraînant des phénomènes de rétention sont alors conceptualisées par des modèles tels que la complexation de surface ou l'échange d'ions ou bien la concentration en gaz du sol. Les données à introduire dans les modèles géochimiques sont principalement les éléments chimiques considérés, les réactions chimiques qu'ils



subissent et leurs taux cinétiques et leurs constantes d'équilibre. Plusieurs paramètres contrôlent l'évolution géochimique dans le sol, par exemple, la température, la conductivité hydraulique, la porosité, le degré de saturation. Nous verrons en section 1.3.5 comment tenir compte des espèces microbiennes.

### 1.3.3 Mouvement de l'eau dans un sol variablement saturé

Comme tout autre flux de matière, le mouvement de l'eau dans un sol résulte de la présence d'un gradient de potentiel. En fait, l'écoulement s'effectuant des points où le potentiel est élevé vers ceux où il est plus faible. L'équation traitant de l'écoulement de l'eau dans un milieu variablement saturé peut s'écrire d'après [5, 80] par :

$$\frac{\partial}{\partial t}(S_a \rho \phi) + \nabla \cdot [\rho q_a] = \rho Q_a \quad (1.1)$$

avec  $S_a$  est la saturation de la phase aqueuse [ $m^3$  eau  $m^{-3}$  vide].

Sous l'hypothèse que les variations spatiales de  $\rho$  sont négligeables en raison de la compressibilité négligeable de l'eau l'équation 1.1 devient la suivante :

$$S_a S_s \frac{\partial h}{\partial t} + \phi \frac{\partial S_a}{\partial t} - \nabla \cdot [k_{ra} \kappa \nabla h] - Q_a = 0 \quad (1.2)$$

où  $S_s$  désigne le coefficient spécifique du stockage [ $m^{-1}$ ].

Le potentiel hydrique total  $\psi_a$  de l'eau d'un sol non-saturé est souvent pris en compte sous la forme suivante :  $\psi_a = h - z$ , où  $z$  est la position du fluide dans le champ gravitationnel [ $m$ ]. Étant donné que la saturation et la perméabilité relative sont des fonctions de la charge de pression dans la phase aqueuse l'équation (1.2) est non linéaire. En fait, des relations sont données par [111] pour décrire cette dépendance :

$$S_a = S_{ra} + \frac{1 - S_{ra}}{(1 + \alpha \psi_a^n)^m} \quad (1.3)$$

$$k_{ra} = S_{ea} [1 - (1 - S_{ea}^{1/m})^m]^2 \quad (1.4)$$

$S_{ra}$  définit la saturation résiduelle en eau,  $\alpha, n, m$  et  $l$  sont des paramètres caractéristiques dans le sol,

avec  $m = 1 - \frac{1}{n}$ .  $S_{ea}$  est la saturation effective en eau donné par :

$$S_{ea} = \frac{S_a - S_{ra}}{1 - S_{ra}}.$$

### 1.3.4 Equations fondamentales du transport réactif

Dans cette section nous introduisons les équations importantes de bases utilisées dans les modèles de transport réactif. Les modèles de transport réactif peuvent être formulés sur la base des équations fondamentales suivantes :

- un système d'équations aux dérivées partielles décrivant le transport physique,
- un système d'équations algébriques décrivant l'équilibre des réactions géochimiques,
- un système d'équations différentielles ordinaires, qui définit les réactions géochimiques cinétiquement contrôlées.

Une équation de conservation de masse peut être écrite pour chaque espèce mobile dans la phase aqueuse et gazeuse. Le nombre des espèces mobiles dans la phase aqueuse est donné par  $N_d = N_c + N_x$  qui est équivalent au nombre des espèces dissoutes.  $N_c$  correspond au nombre des composantes et  $N_x$  aux complexes aqueuse.  $N_g$  définit le nombre des gaz présents dans la phase aqueuse. Les équations de conservation de masse correspondantes qui considèrent le processus d'advection-dispersion peuvent être écrites par :

$$\frac{\partial}{\partial t} [S_a \phi C_j^c] - \nabla \cdot [q_a C_j^c] + \nabla \cdot [S_a \phi D_a \nabla C_j^c] - Q_j^c = 0 \quad j = 1, N_c \quad (1.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} [S_a \phi C_i^x] - \nabla \cdot [q_a C_i^x] + \nabla \cdot [S_a \phi D_a \nabla C_i^x] - Q_i^x = 0 \quad i = 1, N_x \quad (1.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} [S_g \phi C_i^g] - \nabla \cdot [q_g C_i^g] + \nabla \cdot [S_g \phi D_g \nabla C_i^g] - Q_i^g = 0 \quad i = 1, N_g \quad (1.7)$$

où  $S_a$  et  $S_g$  est la saturation de la phase aqueuse et de la phase gazeuse respectivement,  $\phi$  est la porosité géométrique du milieu,  $C_j^c$  [mole  $l^{-1}$  eau] est la concentration de la  $j$ -ème composante dans la solution,  $C_i^x$  [mole  $l^{-1}$  eau] est la concentration de la  $i$ -ème complexe aqueuse dans la solution et  $C_i^g$  [mole  $l^{-1}$  gaz] est la concentration de la  $i$ -ème espèce gazeuse présent dans la phase gazeuse. les vecteurs  $q_a$  et  $q_g$  représentent les flux de Darcy qui correspondent à la phase aqueuse et la phase gazeuse respectivement.

$D_a [m^2s^{-1}]$  définit le tenseur de dispersion dans la phase aqueuse et  $D_g [m^2s^{-1}]$  définit le tenseur de dispersion dans la phase gazeuse, respectivement.  $Q_j^c, Q_i^x$  et  $Q_i^g$  [mole.l<sup>-1</sup>] représentent les termes de sources internes et externes.

Pour les espèces immobiles, ceux qui peut être définies par  $N_s$  espèces adsorbés aux surfaces minérales et  $N_m$  phases minérales, les équations de la conservation de la masse sont données par :

$$\frac{dC_i^s}{dt} - Q_i^s = 0 \quad i = 1, N_s \quad (1.8)$$

$$\frac{dC_i^m}{dt} - Q_i^m = 0 \quad i = 1, N_m \quad (1.9)$$

$C_i^s$  est la concentration de la  $i$ -ème espèce adsorbé [mole l<sup>-1</sup>], et  $C_i^m$  est la concentration de la  $i$ -ème minérale [mole l<sup>-1</sup>].  $Q_i^s$  et  $Q_i^m$  représentent les termes de sources internes.

Les relations stoechiométriques décrivant les réactions géochimiques, peuvent être exprimées en fonction des composants. Par exemple la dissociation-association d'un complexe aqueuse et la dissolution-précipitation d'un minérale sont considérés dans ce contexte. La relation stoechiométrique pour la dissociation d'un complexe aqueuse  $A_i^x$  dans les composants d'un espèce  $A_j^c$  dans la solution peut être écrite par [100] :

$$A_i^x \Leftrightarrow \sum_{j=1}^{N_c} \alpha_{ij}^x A_j^c \quad i = 1, N_x \quad (1.10)$$

avec  $\alpha_{ij}^x$  est le coefficient stoechiométrique du  $j$ -ème composant dans le  $i$ -ème complexe aqueuse. La partition d'un gaz  $A_i^g$  de la phase gazeuse vers la phase aqueuse et puis la dissociation en composant d'un espèce dans la solution peut être exprimé par :

$$A_i^g \Leftrightarrow \sum_{j=1}^{N_c} \alpha_{ij}^g A_j^c \quad i = 1, N_g \quad (1.11)$$

avec  $\alpha_{ij}^g$  est le coefficient stoechiométrique du  $j$ -ème composant dans le  $i$ -ème gaz. La relation stoechiométrique pour la dissolution d'un minérale  $A_i^m$  peut être écrite par :

$$A_i^m \Leftrightarrow \sum_{j=1}^{N_c} \alpha_{ij}^m A_j^c \quad i = 1, N_m \quad (1.12)$$

avec  $\alpha_{ij}^m$  est le coefficient stoechiométrique du  $j$ -ème composant dans le  $i$ -ème minérale.

Deux approches différentes sont appropriées à décrire les réactions géochimiques [94]. La première utilisant les équations algébriques. Elle est convenable pour décrire les réactions "suffisamment" rapides et réversibles, et la deuxième adopte des relations cinétiques pour décrire celles qui ne sont "pas suffisamment rapides" et/ou irréversibles. Si les réactions sont donc "suffisamment rapides", les relations

d'équilibre pour les réactions 1.10, 1.11, 1.12 pour les complexes aqueuses sont données par :

$$C_i^x = (K_i^x \gamma_i^x)^{-1} \prod_{j=1}^{N_c} (\gamma_j^c C_j^c)^{\alpha_{ij}^x} \quad i = 1, N_x \quad (1.13)$$

avec  $K_i^x$  est la constante de dissociation pour le  $i$ -ème complexe aqueuse,  $\gamma_i^x$  est le coefficient d'activité pour le  $i$ -ème complexe aqueuse et  $\gamma_j^c$  est le coefficient d'activité pour le  $j$ -ème composant d'une espèce dans la solution. Les relations qui correspondent à la dissolution-exsolution d'un gaz peuvent être définies par :

$$C_i^g = (RT K_i^g \gamma_i^g)^{-1} \prod_{j=1}^{N_c} (\gamma_j^c C_j^c)^{\nu_{ij}^g} \quad i = 1, N_g \quad (1.14)$$

avec  $R$  est la constante universelle des gaz parfaits [ $J.K^{-1} \text{ mole}^{-1}$ ],  $T$  est la température [ $K$ ],  $K_i^g$  est la constante d'équilibre pour la dissolution du  $i$ -ème gaz,  $\gamma_i^g$  est le coefficient de fugacité du  $i$ -ème gaz.

Si les réactions 1.10, 1.11, 1.12 ne sont pas décrites par des relations d'équilibre, alors des expressions cinétiques doivent être définies pour décrire les évolutions géochimiques. L'apparition de réactions cinétiquement contrôlées dans la phase aqueuse nécessite la définition d'une relation stoechiométrique supplémentaire pour définir la consommation et la production des composants dans la phase aqueuse [61] :

$$\emptyset \rightleftharpoons \sum_{j=1}^{N_c} \alpha_{ij}^a A_j^c \quad i = 1, N_a \quad (1.15)$$

avec  $\alpha_{ij}^a$  sont les coefficients stoechiométriques des composants associés à la  $i$ -ème réaction cinétiquement contrôlée.  $N_a$  est le nombre des réactions cinétiquement contrôlées dans la phase aqueuse. Sous certaines hypothèses, une expression de la production et de la consommation des composants dans la phase aqueuse est donnée par :

$$R_i^a = -k_i^a \left[ \prod_{\alpha_{ij}^a < 0} (\gamma_j^c C_j^c)^{-\alpha_{ij}^a} - (K_i^a)^{-1} \prod_{\alpha_{ij}^a > 0} (\gamma_j^c C_j^c)^{\alpha_{ij}^a} \right] \quad i = 1, N_a \quad (1.16)$$

avec  $R_i^a$  [ $\text{mole } l^{-1} \text{ eau } s^{-1}$ ] est la valeur absolue de la vitesse de la  $i$ -ème réaction cinétiquement contrôlée dans la phase aqueuse et  $k_i^a$  est la constante de vitesse de la réaction dans le sens direct. La vitesse de la production et consommation des composants peut donc être calculée en se basant sur le système d'EDO suivant :

$$\frac{dC_j^c}{dt} = -\alpha_{ij}^a R_i^a.$$

### 1.3.5 Prise en compte des lois cinétiques microbiennes

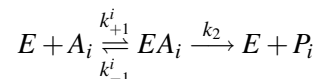
Jusqu'à présent nous n'avons considéré que des espèces chimiques. Nous montrons maintenant comment tenir compte de façon analogue des espèces biologiques. Un micro-organisme libère de l'énergie chimique de son environnement en utilisant ses enzymes pour catalyser une réaction chimique. D'autre part, l'environnement contrôle l'activité des microorganismes en fournissant les habitats, les nutriments et les ressources énergétiques pour la survie. Donc prédire précisément le taux de métabolisme microbien est fondamental pour comprendre les interactions entre les populations microbiennes et leurs environnements géochimiques. Le modèle 1.16 n'est pas adapté à la description des réactions élémentaires microbiologiques qui sont dans la grande majorité des cas des réactions enzymatiques. Celles-ci sont souvent de nature protéique et en faibles concentrations. Elles sont régénérées en fin de réaction et apparaissent donc à la fois dans les réactifs et les produits.

Généralement les expressions phénoménologiques décrivant la cinétique des réactions chimiques sont de la forme suivante [105] :

$$r = \lambda \cdot \prod_i C_i^{\delta_i} \quad (1.17)$$

où la valeur de  $r$  est exprimée en unité de masse par unité de volume, par unité de temps.  $\lambda$ , dépendant notamment de la température, est le coefficient de vitesse, supposé indépendant de la concentration,  $C_i$  est la concentration des espèces chimiques  $A_i$  intervenant dans la réaction, et  $\delta_i$  sont des entiers positifs.

Nous allons voir que ces expressions ne sont pas satisfaisante pour décrire des cinétiques de type enzymatiques ou microbiennes, et que d'autres types de non-linéarité sont nécessaires pour décrire leur croissance. La cinétique des réactions enzymatiques a été étudiée par Michaelis et Menten [73]. Ils décrivent la réaction enzymatique comme une suite de deux réactions élémentaires : une réaction réversible entre l'enzyme  $E$  et le substrat  $A_i$  formant un complexe  $EA_i$ ; et une réaction irréversible de transformation du substrat en produit.



Deux hypothèses sont faites : (1)  $k_{-1}^i \gg k_2$  de sorte que la première réaction peut être assimilée à un équilibre ; (2) le complexe enzyme-substrat est dans un état quasi-stationnaire de sorte que sa concentration est constante  $\frac{d[EA_i]}{dt} = 0$ .

La cinétique  $r$  de la réaction globale est égale à la cinétique de la deuxième réaction. Soit, en utilisant la

formulation classique des cinétiques chimiques :

$$r = \frac{d[P_i]}{dt} = k_2[EA_i].$$

L'approximation de l'état quasi-stationnaire permet décrire :

$$\frac{d[EA_i]}{dt} = -k_2[EA_i] + k_{+1}^i[E][A_i] - k_{-1}^i[EA_i].$$

La concentration totale en enzyme  $[E]_T$  est donnée par :

$$[E]_T = [E] + [EA_i]$$

Les trois équations précédentes permettent décrire :

$$r = k \frac{C_i}{K_i + C_i}$$

avec  $K_i = \frac{k_2 + k_{-1}^i}{k_{+1}^i}$  la constante d'affinité entre le substrat et l'enzyme, homogène à une concentration, et  $k = k_2[E]_T$  la constante cinétique, homogène à une vitesse de réaction. La loi cinétique obtenue est semblable à la formulation empirique publiée par Monod en 1949 après ses études sur la croissance des populations bactériennes [76]. Donc pour décrire la dépendance d'une réaction microbienne de la concentration des réactifs (substrats), on utilise souvent l'expression suivante :

$$f_i = \frac{C_i}{K_i + C_i} \quad (1.18)$$

Deux cas limites peuvent être distingués : pour  $K_i \gg C_i$ , l'équation (1.18) est réduite à une simple loi cinétique de premier ordre, avec  $f_i \propto C_i$ , tandis que pour  $K_i \ll C_i$ , la concentration de l'espèce chimie cesse de moduler la cinétique et  $f_i \approx 1$ .

Contrairement aux substrats chimiques, qui favorisent normalement la réaction, certains substrats peuvent inhiber l'activité microbienne. L'effet d'inhibition peut être inclus via la fonction suivante :

$$f_j^{inhib} = \frac{I_j}{I_j + C_j} \quad (1.19)$$

où  $I_j$  sont des constantes d'inhibitions. La combinaison des équations (1.17), (1.18) et (1.19) amène à la loi cinétique générale des réactions microbiennes suivante, aussi appelée le modèle de Michaelis-Menten généralisé :

$$r = \lambda \cdot \left( \prod_i \frac{C_i}{K_i + C_i} \right) \cdot \left( \prod_j \frac{I_j}{I_j + C_j} \right). \quad (1.20)$$

Les lois cinétiques microbiennes tiennent compte de la dépendance de la cinétique d'une réaction microbienne sur la présence des microorganismes. Plusieurs approches sont utilisées pour coupler la dynamique microbienne aux cinétiques des réactions chimiques, sont basées sur le modèle du Monod [76], pour lequel l'équation (1.20) est modifiée pour obtenir la relation suivante :

$$r = k.X. \left( \prod_i \frac{C_i}{K_i + C_i} \right) \cdot \left( \prod_j \frac{I_j}{I_j + C_j} \right) \quad (1.21)$$

où  $X$  désigne la concentration des espèces microbiennes (i.e. la biomasse),  $k$  est une constante de vitesse, supposée indépendante de la concentration, et  $k_i$  est la constante de demi saturation de Monod, qui est spécifique pour chaque substrat  $A_i$ .

Le modèle le plus simple décrivant la variation de la concentration en biomasses qui consomment les substrats nécessaires pour leurs croissances est donnée par :

$$\frac{dX}{dt} = Y.r - \mu_{dec}X \quad (1.22)$$

avec  $\mu_{dec}$  représente le coefficient de la mortalité des microorganismes.  $Y$  est le coefficient de rendement, il lie l'utilisation des substrats, par exemple le carbone organique, avec la production des nouvelles biomasses microbiennes. La valeur de  $Y$  dépend de l'énergie de Gibbs produite par la réaction chimique.

La considération thermodynamique est une contrainte importante dans les réactions microbiennes [50–53]. Dans le but que ces expressions cinétiques soient plus consistantes du point de vue thermodynamique, l'équation (1.21) peut être multipliée par le terme suivant :

$$f(\Delta G) = 1 - \exp\left(\frac{\Delta G}{RT}\right) \text{ for } \Delta G \leq 0$$

avec  $\Delta G$  représente l'énergie de Gibbs de la réaction microbienne,  $R$  est la constante universelles des gaz parfaits, et  $T$  la température.

Souvent dans les modèles mathématique de l'écologie microbienne, si le substrat noté  $s$  n'inhibe pas la croissance des biomasses, on utilise habituellement des cinétiques de croissance monotones de type Monod qui dérivent de l'expression (1.21). Cette fonction est donnée pour chaque espèce  $i$  par (voir Figure 1.2)

$$\mu_i(s) = \mu_{max}^i \frac{s}{K_i + s},$$

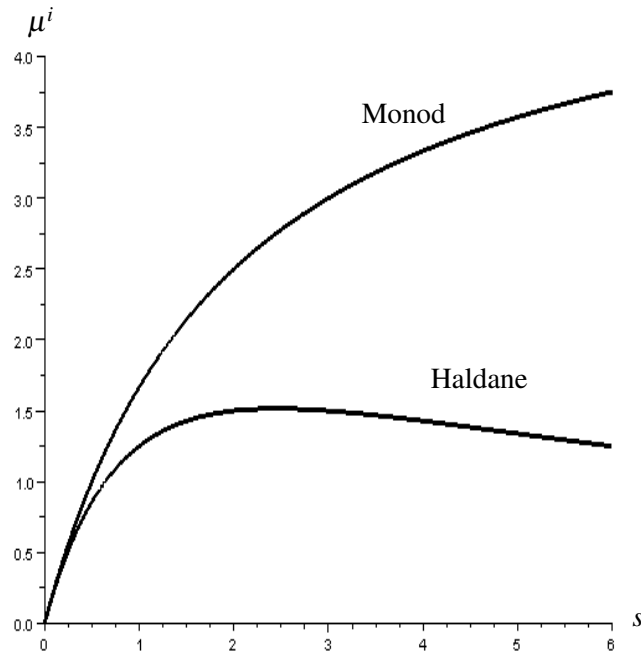


FIG. 1.2 – Cinétiques de type Monod et Haldane, avec  $\mu_{max}^i = 5$ ,  $K_i = 2$  et  $I_i = 3$ .

avec  $s$  représente la concentration en substrat et  $\mu_{max}^i$  la vitesse spécifique de croissance maximale. Sinon, si le substrat limitant, à une concentration élevée, inhibe la croissance des biomasses, on utilise alors un modèle appelé "Modèle de Haldane", donné par (voir Figure 1.2)

$$\mu^i(s) = \mu_{max}^i \frac{s}{K_i + K'_i s + \frac{s^2}{I_i}} \quad (1.23)$$

La constante  $I_i$  est la constante d'inhibition. Il faut noter que si  $I_i$  est assez grand, le modèle est équivalente à celui de Monod.

*Remarque.* Ce dernier modèle dérive également de l'expression (1.21). En fait, considérons une seule biomasse qui croît sur un seul substrat limitant inhibiteur  $s$ . D'après l'équation (1.21), la fonction de croissance  $\mu(\cdot)$  doit être donnée par

$$\mu_i(s) = \mu_{max}^i \left( \frac{s}{K_i + s} \right) \cdot \left( \frac{I_i}{I_i + s} \right).$$

En divisant par  $I_i$  le numérateur et le dénominateur de la partie droite de cette dernière équation, on peut bien obtenir le modèle d'Haldane, avec  $K'_i = \frac{K_i + I_i}{I_i}$ .



### 1.3.6 Couplage et échelles spatiaux-temporelles

Après la modélisation et la mise en équations du phénomène de transport réactif dans le sol, un modèle numérique est nécessaire pour transformer les équations aux dérivées partielles, qui peuvent fournir une description en continu des paramètres physico-chimiques dans l'espace et le temps, dans une approximation discrète. Les paramètres de discrétisation temporelle et spatiale affectent la résolution de ces équations et la précision des résultats du modèle. De plus les relations entre les échelles de temps du problème du transport et celles de la géochimie ont un grand impact sur la solvabilité des problèmes de transport réactif. En fait, l'une des difficultés majeurs dans le couplage du transport physique et les réactions géochimiques est la large variation des échelles spatio-temporelle caractérisant le transport et les différents processus de réaction. Un processus rapide est caractérisé par une échelle de temps courte, tandis que les processus lents sont identifiés par des longues échelles. Par exemple, les réactions d'hydratation sont très rapides ; les pluparts atteignent leur équilibre dans l'ordre de  $10^{-10}$  à 1 secondes [56]. Par contre les réactions de dissolution-precipitations sont plutôt très lentes et atteignent leurs équilibres dans l'ordre d'un jour jusqu'au même des dizaines d'années.

Deux formulations distinctes sont couramment utilisées pour le couplage des équations du transport physique avec celles des réactions géochimiques. La première formulation est la méthode "the global implicit method" [100], et l'autre est "operator-splitting formulation" [113]. La principale différence entre ces deux méthodes est que le transport physique et les réactions géochimiques sont résolus simultanément en utilisant la première, tandis que la technique de la deuxième méthode considère le transport et les réactions d'une manière successive. Diverses méthodes numériques ont été utilisées pour résoudre le système d'équations résultant de ces deux formulations. Ces méthodes peuvent être distinguées selon la façon dont les équations fondamentales pour les problèmes de transport réactif sont traitées, la formulation des équations principales et le choix des variables comme variables dépendantes primaires.

### 1.3.7 Exemple d'un modèle du transport réactif

MIN3P [70] est un des schémas numériques de transports réactifs, qui est développé en partant des équations de bases et des concepts décrit précédemment. Le modèle MIN3P peut simuler des problèmes de transport réactif généraux dans un milieu variablement saturé dans une, deux ou trois dimensions spatiales. Sous l'hypothèse que les variations spatiales de la densité de l'eau sont négligeables, la solution de l'écoulement de l'eau est donnée par l'équation 1.2. Partant des équations 1.5, 1.6 et 1.7, le transport

réactif des composantes  $A_j$  est écrit en fonction de  $T_j$  (la concentration totale des composantes) et est donné par l'équation suivante [70] :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}[S_a\phi T_j^a] + \frac{\partial}{\partial t}[S_g\phi T_j^g] + \frac{\partial T_j^s}{\partial t} + \nabla \cdot [q_a T_j^a] \\ & - \nabla \cdot [S_a\phi D_a \nabla T_j^a] - \nabla \cdot [S_g\phi D_g T_j^g] \\ & - Q_j^{ext} - Q_j^{int} = 0 \quad j = 1, N_c \end{aligned}$$

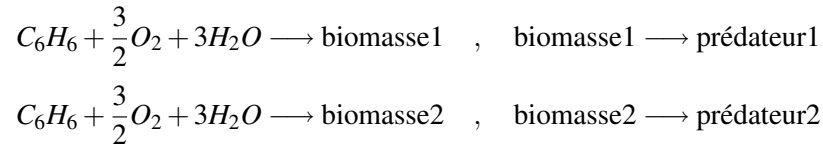
avec  $T_j^a$  désigne la concentration totale des composantes aqueuses de la composante  $A_j^c$ ,  $T_j^g$  est la concentration totale des composantes gazeuses de la composante  $A_j^c$  et  $T_j^s$  est la concentration totale adsorbée de la composante  $A_j^c$ .  $Q_j^{int}$  désignent les termes de sources internes à partir des réactions aqueuses et des réactions de dissolution/précipitation, et  $Q_j^{ext}$  les sources externes pour les phases aqueuses et gazeuses.

De nombreux processus biogéochimiques sont compris dans MIN3P (dissolution/précipitation minérale, spéciation aqueuse, dissolution/exsolution du gaz, échange d'ions, et sorption compétitive ou non-compétitive). Des expressions cinétiques généralisées pour les réactions inter-aqueuse et pour la dissolution/précipitation permettent de considérer des lois cinétiques de types Monod ou bien Monod multiplicative et des termes d'inhibition. Ce code a été utilisé pour un certain nombre d'applications dans des différents domaines de la science de l'environnement, allant du transport de contaminants organiques et inorganiques et remédiation des eaux souterraines [67–69, 75] jusqu'à l'hydrologie des sols et les cycles biogéochimiques dans les écosystèmes terrestres [27, 28, 66]. Les équations principales de l'écoulement et du transport réactif sont linéarisées et résolues en utilisant une méthode de Newton modifiée [70]. Ce logiciel est notamment reconnu pour sa robustesse numérique [11, 71]. Le modèle de transport réactif MIN3P dispose d'une interface (GUI) facilitant grandement la réalisation et le traitement des simulations [26].

### Simulations avec MIN3P

Dans ce qui suit nous donnons un exemple de simulation effectuée sous MIN3P. Pour cela, on a considéré un exemple d'un sol poreux, de porosité 50%, variablement saturé, de dimension 1m en largeur 1m en longueur et de profondeur de  $\frac{1}{2}m$ . Deux éléments minéraux sont considérés, le ferrihydrite ( $Fh$ ) et le root- $O_2$ , ainsi que quatre espèces aqueuses l'ion hydroxyde  $OH^-$ , le dihydrogène  $H_2(aq)$ , l'acide carbonique  $H_2CO_3(aq)$  et le bicarbonate  $HCO_3^-$ . Quatre gaz sont aussi choisis dans ce sol, le dioxyde de carbone  $CO_2$ , le doxygène  $O_2$ , l'azote  $N_2(g)$  et le dihydrogène  $H_2(g)$ . En présence de ces éléments

chimiques, des réactions d'oxydo-réduction a lieu et rend le sol riche en benzène  $C_6H_6$ . Deux biomasses (biomasse1 et biomasse2) et deux prédateurs (prédateur1 et prédateur2) qui respirent l'oxygène, sont en compétitions pour dégrader le  $C_6H_6$ .



On désigne par  $x_1, x_2, x_{1d}$  et  $x_{2d}$  la concentration en biomasse1, biomasse2, prédateur1 et prédateur2 respectivement. Les cinétiques de croissance sont de type Monod multiplicatives sont données par les équations suivantes :

$$\dot{x}_1 = K_1 x_1 * \frac{[O_2]}{k_1 + [O_2]} * \frac{[C_6H_6]}{k_2 + [C_6H_6]} * \frac{[O_2]}{k_3 + [O_2]} * \frac{[C_6H_6]}{k_3 + [C_6H_6]}$$

$$\dot{x}_2 = K_2 x_2 * \frac{[O_2]}{k_1 + [O_2]} * \frac{[C_6H_6]}{k_2 + [C_6H_6]} * \frac{[O_2]}{k_3 + [O_2]} * \frac{[C_6H_6]}{k_3 + [C_6H_6]}$$

$$\dot{x}_{1d} = K_3 x_1, \quad \dot{x}_{2d} = K_3 x_2$$

Avec  $K_1 = 1.10^{-1}$ ,  $K_2 = 5.10^{-2}$ ,  $K_3 = 1.10^{-3}$ ,  $k_1 = 3,125.10^{-6}$ ,  $k_2 = 1.10^{-5}$  et  $k_3 = 1.10^{-5}$ .

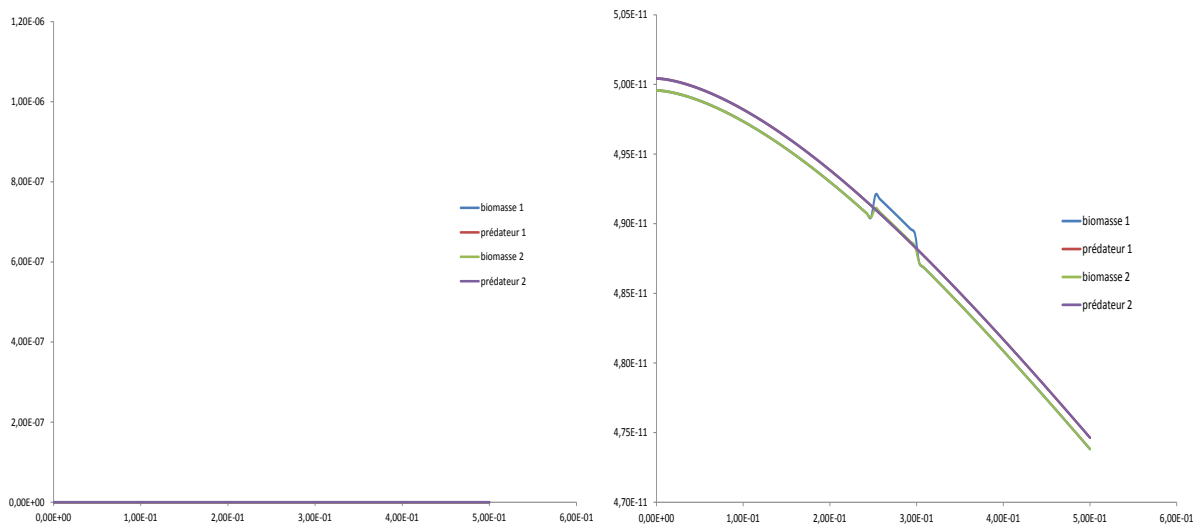


FIG. 1.3 – Gradients des concentrations suivant la profondeur à l'instant  $t = 0$  (figure gauche) et  $t = 1.10^{-5}$  (figure droite)

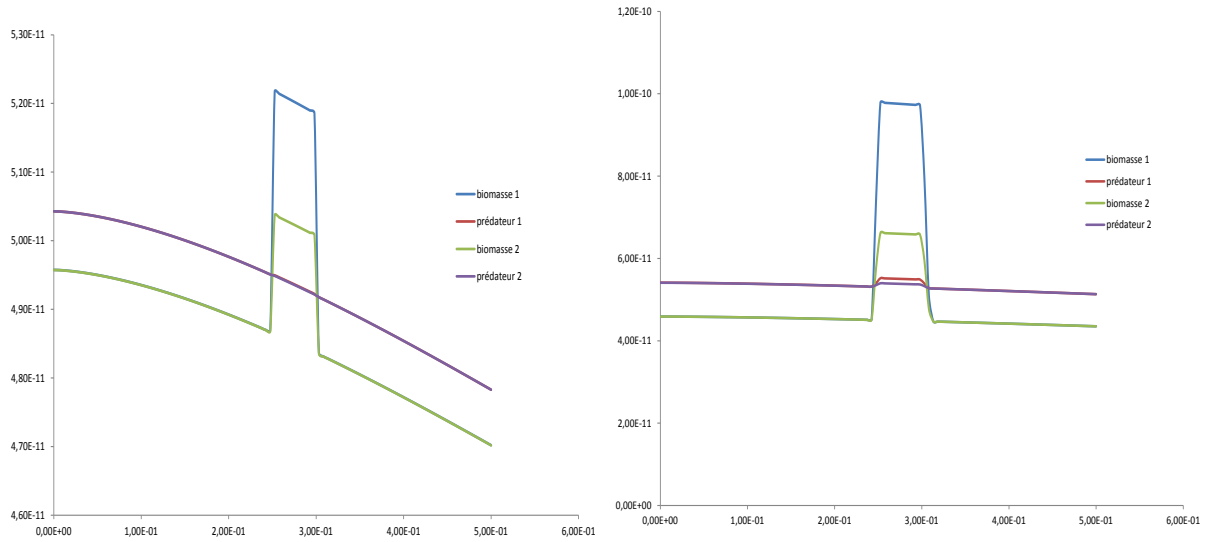


FIG. 1.4 – Gradients des concentrations suivant la profondeur à l'instant  $t = 1.10^{-4}$  (figure gauche) et  $t = 1.10^{-3}$  (figure droite)

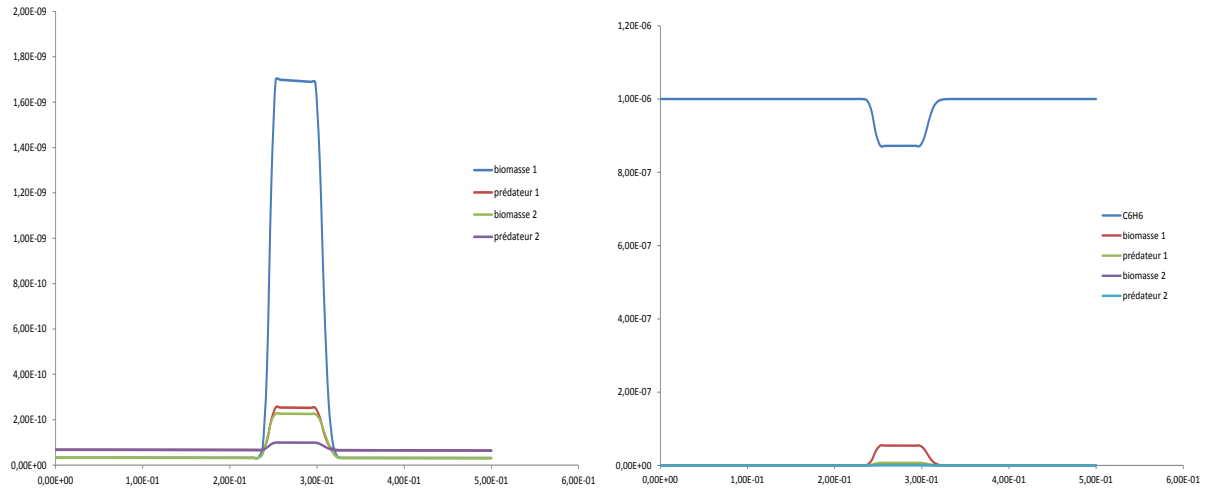


FIG. 1.5 – Gradients des concentrations suivant la profondeur à l'instant  $t = 5.10^{-3}$  (figure gauche) et  $t = 1.10^{-2}$  (figure droite)

Nous avons tracé suivant la profondeur, les variations des concentrations en  $C_6H_6$ , en biomasses-prédateur, et en oxygène (voir figures 1.3, 1.4, 1.5, 1.6, 1.7). L'unité du temps est le jour. On remarque d'après les figures que les biomasses et les prédateurs sont en compétition pour le  $C_6H_6$  et que cette compétition s'effectue justement dans la zone où l'oxygène est en quantité suffisante pour la respiration des micro-organismes, et en dehors de cette zone la concentration en biomasses-prédateurs est presque nulle.

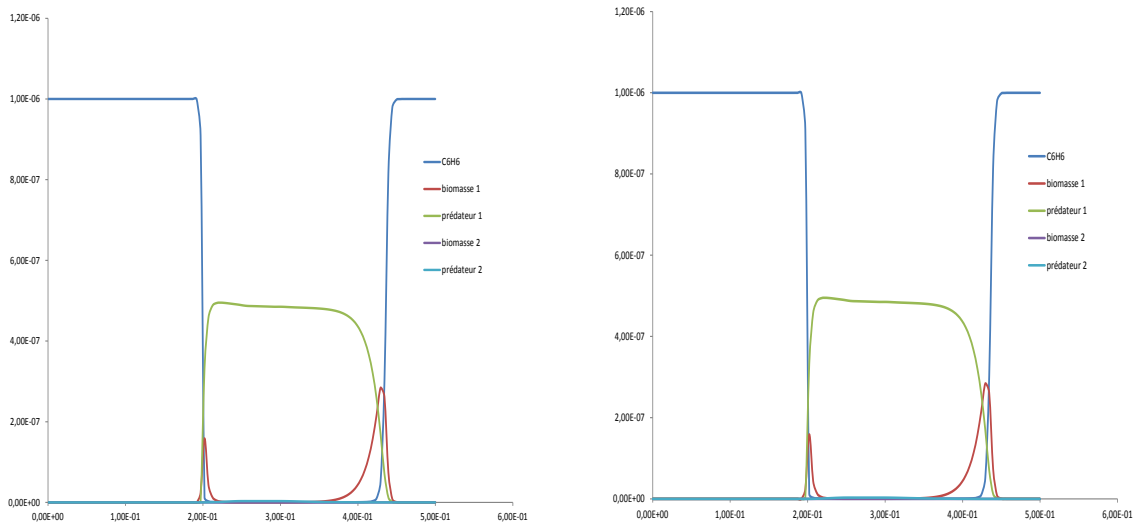


FIG. 1.6 – Gradients des concentrations suivant la profondeur à l’instant  $t = 5.10^{-2}$  (figure gauche) et  $t = 1.10^{-1}$  (figure droite)

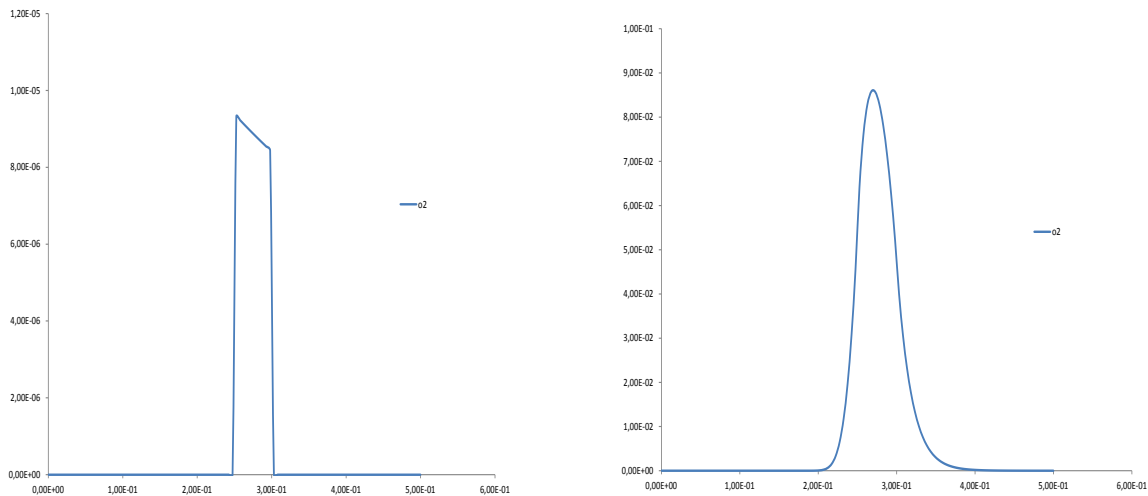


FIG. 1.7 – Gradient de la concentration en oxygène suivant la profondeur à l’instant  $t = 1.10^{-5}$  (figure gauche) et  $t = 1.10^{-1}$  (figure droite)

## 1.4 Entre les modèles de sol et le chemostat

Remarquons que la croissance des microbes du sol peut s’étudier en laboratoire. En fait, une souche bactérienne est introduite dans un bioréacteur de culture en continu réunissant toutes les conditions de

croissance compatibles avec celles du sol, et après la phase d'adaptation de la souche, un débit constant de milieu de culture neuf est ajouté dans le récipient, le même débit est considéré en sortie pour maintenir un volume constant. Les expériences de type chemostat, font partie des techniques utilisées en microbiologie pour ses capacités de maintenir la culture en phase de croissance. Il est possible de varier les concentrations des sels nutritifs du milieu de culture, afin de déterminer les différents seuils limitants des éléments chimiques.

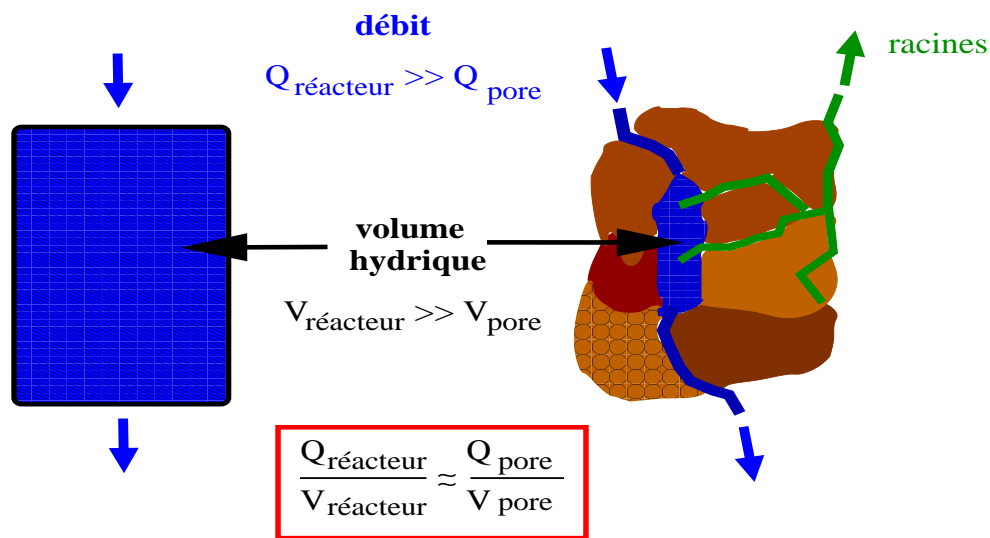


FIG. 1.8 – Un bioréacteur représente une poche d'un sol

Sachant que les débits volumiques dans un sol sont faibles, et les pores sont de petits volumes, les poches d'un sol saturé peuvent être considérées, en première approximation, comme de petits bioréacteurs avec des taux de dilution du même ordre que pour des volumes plus gros (voir Figure 1.8). Vu qu'un milieu poreux est un réseau complexe des poches interconnectées par différents phénomènes physiques (advection, diffusion,...), l'interconnection entre ces volumes est essentielle pour décrire le fonctionnement microbien du sol, d'où le sujet de cette thèse, représenté par le schéma 1.9.

Dans la Section suivante, nous décrivons plus précisément le modèle du chemostat et ses propriétés mathématiques.

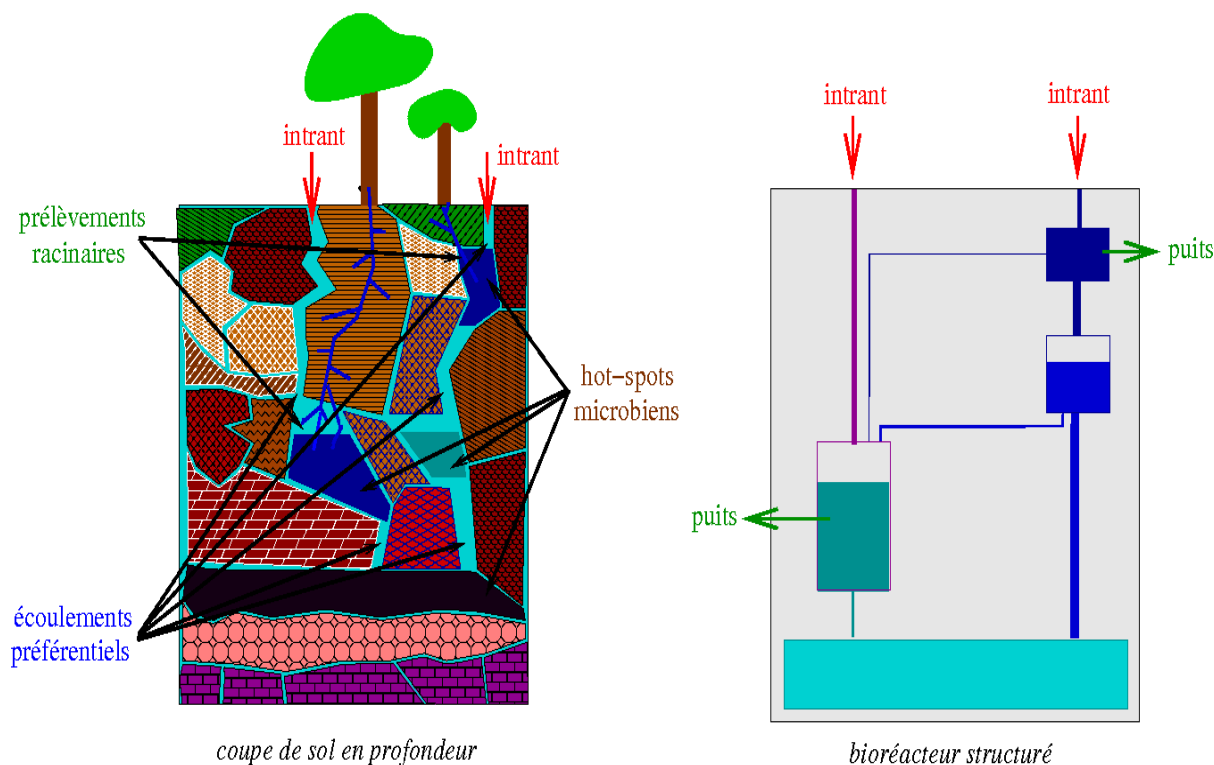


FIG. 1.9 – Un sol poreux peut être vu comme un réseau de bioréacteur structuré

## 1.5 Approche par le modèle du chemostat

### 1.5.1 Définition du chemostat

Un chemostat (voir figure 1.10) est un type particulier de bioréacteur inventé simultanément par Monod [77] et Novick et Szilard [81]. Il permet la culture continue de micro-organismes dans un milieu contrôlé, c'est-à-dire qui permet de faire croître une population de microorganismes (algues unicellulaires, bactéries, levures, phytoplancton, zooplancton, moisissures...) sur certains substrats, tout en conservant des conditions environnantes (température, luminosité, pH, aération) constantes. Il est utilisé pour la production de la masse cellulaire elle-même, pour l'extraction et la dégradation de certains polluants dans un milieu liquide, pour la production de substances organiques résultantes de l'activité métabolique, ou pour l'étude de procédés physiologiques et métaboliques de micro-organismes dans un milieu spécifique. On peut alors d'après les variations de l'élément limitant, quantifier l'influence de ce dernier sur la population cultivée. Ainsi le chemostat est un modèle d'écosystème contrôlé dans lequel on peut quantifier précisément les relations entre un élément nutritif et un organisme.

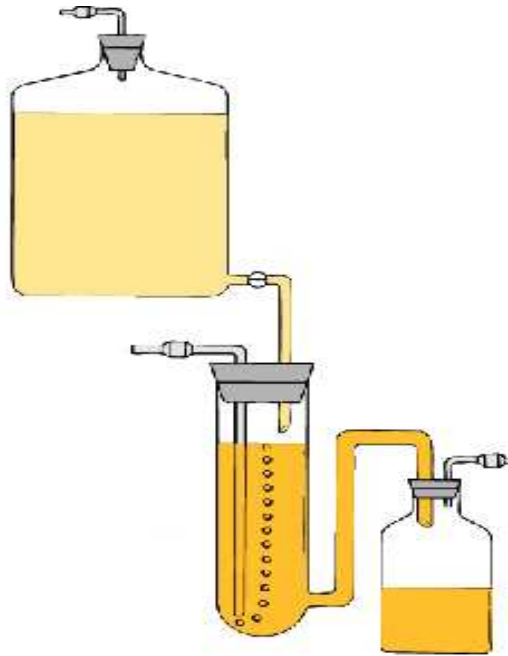


FIG. 1.10 – Un chemostat

L'appareil est constitué de trois réservoirs reliés entre eux. Le premier contient des nutriments supposés être en abondance excepté un parmi eux, nommé substrat limitant de concentration  $s$ . Un débit  $Q$  (provenant du premier réservoir) alimente le deuxième réservoir où interagissent et se mélangent la (ou les) biomasse(s) (une ou différentes espèces de microorganismes à densité  $x_i$ ) avec des nutriments. De plus, il est supposé que le substrat limitant a une concentration d'alimentation constante  $s_{in} > 0$ .

Le deuxième réservoir est supposé être parfaitement mélangé, afin que l'on puisse assurer que le milieu liquide est homogène et par conséquent qu'il n'y a pas de variation spatiale dans la concentration du substrat limitant et des espèces. Par ailleurs, l'hypothèse d'homogénéité assure que les organismes et le substrat sont évacués du chemostat par action du flot au même taux de dilution  $D$ .

Le troisième réservoir réceptionne le milieu prélevé dans le chemostat avec un débit  $Q$ . C'est dans le deuxième réservoir qu'a lieu l'interaction entre le substrat limitant et les micro-organismes ; parmi l'ensemble des procédés biologiques et chimiques susceptibles d'avoir lieu, on ne considérera que la consommation du nutriment par les espèces de microorganismes et la croissance microbienne.



### 1.5.2 Modèle pour une espèce

Les nutriments pénètrent dans le chémostat, à une concentration  $s_{in}$ , avec un débit volumique  $Q$ , soit un taux de dilution  $D = \frac{Q}{V}$ . A l'intérieur du chemostat, l'espèce consomme le substrat pour sa croissance. La modélisation doit prendre en compte deux choses : la partie physique, qui décrit les flux de matière dus à la circulation de liquide ; et la partie biologique, qui décrit les processus biologiques ayant lieu à l'intérieur du chemostat. Dans la suite, nous noterons  $x$  la concentration de la biomasse cellulaire totale, et  $s$  la concentration en substrat.

Dans le récipient d'alimentation, il ne rentre pas de biomasse. La seule variation de la biomasse est donc le fait de la sortie, qui se fait au même taux  $D$  que l'entrée et la croissance. Pour le substrat, il faut tenir compte du substrat entrant dans le chemostat, au taux  $D$  et à la concentration  $s_{in}$ , et de la quantité de substrat présente dans le chemostat, qui est soutirée par dilution.

L'espèce consomme le substrat pour sa croissance. Notons  $\mu(s)$  le taux de croissance spécifique de l'espèce correspondant à l'absorption d'une concentration  $s$  de nutriment. La consommation induit une diminution de la quantité de substrat à un taux  $\sigma(s)$ , que l'on appelle taux d'absorption.

La variation de la masse du substrat limitant dans le deuxième réservoir est donnée par le bilan du substrat entrant, celui du substrat prélevé et celui du substrat consommé par l'espèce de micro-organisme :

$$\dot{s} = \begin{array}{r} D s_{in} \\ \text{Entrant} \end{array} - \begin{array}{r} D s \\ \text{Sortant} \end{array} - \begin{array}{r} \sigma(s) x \\ \text{Consommation} \end{array}$$

La variation de la masse de l'espèce de microorganisme est donnée par le bilan de la masse prélevée et celle de la masse issue de la croissance microbienne :

$$\dot{x} = \begin{array}{r} \mu(s) x \\ \text{Croissance} \end{array} - \begin{array}{r} D x \\ \text{Prélevement} \end{array}$$

Il existe une vaste littérature consacrée à la modélisation des fonctions de croissance et de consommation, on résume dans la section (1.3.5) les différentes approches de leurs modélisation. Pour le moment, nous ne ferons que deux hypothèses concernant les fonctions  $\mu$  et  $\sigma$  : La vitesse de croissance est positive et nulle en absence de substrat, La relation entre la consommation et la croissance est linéaire, La fonction de croissance dépend continument et uniquement de la concentration du substrat et  $\mu$  et  $\sigma$  sont localement lipschitziennes. Nous supposerons de plus que le taux de mortalité de biomasse est négligeable ce qui garantit que le taux de recyclage de la biomasse morte est négligeable. Il découle des hypothèses que les fonctions  $\mu$  sont continues, nulles en 0 et prennent des valeurs positives. De plus

$\mu(s) = \frac{\sigma(s)}{\gamma(s)}$  où  $\gamma(s)$  décrit la proportion de la ressource utilisée effectivement pour la croissance des espèces. Si l'on suppose que  $\gamma$  est indépendant de  $s$ , quitte à faire le changement de variable  $x = \gamma^{-1}s$  (ce qui équivaut à changer l'unité de mesure de la masse d'organismes), on peut prendre  $\gamma = 1$ . L'évolution de la concentration d'une espèce consommant une ressource dans le chemostat est décrite par le système :

$$\begin{cases} \dot{s} &= D(s_{in} - s) - \mu(s)x \\ \dot{x} &= (\mu(s) - D)x \end{cases} \quad (1.24)$$

### 1.5.3 Compétition dans le chemostat

Hsu et al. [45] sont parmi les premiers, en 1977, à étudier le problème de la compétition dans le chemostat. Ils considèrent  $n$  populations en compétition pour un même nutriment, et montrent que l'exclusion compétitive est vérifiée : le compétiteur qui utilise le mieux le substrat en faible quantité survit, les autres s'éteignent.

Décrivons ce modèle.  $n$  espèces sont présentes dans un chemostat *bien mélangé* de volume constant en régime continu. On considère que le seul facteur limitant est la ressource. En d'autres termes, les espèces n'entrent en compétition que via leur consommation de la ressource.

Notons par  $s$  la concentration en substrat et, pour  $i = 1, \dots, n$ ,  $x_i$  celle de la  $i$ -ème espèce et par  $\mu_i(s)$  son taux de croissance. Comme pour le cas d'un seul espèce, on suppose que dans le récipient d'alimentation, il ne rentre pas d'organisme. Donc la seule perte de biomasse des organismes est due du fait de la sortie, qui se fait au même taux  $D$  que l'entrée. Les concentrations des espèces suivent alors la loi

$$\dot{x}_i = (\mu_i(s) - D)x_i, \quad i = 1 \dots n.$$

Si l'on suppose que les seuls termes de décroissance de la ressource sont la dilution (au même taux  $D$ ) et la consommation  $\sigma_i(s)$ , l'évolution de la concentration de la ressource est régie par l'équation

$$\dot{s} = D(s_{in} - s) - \sum_{i=1}^n \sigma_i(s)x_i$$

Sous tous ces hypothèses, et si l'on suppose de nouveau que le rapport  $\mu_i(s)/\sigma_i(s) = \gamma_i$  ne dépend pas de  $s$ , on peut de nouveau prendre  $\gamma_i = 1$ , et par suite le modèle de compétition pour  $n$  espèces dans le chemostat s'écrit

$$\begin{cases} \dot{s} &= D(s_{in} - s) - \sum_{i=1}^n \mu_i(s)x_i, \\ \dot{x}_i &= (\mu_i(s) - D)x_i, \quad i = 1 \dots n. \end{cases} \quad (1.25)$$

En plus des hypothèses mis précédemment sur les cinétiques de croissance, on fait de plus les hypothèses suivantes

- (H1)  $\mu_i : \mathbb{R}_+ \longrightarrow \mathbb{R}_+$  et  $\mu_i(0) = 0$ ,
- (H2) les fonctions  $\mu_i$  sont continûment différentiables,
- (H3) les fonctions  $\mu_i$  sont strictement croissantes.

L'hypothèse (H2) assure l'existence et l'unicité des solutions de (1.25) et l'hypothèse (H1) assure que l'orthant positif est invariant par (1.25).

Il est à noter qu'aux coefficients de rendement  $\gamma_i$  fixés, deux espèces ou "variantes" biologiques peuvent avoir des cinétiques dont les graphes s'intersectent, ce qui ne se produit pas pour des espèces chimiques dont les cinétiques sont sous la forme 1.17. C'est cette particularité qui apporte une richesse des comportements des solutions des systèmes dynamiques régis par ces modèles, et qui sera exploitée dans la thèse.

#### 1.5.4 Analyse mathématique

Nous donnons ici les principaux résultats concernant le système (1.25). Les preuves utilisent de manière importante les fonctions de Lyapunov et le théorème de LaSalle (voir l'énoncé dans l'Annexe).

##### Principe de l'exclusion compétitive

La compétition entre  $n$  espèces sur  $k$  ressources est un sujet très étudié en écologie théorique. Un postulat classique propose que si  $n > k$ , alors au moins  $(n - k)$  espèces ne peuvent pas coexister à long terme : ce postulat est connu comme le Principe d'Exclusion Compétitive. Dans le cas du système (1.25), le principe d'exclusion compétitive signifie que, au plus une espèce  $x_j$  de microorganismes est capable de survivre à long terme, tandis que les autres  $(n - 1)$  doivent disparaître. Ce principe a été démontré mathématiquement et validé dans plusieurs expériences.

**Proposition 1.1** *Supposons que les hypothèses (H1) et (H2) sont vérifiées. Alors, Pour toute condition initiale  $(s_0, x_{1,0}, \dots, x_{n,0}) \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+^n$ , le système (1.25) admet une solution unique, qui est positive et*

bornée pour tout  $t \geq 0$ . De plus L'ensemble  $\Omega = \left\{ (s, x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}_+^{n+1} / s + \sum_{i=1}^n x_i \leq s_{in} \right\}$  est invariant et est un attracteur de toute solution de (1.25).

**Preuve :**

L'invariance de  $\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+^n$  est garantie par le fait que  $s = 0$  entraîne  $\dot{s} = Ds_{in} > 0$  et que  $x_i = 0$  entraîne  $\dot{x}_i = 0$ . Il reste à montrer que la solution est bornée.

Pour toute solution de (1.25), soit  $z = s + \sum_{i=1}^n x_i - s_{in}$ . La dérivée de  $z$  par rapport au temps le long des solutions du système (1.25) est donnée par :

$$\dot{z} = -D \left( s + \sum_{i=1}^n x_i - s_{in} \right) = -Dz$$

donc  $s + \sum_{i=1}^n x_i = s_{in} + Ke^{-Dt}$  avec  $K = s(0) + \sum_{i=1}^n x_i(0) - s_{in}$ .

Il est donc clair que  $s, x_1, \dots, x_n$  sont bornés car ils sont tous positifs. ■

on vérifie aisément que le système (1.25) est équivalent au système :

$$\begin{cases} \dot{z} = -Dz, \\ \dot{x}_i = x_i \left( \mu_i(s_{in} - z - \sum_{i=1}^n x_i) - D \right), \quad i = 1 \dots n. \end{cases} \quad (1.26)$$

Alors, quelques propriétés asymptotiques du système (1.26) peuvent être déduites en étudiant le système suivant :

$$\dot{x}_i = x_i \left( \mu_i(s_{in} - \sum_{i=1}^n x_i) - D \right), \quad i = 1 \dots n.$$

En effet, si les solutions de ce système convergent vers un point d'équilibre, on peut utiliser quelques résultats issus de la théorie des systèmes dynamiques asymptotiquement autonomes [74, 98] (un théorème important dans ce sens sera évoqué dans le chapitre 3) pour déduire, sous la condition que les solutions du système 1.25 sont bornées, que le système 1.25 et son système réduit 1.26 ont le même comportement asymptotique.

Le système 1.25 admet un état d'équilibre  $E_0 = (s_{in}, 0, \dots, 0)$ . Par l'hypothèse (H3), l'équation  $\mu_i(s) - D = 0$  admet au plus une solution. On note  $\lambda_i$  cette unique solution si elle existe.  $\lambda_i$  représente la concentration minimale de la ressource permettant la croissance de l'espèce  $i$ . Quitte à réindexer les  $x_i$ , on peut supposer que l'on a  $0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ .

**Theorem 1.1** (Armstrong et McGehee) [2]

Supposons que les hypothèses (H1) – (H3) sont vérifiées et notons  $(s, x_1, \dots, x_n)$  l'unique solution de (1.25) vérifiant  $(s(0), x_1(0), \dots, x_n(0)) \in \mathbb{R}_+^{n+1}$ .

Si  $s_{in} > \lambda_1$ ,  $0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n < +\infty$  et  $x_1(0) > 0$ , alors  $E_1$  est un attracteur global de (1.25) dans  $\mathbb{R}_+^n$ .

**Preuve :**

Il suffit de montrer le résultat pour 1.26. Notons  $\Sigma(t) = \sum_{i=1}^n x_i(t)$  et définissons les sous-ensembles de  $\Omega$  suivants :  $M_1 = \{(x_i)_i \in \Omega, \Sigma = s_{in} - \lambda_1\}$ ,  $M_2 = \{(x_i)_i \in \Omega, \Sigma < s_{in} - \lambda_1\}$  et  $M_3 = \{(x_i)_i \in \Omega, \Sigma > s_{in} - \lambda_1\}$ .

On a

$$\dot{\Sigma} = \sum_{i=1}^n x_i (\mu_i(s_{in} - \Sigma) - D).$$

Premièrement, il est simple de vérifier que toute solution partant de  $M_2$  reste dans  $M_2$ . De plus, si  $(x_i(s))_i \in M_1 / (s_{in} - \lambda_1, 0, \dots, 0)$  pour un certain  $s \geq 0$ , alors par monotonie des  $\mu_i$  et le fait que  $s_{in} - \Sigma(s) = \lambda_1$ , on a  $\dot{\Sigma}(s) < 0$  et donc  $(x_i(t))_i \in M_2$  pour tout  $t > s$ .

Deuxièmement, soit  $(x_i(t))_i$  une solution restant dans  $M_3$  pour tout  $t \geq 0$ . Soit la fonction  $V(x) = \sum_{i=1}^n x_i$ . Simple à vérifier que la fonction  $V$  est une fonction de Lyapunov de 1.26 dans  $M_3$ . Des calculs directs montrent que  $\dot{V}(x(t)) < 0$ . On voit facilement que  $\dot{V}(x(t)) = 0$  dans  $M_1 \cup M_3$  si et seulement si  $x = (s_{in} - \lambda_1, 0, \dots, 0)$ . Le théorème de LaSalle conclut que  $(x_i(t))_i$  converge vers  $(s_{in} - \lambda_1, 0, \dots, 0)$  lorsque  $t$  tend vers  $+\infty$ .

Troisièmement, supposons que  $(x_i(t))_i \in M_2$  et  $x_1(0) > 0$ . Comme  $s_{in} - \Sigma > \lambda_1$ , on a, pour tout  $t > 0$ ,  $\dot{x}_1(t) > 0$  donc la limite de  $x_1(t)$  lorsque  $t$  tend vers  $+\infty$  existe et est strictement plus grande que  $x_1(0) > 0$ . On vérifie facilement que la fonction  $V(x) = -x_1$  est une fonction de Lyapunov de 1.26 dans  $M_2$  et  $\dot{V}(x(t)) = 0$  dans  $M_1 \cup M_2$  si et seulement si  $x = (s_{in} - \lambda_1, 0, \dots, 0)$  ou bien  $x_1 = 0$ . Par le théorème de LaSalle et comme  $\lim_{t \rightarrow +\infty} x_1(t) > 0$ , on en conclut à nouveau que  $E_1$  est un attracteur globale, ce qui termine la preuve. ■

Ainsi, dans un chemostat parfaitement mélangé en négligeant le taux de mortalité et en supposant que le taux de croissance d'une biomasse est proportionnel au taux de consommation et sous les hypothèses H1 – H3, le modèle de compétition dans un chemostat vérifie le principe de l'exclusion compétitive : seule l'espèce qui nécessitant le moins de ressources pour croître survit.

### Prise en compte de fonctions de croissance non-monotones

Dans le cas de fonctions de croissance non monotones, Butler et Wolkowicz [10] montrent en 1985 que le principe d'exclusion compétitive est également vérifié. Mais ces travaux supposent que toutes les espèces ont le même taux de disparition  $D$ , égal au taux de dilution (c'est à dire que la seule source de mortalité cellulaire est la dilution). En 1992, Wolkowicz et Lu [108] utilisent des fonctions de Lyapunov pour montrer que, toujours dans le cas de fonctions de croissance de forme moins générales, mais avec des taux de disparition différents pour chaque espèce, le principe d'exclusion compétitive est encore vérifié.

#### 1.5.5 Modèles spatialement structurés

Dans les écosystèmes naturels, ou bien dans les applications industrielles où on utilise des grands bioréacteur, l'hypothèse du parfaitement mélangé est mise en question. Pour cela, des considérations spatiales sont introduites dans le modèle classique du chemostat. La première approche, instaurée par Lovitt et Wimpenny en 1979 [62], dans un cadre expérimental, consiste en  $P$  chemostats homogènes reliés entre eux. Un tel système est appelé gradostat. Donc dans le modèle du gradostat, l'hypothèse de chemostat *parfaitement mélangé* est remplacée par l'hypothèse de  $P$  chemostats de même volumes parfaitement mélangés qui sont reliés entre eux. Ces  $P$  chemostats homogènes montés en série (1.11) et interconnectés de manière à échanger la ressource et les organismes. Chaque réservoir est appelé un *patch*.

Sur chaque patch, on suit la dynamique locale explicitée par le système (1.25). Le taux de mortalité est supposé nul. Si chaque volume  $V_j$  du  $j$ -ème patch est constant, on obtient, pour tout  $j$ , le système différentiel suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{s}^j = (s^{j-1} - 2s^j + s^{j+1})D - \sum_{i=1}^n \mu_i(s^j)x_i^j, \\ \dot{x}_i^j = (x_i^{j-1} - 2x_i^j + x_i^{j+1})D + \mu_i(s^j)x_i^j, \\ s^0 = s_{in}, \quad x_i^0 = 0, \\ s^{n+1} = x_i^{n+1} = 0, \quad i = 1 \dots n. \end{array} \right. \quad (1.27)$$

où  $s^j$  et  $x_i^j$  représentent la concentration en substrat et en biomasse  $i$  dans le  $j$ -ème patch, et  $D$  le taux de

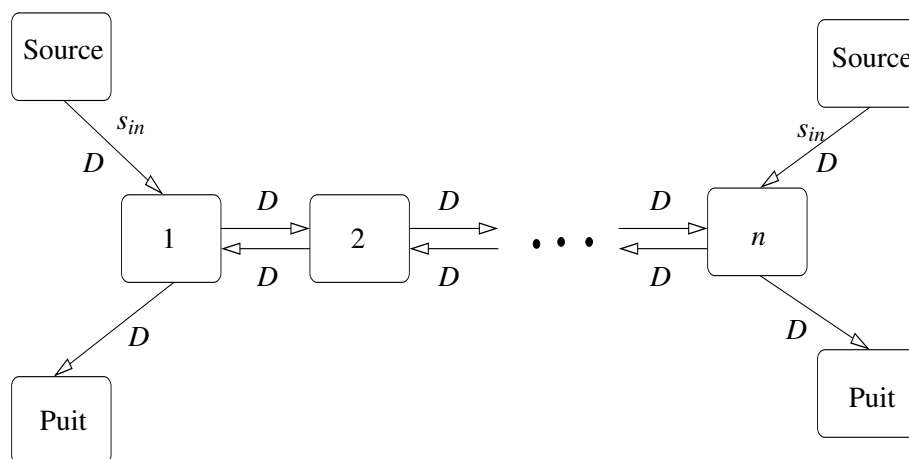


FIG. 1.11 – Un gradostat

dilution.

La considération d'une série de chemostats, au lieu d'un simple chemostat, a montré une potentialité dans l'amélioration de la performance des bioprocédés, en réduisant le temps de séjour total [35, 38–40, 44, 64] ou en permettant la persistance des espèces [78, 86, 102]. Ces propriétés ont bien sûr des impacts économiques sur l'industrie biotechnologique, et il existe une littérature significative sur la conception d'une série de réacteurs et la comparaison avec des réacteurs piston (qui peut être vu comme *un cas limite* d'un grand nombre de réservoirs de petits volumes) [17–19, 29, 30, 79, 87]. Parfois, une diffusion radiale est également pris en compte dans des réacteurs piston [31]. Le sujet du chapitre 3 de cette thèse entre exactement dans ces considérations spatiales où on va étudier l'effet d'une structuration spatiale (en série ou en parallèle avec un taux de diffusion) sur le rendement d'un chemostat.

### 1.5.6 Extensions de modèle du chemostat

#### Recyclage dans le chemostat

Si l'on suppose que le taux de dilution  $D$  est très faible, alors le temps de résidence des espèces dans le chemostat est grand, et il y a mortalité microbienne. Certains auteurs justifient par exemple l'utilisation d'une valeur très faible de  $D$  dans la modélisation des lacs. Dans le cas où il y a mortalité, on peut soit ignorer le devenir des cellules mortes, soit essayer de les suivre. Sur le plan expérimental, malgré l'extrême rigueur apportée à la filtration du milieu d'alimentation, il subsiste toujours dans ce dernier des bactéries. Puisque le temps de résidence des cellules est grand, cela est vrai aussi pour les cellules

mortes. La dégradation des cellules mortes fournit des matières organiques, qui viennent s'ajouter au substrat disponible pour la croissance des cellules. La quasi totalité des auteurs ayant considéré ce problème, ont introduit un retard dans les modèles du chemostat : la dégradation n'est pas un processus instantané, il y a donc un retard entre la mort d'une cellule et sa recirculation sous forme de substrat. Les articles de Beretta et Takeuchi [8,9] établissent la stabilité de l'équilibre non trivial d'un modèle de Monod avec recyclage retardé des organismes morts. Dans le cas où le recyclage est instantané, l'équilibre est globalement stable. Bien que n'étant pas présent dans les premiers articles sur le sujet, ils sont à l'origine de bien des développements ultérieurs, du fait de leur rigueur et de la grande généralité des résultats qu'ils établissent. Ainsi, ils sont à l'origine des travaux de [41–43, 109], qui traitent chacun d'extensions et de généralisations de [8,9], dans le cas de noyaux de retard plus généraux, de fonctions de croissance plus générales, etc.

Plusieurs études mathématiques ont adressé les modèles pour les cultures en continue (chemostat) avec la réutilisation de substrat [6, 7, 21, 48, 49, 63, 90, 91, 104, 112, 114] .

Quelques auteurs ont fait le lien entre les modèles avec recyclage et les problèmes de compétition. Freedman, So et Waltman [22] sont les premiers qui ont étudié ce problème, dans un article qui est également le premier (à notre connaissance) des articles consacrés au retard dans le chemostat. Ils introduisent un retard dans l'absorption des nutriments, ce qui est assez différent, dans le principe, des retards dus au recyclage. Ruan et He [92] (repris dans [93]), puis Wolkowicz et Xia [109], et enfin Wolkowicz et al. [110], ont étudié le cas de la compétition dans un chemostat avec recyclage des organismes morts, pour différents types de retards (discrets, distribués). Lu et Haderer [34] se sont intéressés quant à eux au problème du recyclage dans le cas de la compétition entre organismes porteurs de plasmides et organismes dépourvus de plasmides, lorsqu'il y a recyclage des nutriments et présence d'un inhibiteur. Ceci est un problème qui est assez spécifique de la microbiologie. Enfin, Kandil [54] a étudié en 2000 le cas de la compétition de trois espèces, lorsque le recyclage est instantané.

### **Épuration biologique**

Un procédé de traitement d'eaux usées par boues activées faisant intervenir des bactéries floculantes et filamenteuses est modélisé par Cenens [12]. Il s'agit d'un cas de culture continue avec compétition pour un même substrat. Les croissances des deux souches (floculantes et filamenteuses) sont représentées par une loi de Monod. Deux configurations sont envisagées : un procédé de culture continue bien agité de type chemostat, et un procédé complet de dépollution par boues activées comprenant un aéra-



teur et un bassin de décantation dont une partie de la charge est recyclée (fraction  $r$ ) et une autre est purgée (fraction  $w$ ).

Comme dans tous les procédés continus mettant en oeuvre des micro-organismes en compétition vis-à-vis d'un substrat, l'équilibre du système est dicté par les variables de transport du milieu actif  $D$ ,  $r$  et  $w$ . Quatre types d'équilibres sont mis en évidence : La coexistence des deux souches, la disparition de la souche floculante et le maintien de la souche filamenteuse, la disparition de la souche filamenteuse et le maintien de la souche floculante et la disparition des deux souches. Les deux procédés sont décrits par les deux systèmes suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{s} = D(s_{in} - s) - \frac{\mu_1(s)}{Y_1}x_1 - \frac{\mu_2(s)}{Y_2}x_2 \\ \dot{x}_1 = (\mu_1(s) - D)x_1 \\ \dot{x}_2 = (\mu_2(s) - D)x_2 \end{array} \right. \quad \text{et} \quad \left\{ \begin{array}{l} \dot{s} = D(1+r)(s_{in} - s) - \frac{\mu_1(s)}{Y_1}x_1 - \frac{\mu_2(s)}{Y_2}x_2 \\ \dot{x}_1 = \left( \mu_1(s) - \frac{w(1+r)}{(r+x)}D \right) x_1 \\ \dot{x}_2 = \left( \mu_2(s) - \frac{w(1+r)}{(r+x)}D \right) x_2 \end{array} \right.$$

avec  $s$  la concentration en substrat,  $x_1$  la concentration en bactéries floculantes dans l'aérateur,  $x_2$  la concentration en bactéries filamenteuses dans l'aérateur,  $r$  le taux de recyclage au décanteur,  $w$  le taux de purge au décanteur,  $D$  le taux de dilution,

$$\mu_1(s) = \mu_{max,1} \frac{s}{k_{s,1} + s} \quad \text{et} \quad \mu_2(s) = \mu_{max,2} \frac{s}{k_{s,2} + s}.$$

### Digestion anaérobie

La digestion anaérobie, ou méthanisation, est le processus naturel de dégradation de la matière organique en absence d'oxygène. Il se retrouve dans les sédiments, les marais, les rizières, ainsi que dans le tractus digestif de certains animaux (termites, ruminants,...). La caractéristique principale de la méthanisation est que la quasi totalité de la matière organique dégradée se retrouve sous forme de biogaz, composé de méthane à plus de 50%. Ce biogaz peut donc être valorisé sous forme d'énergie. Aujourd'hui, la méthanisation est utilisée dans les procédés de dépollution pour réduire la charge polluante des effluents et des résidus, pour produire du biogaz.

La méthanisation est assurée grâce à l'action concertée de microorganismes appartenant à différentes populations microbiennes en interaction constituant un réseau trophique. On distingue classiquement trois phases successives : l'hydrolyse et l'acidogénèse, l'acétogénèse et la méthanogénèse.

La méthanisation de la matière organique se déroule en plusieurs étapes. La matière organique complexe est tout d'abord hydrolysée en substances simples par voie enzymatique. Ensuite, ces substrats sont utilisés par les espèces dites acidogènes, qui vont produire des alcools et des acides organiques, ainsi que de l'hydrogène et du  $CO_2$ . La dégradation des acides organiques conduit ensuite à la production d'acétate (c'est l'acétogénèse). La dernière étape est la production de méthane, qui est réalisée par deux voies possibles : l'une à partir de l'hydrogène et du  $CO_2$  par les espèces dites hydrogénotrophes, et l'autre à partir de l'acétate par les espèces acétotrophes. La matière organique dégradée se retrouve principalement sous la forme de biogaz (à plus de 90%). Le reste est utilisé pour la croissance et la maintenance des micro-organismes.

- L'hydrolyse et l'acidogénèse : La matière organique complexe est tout d'abord hydrolysée en molécules simples. Cette décomposition est réalisée par des enzymes exo-cellulaires et peut devenir l'étape limitante dans le cas de composés difficilement hydrolysables tels que la cellulose, l'amidon ou les graisses. Ensuite, ces substrats sont utilisés lors de l'étape d'acidogénèse par les espèces microbiennes dites acidogènes, qui vont produire des alcools et des acides organiques, ainsi que de l'hydrogène et du dioxyde de carbone.
- L'acétogénèse : L'étape d'acétogénèse permet la transformation des divers composés issus de la phase précédente en précurseurs directs du méthane : l'acétate, le dioxyde de carbone et l'hydrogène. On distingue deux groupes de bactéries acétogènes :

Les bactéries productrices obligées d'hydrogène, anaérobies strictes, également appelées OHPA ("Obligate Hydrogen Producing Acetogens"). Elles sont capables de produire de l'acétate et de l' $H_2$  à partir des métabolites réduits issus de l'acidogénèse tels que le propionate et le butyrate. L'accumulation d'hydrogène conduit à l'arrêt de l'acétogénèse par les bactéries OHPA. Ceci implique la nécessité d'une élimination constante de l'hydrogène produit. Cette élimination peut être réalisée grâce à l'association syntrophique de ces bactéries avec des microorganismes hydrogénotrophes.

Les bactéries acétogènes non syntrophes ont un métabolisme majoritairement orienté vers la production d'acétate. Elles se développent dans les milieux riches en dioxyde de carbone. Les bactéries "homo-acétogènes" font partie de ce groupe, et utilisent l'hydrogène et le dioxyde de carbone pour produire de l'acétate. Elles ne semblent pas entrer en compétition pour l'hydrogène avec les Archaea méthanogènes hydrogénotrophes et sont présentes en quantité beaucoup plus faible dans les biotopes anaérobies.

- La méthanogenèse : La méthanogenèse est assurée par des micro-organismes anaérobies pour la production de méthane. Elle est réalisée par deux voies possibles : l'une à partir de l'hydrogène et du dioxyde de carbone par les espèces dites hydrogénotrophes, et l'autre à partir de l'acétate par les espèces acétotrophes. Leur taux de croissance est plus faible que celui des bactéries acidogènes.

## 1.6 Conclusion

Nous avons présenté les équations de base et les plus importantes utilisées dans les modèles de transport réactif et, donné un aperçu sur les lois cinétiques microbiennes. Ainsi on a introduit le modèle MIN3P qui est très connu dans le domaine de modélisation d'un sol poreux variablement saturé et qui contient un réseau complexe de réactions biogéochimiques. Nous avons aussi introduit le modèle mathématique du chemostat. Nous avons donné les principaux propriétés du modèle du chemostat, qui est couramment pour décrire la dynamique d'une population dans un chemostat.



## Chapitre 2

# Comparaison des simulations numériques d'un modèle de transport réactif avec des modèles de type chemostat

---

---

### 2.1 Résumé

L'objectif de ce chapitre est d'évaluer la capacité des modèles de transport réactif et ses implémentations numériques (comme MIN3P) à simuler des simples transformations microbiennes dans des conditions des modèles du chemostat ou du gradostat, qui sont bien connus en écologie microbienne et en biotechnologie. Pour effectuer cette comparaison, nous avons considéré au début un écosystème abstrait composé d'un seul substrat et d'une seule biomasse qui sont transportés par advection. Dans une deuxième étape, nous considérons une deuxième espèce microbienne qui est en compétition pour le même substrat limitant. En comparant les solutions numériques des deux modèles, nous avons constaté que la précision numérique des simulations des modèles du transport réactif réalisées avec MIN3P dépend de l'évolution des concentrations des espèces microbiennes : quand l'état du système est proche d'un équilibre non-hyperbolique, on observe une imprécision numérique qui peut être due à la méthode de discrétisation utilisée dans les approximations numériques des équations du transport réactif. Par conséquent, il faut être prudent sur les prédictions données par ces modèles.

## 2.2 Introduction

Au cours des trois dernières décennies, de nombreux codes numériques de transport réactif ont été développés pour étudier les interactions complexes entre les processus géochimiques et de transport en milieux poreux. Citons par exemple les modèles COMEDIE-2D [15], CRUNCH [99], PHREEQC [83], ECOSAT [55], ORCHESTRA [72], RAFT [13], RT3D [14], HYTEC [58], HP1 [47] et MIN3P [70]. À notre connaissance, certains de ces outils numériques, comme COMEDIE-2D et PHREEQC, ne sont pas adaptés pour les milieux poreux non saturés et donc ne peuvent pas être facilement appliqués aux sols (sauf dans le cas particulier des sols humides (*wetland*)). On peut trouver aussi d'autres limitations. Par exemple, RT3D ne comprend pas les réactions contrôlées par les équilibres, alors que ECOSAT néglige les réactions cinétiquement contrôlées et est limité à une seule dimension d'espace.

L'approche classique pour évaluer la précision de calcul d'un code du transport réactif est de comparer ses résultats numériques à ceux obtenus à partir d'une solution analytique ou bien semi-analytique [23, 25, 82, 103]. Malheureusement, les solutions analytiques ne sont disponibles que pour des systèmes extrêmement simplifiés, comme le transport d'un soluté unique dans un système homogène unidimensionnel à l'état d'équilibre, qui est bien loin d'être représentatif des capacités des modèles actuels. Pour y remédier, une inter-comparaison des codes numériques a été largement employée. Cette inter-comparaison implique la solution du même problème dans des différents codes en utilisant une variété de techniques numériques [11, 15, 16, 24, 71].

Cette étude vise à comparer la précision d'un modèle du transport réactif avec d'autres types de modèles tel que le modèle mathématique du chemostat. Cette confrontation a lieu dans le cadre de l'écologie microbienne, dont les concepts de la compétition et la coexistence sont cruciaux [1, 10, 36, 86, 101, 102] pour cette étude. Nous avons choisi le modèle du transport réactif MIN3P [70] pour cette étude. Ce modèle de transport réactif est notamment reconnu pour sa robustesse numérique [11, 71].

Le modèle du chemostat est le modèle mathématique le plus simple pour décrire la dynamique de la croissance microbienne dans un flux constant de substrat, et sa théorie est bien comprise [98]. Dans ce travail, nous considérons une série de chemostats interconnectés pour la simulation d'une hétérogénéité unidimensionnelle, que l'on compare avec les solutions fournies par les modèles du transport réactif en considérant la même structure spatiale.

## 2.3 Matériel et méthode

Comme on l'a défini au chapitre précédent, en pratique, un chemostat dans un laboratoire est un appareil composé de trois réservoirs connectés comme le montre la figure 2.1. Le réservoir de gauche contient tous un nutriment limitant nécessaire pour la croissance d'un micro-organisme, alimente à un débit volumique constant le réservoir central dans lequel se déroule la réaction, et par suite le contenu du réservoir central est pompé au même débit dans le troisième réservoir. On rappelle que le modèle dynamique du chemostat, en présence d'une seule biomasse est donné par le système suivant

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{s} = -\frac{\mu(s)}{\gamma}x + D(s_{in} - s) \\ \dot{x} = (\mu(s) - D)x \\ s(0) \geq 0, x(0) \geq 0 \end{array} \right. \quad (2.1)$$

où  $s, x$  représente la concentration en substrat et en biomasse respectivement,  $D[s^{-1}]$  le taux de dilution,  $\mu(\cdot)[s^{-1}]$  la cinétique de croissance de la biomasse et  $\gamma$  le facteur du rendement de la bio-conversion.

A cause des conditions aux bords (i.e apport de nutriments dans le récipient de culture et sortie de contenu du récipient de culture), les implémentations numériques des modèles du transport réactif tel que MIN3P ne sont pas capables de simuler un seul écosystème comme celui du récipient de culture. En effet, l'utilisation du logarithme de la concentration dans le code numérique empêche d'avoir une concentration nulle en biomasse à l'entrée du récipient de culture. Afin de simuler un écosystème dans un seul réservoir, il faut considérer trois volume-contrôles. Par ailleurs, pour des raisons intrinsèques à MIN3P, trois "contrôle-volume" est le nombre minimum pour une discrétisation unidimensionnelle dans les implémentations numériques du modèle MIN3P. Dans ce sens, l'implémentation numérique est plus proche de la vraie expérience du laboratoire avec trois récipients, que nous avons décrite ci-dessus. Toutefois, nous nous référons dans la suite au *chemostat* pour le récipient de culture seulement.

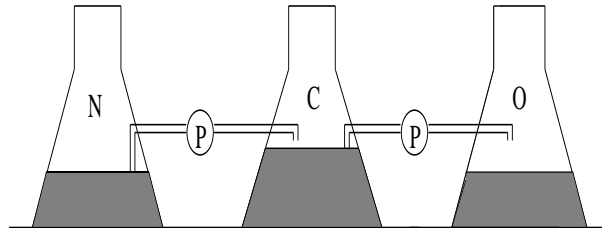


FIG. 2.1 – Une vue schématique d'un chemostat de laboratoire

Avec MIN3P nous avons commencé par simuler un simple modèle de trois chemostats en série ayant le même volume, en présence d'une seule biomasse  $x$  et d'un seul substrat  $s$  avec les mêmes conditions initiales dans les trois "contrôle-volume". Le modèle dynamique qui représente  $n$  chemostats en série est donné par les équations suivantes

$$\begin{cases} \dot{s}_i = -\frac{\mu(s_i)}{\gamma_i}x_i + D_i(s_{i-1} - s_i) \\ \dot{x}_i = (\mu(s_i) - D_i)x_i + D_ix_{i-1}, \quad i = 1, \dots, n \end{cases}$$

où  $D_i = Q/V_i$ ,  $s_i$  (resp  $x_i$ ) représentent la concentration en substrat (resp la concentration en biomasse) dans le  $i$ -ème bioréacteur ( $i = 1, \dots, n$ ), avec  $s_0 = s_{in}, x_0 = 0$  et  $V_i = \frac{V}{n}$ .

Le comportement qualitatif de ce système d'équations différentielles ordinaires (EDO) est aujourd'hui bien compris (voir la section 1.5 et 2.5), que pour lequel on utilise différents schémas numériques robustes pour résoudre ce système d'EDO (Runge-Kutta, LSODA ...) qui ont été tous parfaitement consistents avec l'étude analytique des états d'équilibres et de leur stabilité. Cela nous amène à faire confiance aux solutions numériques obtenues par l'intégration numérique des EDOs de ce modèle.

Pour simuler le modèle du chemostat avec les modèles du transport réactif, nous avons considéré un

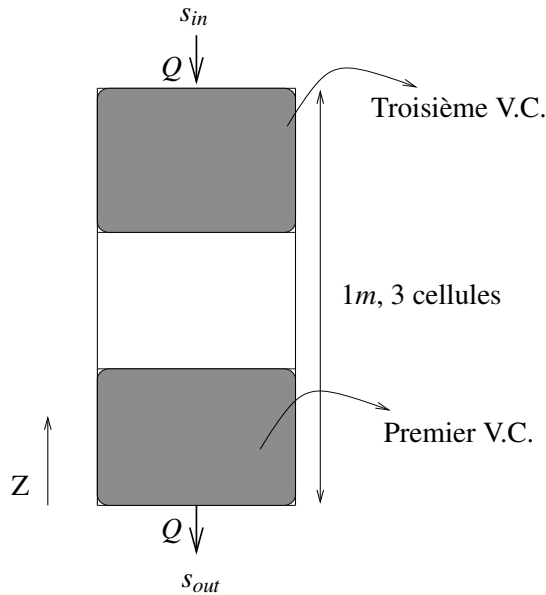


FIG. 2.2 – Configuration de trois "contrôle-volume"

domaine borné tridimensionnel. Les conditions aux bords pour l'écoulement de l'eau sont de type Di-



richlet et valent 0 sur la face de sortie, et de type Neumann sur la face d'entrée spécifiant un débit  $Q[l.s^{-1}]$ . Un choix spécifique de  $Q$  nous a donné un milieu qui est parfaitement saturé pour tout temps. Les conditions aux bords concernant la partie réactive du problème sont de type Neumann sur la face de sortie et de type Robin sur la face d'entrée avec une valeur égale à  $s_{in}$  pour la concentration en substrat. Pour simuler plusieurs chemostats connectés en série sans diffusion, nous avons choisi le coefficient de diffusion dans l'eau et dans l'air, ainsi que le coefficient spécifique du stockage égale à zéro. La porosité du milieu formé d'une seule zone est choisie égale à 1. L'unité du temps choisie est le jour, avec un pas de temps maximal de  $10^{-3}$  jour et un pas de temps initial de l'ordre de  $10^{-10}$  jour.

Finalement, nous avons considéré une simple réaction irréversible exprimant la bio-conversion d'une mole du substrat en mole de biomasse. La cinétique de croissance spécifique à la biomasse considérée ici est de type Monod :

$$\mu(s) = \frac{\mu_{max} \cdot s}{k_s + s},$$

avec  $\mu_{max}[s^{-1}]$  représente le maximum de la réaction cinétique et  $k_s[mol/l]$  la constante de demi-saturation.

Dans une deuxième étape, nous gardons les mêmes considérations spatiales mais cette fois-ci avec deux espèces, en supposant que chaque espèce à une fonction de croissance qui suit la loi de Monod. On considère que la ressource limitante est le seul facteur limitant, et que les espèces n'entrent en compétition que via leur consommation de la ressource commune. On se concentre sur le cas d'une "vraie" compétition, dans le sens que celui des compétiteurs qui utilise le mieux le substrat en faible quantité survit et les autres s'éteignent.

## 2.4 Résultats et discussion

Notons par  $s_M^*$  (resp.  $s_C^*$ ) la valeur de la concentration en substrat calculée par MIN3P (resp. par le modèle du chemostat) à l'équilibre, et par  $x_M^*$  la valeur de la concentration en biomasse donnée par MIN3P à l'équilibre. Soit  $\delta$  la valeur absolue de la différence entre  $s_M^*$  et  $s_C^*$ , qui sert d'indicateur de divergence entre les simulations des deux modèles.

Pour la comparaison des deux modèles, nous représentons d'abord l'indicateur  $\delta$  comme une fonction de  $Q$ . Puis, pour étudier l'effet d'une discrétisation spatiale, nous examinerons ensuite  $\delta$  en fonction du

nombre de cellules.

Pour simplifier l'écriture, nous omettons de préciser les unités des valeurs numériques que nous donnons ci-dessous (les concentrations sont supposées être mesurées en  $mol.l^{-1}$ , les volumes en  $l$ , les flux en  $l.s^{-1}$  et les taux de croissance en  $s^{-1}$ ).

### 2.4.1 Cas d'une seule espèce

Pour les simulations, nous avons choisi  $s_{in} = 3, k_s = 1, x(0) = 2$  et  $s(0) = 5$ .

En choisissant  $\mu_{max} = 4.10^{-5}$ , nous avons étudié la variation de  $\delta$  par rapport à  $Q$  dans le premier et le troisième "contrôle-volume". Selon les graphes de  $\delta$  qui correspondent au premier (resp. troisième) "contrôle-volume" (voir Figure 2.3, Sortie (resp. Entrée)), nous remarquons que pour  $10^{-6} \leq Q \leq 10^{-5}$ , on se trouve avec une différence significative entre les simulations des deux modèles dans le "contrôle-volume" d'entrée, et qui est encore plus grande dans le "contrôle-volume" de sortie. Mais pour  $10^{-5} \leq Q \leq 15.10^{-6}$ , on n'a presque pas de différence dans le "contrôle-volume" d'entrée, et on observe un saut de  $\delta$  au voisinage de  $Q = 10^{-5}$  dans le "contrôle-volume" de sortie.

Nous savons d'après la théorie du chemostat (voir la section 2.5, Proposition 2.1), que pour un volume parfaitement mélangé, en présence d'une seule espèce qui croît sur un seul substrat limitant, la condition  $\frac{\mu(S_{in})}{D} > 1$  assure que la biomasse  $x$  ne sera pas lessivée à l'équilibre. Malheureusement, ce résultat n'a pas été observé dans les simulations avec MIN3P. Pour montrer cela, nous avons étudié la variation de la concentration de la biomasse  $x$  par rapport à  $Q$  dans le "contrôle-volume" d'entrée. Nous observons que la biomasse est lessivée pour  $Q \geq 8.10^{-6}$  (voir Figure 2.3,  $x_M^*$  en pointillés). Or, lorsque  $8.10^{-6} \leq Q < 10^{-5}$ , nous avons  $\frac{\mu(S_{in})}{D_1} = \frac{10^{-5}}{Q} > 1$ , et on peut observer sur le graphe de  $\delta$  la différence entre les simulations obtenues par les deux modèles dans le "contrôle-volume" d'entrée.

Dans le cas de trois chemostats de même volume connectés en série et traversés par le même débit  $Q$ , le lessivage de la biomasse dans le "contrôle-volume" d'entrée doit conduire théoriquement à son lessivage dans le "contrôle-volume" de sortie. Or ce n'est pas le cas avec MIN3P et nous pouvons remarquer sur la figure 2.3 (Sortie), que pour  $8.10^{-6} \leq Q \leq 15.10^{-6}$ , nous atteignons le lessivage de la biomasse dans le "contrôle-volume" d'entrée, et la biomasse dans le "contrôle-volume" de sortie n'étant pas encore lessivée. En d'autres termes, sous certaines conditions, les croissances microbiennes prédites par les deux simulations sont radicalement différentes.

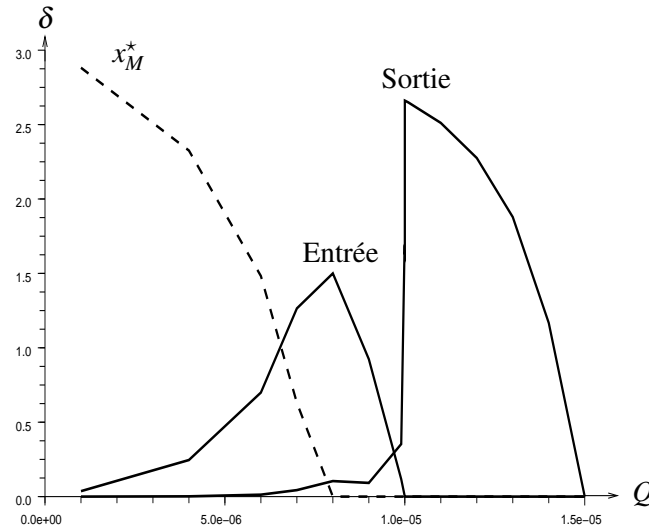


FIG. 2.3 – Comparaison pour trois "contrôle-volume"

Pour étudier l'effet d'une discrétisation spatiale sur la différence obtenue entre les deux modèles à l'équilibre, nous avons pris les mêmes conditions que précédemment, avec une croissance spécifique maximale égale à  $\mu_{max} = 5 \cdot 10^{-4}$  et un débit  $Q = 10^{-5}$ . Nous avons fait varier le nombre de discrétisation entre  $n = 3$  et  $n = 50$  et nous avons étudié la variation de  $\delta$  par rapport à  $n$  (le nombre total de cellules) dans les "contrôle-volume" d'entrée. Notons par  $D_n$  le taux de dilution dans chaque "contrôle-volume" pour une discrétisation en  $n$  cellules. Sur les graphes de  $\delta$  qui correspondent au "contrôle-volume" d'entrée (resp. de sortie) (voir Figure 2.4, Entrée (resp. Sortie)), nous observons que pour  $3 \leq n \leq 37$ , des valeurs qui correspondent théoriquement à la survie de la biomasse, car on a  $\frac{\mu(S_{in})}{D_n} = \frac{75}{2n} > 1$ , nous avons le même allure de  $\delta(\cdot)$  que précédemment. De même, pour  $39 \leq n \leq 50$ , valeurs qui correspondent à  $\frac{\mu(S_{in})}{D_n} < 1$ , on n'a pas de différence significative entre le modèle MIN3P et du chemostat dans "contrôle-volume" d'entrée et de sortie. Mais pour  $n = 38$ , nous observons le même saut de  $\delta$ , tel observé précédemment dans le "contrôle-volume" de sortie.

Nous avons observé avec cet exemple une différence significative entre les simulations du modèle du transport réactif et celui du chemostat en passant de l'état d'un équilibre stable qui correspond à la survie de la biomasse à l'état du lessivage, ce qui correspond à une bifurcation en passant de deux états d'équilibres (le lessivage et la survie de la biomasse) vers un seul (le lessivage). Le cas limite correspond

à un équilibre non-hyperbolique (voir l'Appendice pour la définition d'un équilibre non-hyperbolique). En raison de l'utilisation du logarithme dans le code MIN3P, nous attendons de la solution interne qu'elle prenne de grandes valeurs lorsque la concentration en biomasse tend vers zéro. On peut également expliquer ce phénomène dans les simulations en remarquant le décalage entre les trajectoires données par MIN3P et celle du chemostat proche de l'équilibre.

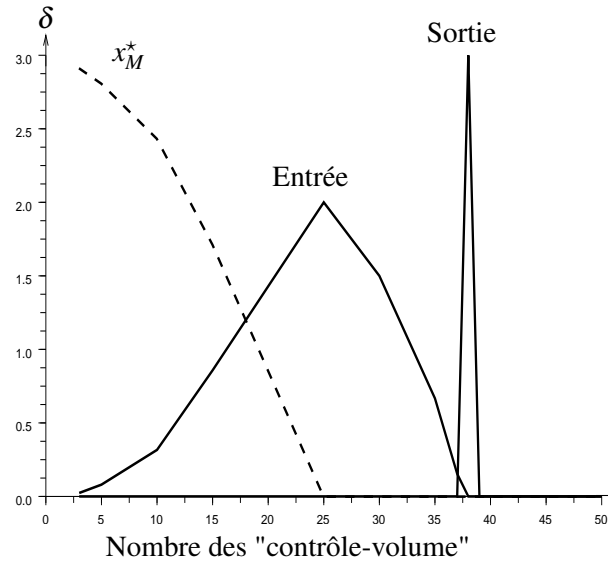


FIG. 2.4 – Comparaison avec plusieurs "contrôle-volume"

### 2.4.2 Cas de deux espèces

Afin de souligner le problème qui se produit au voisinage d'un équilibre non-hyperbolique dans le cas d'un seul espèce, on présente dans cette partie une situation plus délicate, en considérant deux espèces en compétition pour le même substrat. On rappelle que le modèle dans ce cas est donné par les équations suivantes

$$\begin{cases} \dot{s} &= -\frac{\mu_1(s)}{\gamma_1}x_1 - \frac{\mu_2(s)}{\gamma_2}x_2 + D(s_{in} - s) \\ \dot{x}_1 &= (\mu_1(s) - D)x_1 \\ \dot{x}_2 &= (\mu_2(s) - D)x_2 \end{cases} \quad (2.2)$$

où  $\mu_1(\cdot)$  et  $\mu_2(\cdot)$  représentent les cinétiques des espèces  $x_1$  et  $x_2$  respectivement. Pour ce système, la proposition 2.2 donnée dans la section 2.5 montre que des points d'équilibre non-hyperboliques pourraient

exister loin de l'équilibre du lessivage. Dans le cas d'une seule espèce, un équilibre non-hyperbolique, pourrait exister, mais il appartient uniquement à la frontière du domaine positif. Par contre, pour les cas de deux espèces, un équilibre non-hyperbolique peut exister à l'intérieur du domaine positif.

Soit  $\lambda_i$  la solution positive, lorsqu'elle existe, de  $\mu_i(s) = D$  pour  $i = 1, 2$ . Sous la condition  $s_{in} \geq \max(\lambda_1, \lambda_2)$ , le système (2.2) admet généralement trois points d'équilibre, qui sont donnés par  $E_0(s_{in}, 0, 0)$ ,  $E_1(\lambda_1, \gamma_1(s_{in} - \lambda_1), 0)$  et  $E_2(\lambda_2, 0, \gamma_2(s_{in} - \lambda_2))$ . On distingue maintenant deux cas différents. Si pour un certain  $i = 1, 2$  on a  $\lambda_i = s_{in}$ , alors l'équilibre  $E_0$  est non-hyperbolique comme précédemment (voir Proposition 2.1 dans la section 2.5). Par ailleurs si on a  $\lambda_1 = \lambda_2 < s_{in}$ , alors  $E_1 = E_2$  est aussi un équilibre non-hyperbolique. Partant de nos observations dans le cas d'une seule espèce, nous avons construits des exemples pertinents pour étudier le comportement de MIN3P au voisinage de ces équilibres non-hyperboliques.

Pour les simulations, nous avons considéré deux espèces  $x_1$  et  $x_2$  avec une fonction de croissance spécifique donnée par :

$$\mu_1(s) = 1.10^{-3} \frac{s}{5+s} \quad \text{et} \quad \mu_2(s) = 3.10^{-3} \frac{s}{30+s} .$$

Le comportement global du système (2.2) est donné dans le chapitre précédent par le Principe d'Exclusion Compétitive 1.5.4. On peut remarquer d'après la figure 2.5 (gauche) que les graphes de ces deux fonctions s'intersectent en un point différent de zéro. Ceci implique que selon la valeur du taux de dilution  $D$ , la valeur correspondante à  $\lambda_1$  peut être plus petite ou plus grande que  $\lambda_2$ . La concentration du substrat à l'entrée  $s_{in}$  est choisie égale à 20 et le vecteur d'état initial a été fixé à  $(s(0), x_1(0), x_2(0)) = (5, 2, 3)$ . Un calcul simple montre que pour  $Q = 2.10^{-4}$ , on a  $\lambda_1 = \lambda_2 = \frac{15}{2} < s_{in}$ . Par suite, pour ce choix de  $\mu_1, \mu_2$  et  $Q$  le système dynamique (2.2) admet des points d'équilibre non-hyperbolique positifs. Nous avons étudié numériquement l'évolution de la concentration des deux espèces au voisinage de ces équilibres dans les deux modèles, selon le choix du débit  $Q$ . Dans ce but, nous avons tracé les courbes de la concentration à l'équilibre des espèces donnée par MIN3P et le modèle de chemostat dans le "contrôle-volume" d'entrée (voir Fig. 2.5, droite), noté par  $x_{M,i}^*$  (resp.  $x_{C,i}^*$ ) pour l'espèce  $i = 1, 2$ . Nous observons que pour  $Q \leq 10^{-5}$ , les deux simulations présentent quasiment les mêmes solutions. Lorsque  $Q$  augmente, une différence entre les deux modèles commence à apparaître jusqu'à ce qu'on détecte une prédiction erronée à propos de l'espèce qui va gagner la compétition. Cela se produit pour  $15.10^{-5} \leq Q \leq 4.10^{-4}$ . Pour  $Q \geq 4.10^{-4}$ , les deux simulations présentent à nouveau presque les mêmes solutions.

Nous avons donc observé une autre différence significative entre les simulations d'un modèle du transport réactif et le modèle du chemostat au voisinage d'un point de bifurcation, où l'espèce qui gagne la compétition change.

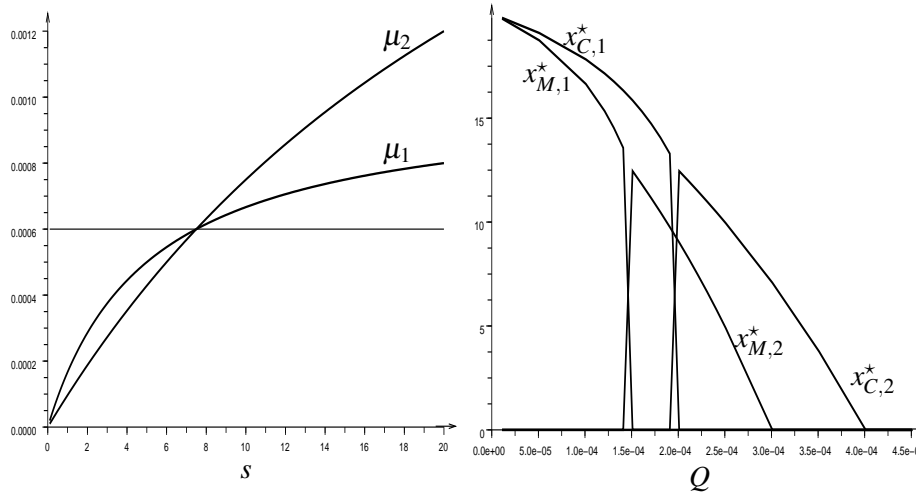


FIG. 2.5 – Deux espèces en compétition dans un seul chemostat

Pour étudier l'effet d'une discrétisation spatiale dans le cas de deux espèces, nous avons choisi un exemple précis de vingt compartiments parfaitement mélangés et qui sont connectés en série. Les volumes  $V_i (i = 1, \dots, 20)$ , la concentration en substrat entrant  $s_{in}$ , le débit  $Q$  ainsi que les cinétiques de croissance  $\mu_1(\cdot)$  et  $\mu_2(\cdot)$  sont choisis comme suit, de telle manière que l'espèce  $x_1$  passe de l'état de lessivage (dans  $V_1, V_2$  et  $V_3$ ) vers l'état de coexistence (dans  $V_i, i = 4, \dots, 20$ ).

$$\begin{aligned}
 V_1 &= 10 \cdot 10^{-2} & \mu_1(s) &= 4.629 \cdot 10^{-5} \frac{s}{6+s} \\
 V_2 &= 9 \cdot 10^{-2} & \mu_2(s) &= 6.944 \cdot 10^{-5} \frac{s}{18+s} \\
 V_3 &= 1 \cdot 10^{-2} & Q &= 0.3587 \cdot 10^{-5} \\
 V_4 &= 11 \cdot 10^{-2} & s_{in} &= 19.25 \\
 V_5 &= 9 \cdot 10^{-2} & & \\
 V_6 &= \dots = V_{20} = 4 \cdot 10^{-2} & &
 \end{aligned}$$

Dans MIN3P nous avons discrétisé le domaine en vingt "contrôle-volume", et avons comparé les so-

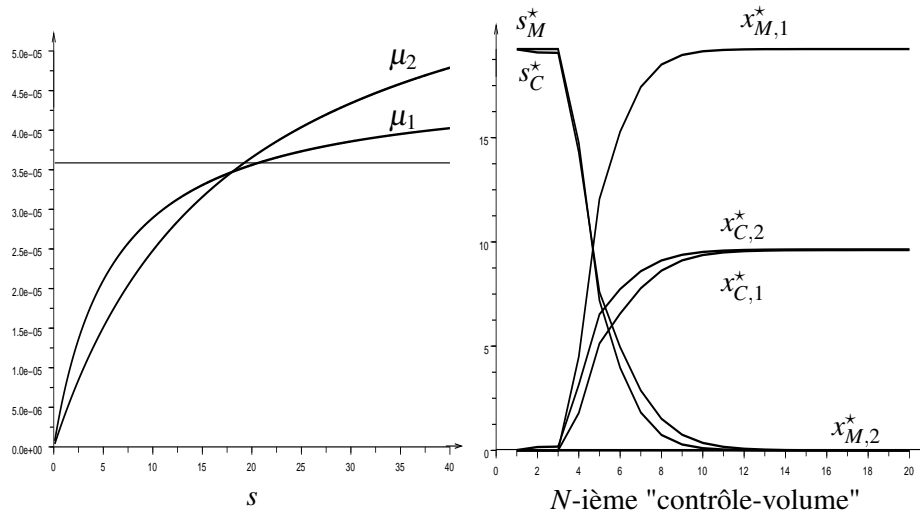


FIG. 2.6 – Deux espèces en compétition dans un série de chemostats

lutions de deux modèles dans chaque "contrôle-volume" à l'équilibre. D'après la figure 2.6 (droite), on peut remarquer que la concentration en substrat calculée à l'équilibre dans les deux modèles sont presque identiques dans les premiers "contrôle-volume". À partir du troisième, les solutions sont différentes, et deviennent radicalement divergente dans les autres "contrôle-volume". Ici, la solution calculée par MIN3P ne prédit pas la coexistence des deux espèces. Il est à souligner que la coexistence des espèces dans le cas de plusieurs chemostats de différents volumes qui sont interconnectés en série, a déjà été démontrée (voir par exemple [86, 102]).

Pour résumer, nous avons montré que dans certaines circonstances, la prédiction de l'espèce qui va gagner la compétition est radicalement différente suivant les simulations de deux modèles.

## 2.5 Stabilité des équilibres

Les notions de stabilité asymptotique exponentielle sont résumées dans l'Appendice.

Pour le modèle du chemostat (2.1), on a le résultat suivant.

**Proposition 2.1** Notons par  $\lambda$  la solution lorsqu'elle existe de  $\mu(s) = D$  et supposons que  $\lambda < s_{in}$ .

- Si  $D < \mu(s_{in})$ , le système (2.1) admet deux points d'équilibres donnés par  $E_1(s_{in}, 0)$ , qui est instable et  $E_2(\lambda, k(s_{in} - \lambda))$ , qui est localement exponentiellement stable.

- Si  $D \geq \mu(s_{in})$ ,  $E_1$  est le seul point d'équilibre positif qui est localement exponentiellement stable, à l'exception du cas où  $D = \mu(s_{in})$  pour lequel il est non-hyperbolique.

*Preuve.* On peut facilement vérifier que pour tout  $t \geq 0$ , les trajectoires du (2.1) restent dans le cône positif, et qu'elles sont bornées : on peut simplement écrire l'équation

$$\frac{dx}{dt} + \gamma \frac{ds}{dt} = D(\gamma s_{in} - x - \gamma s)$$

à partir de laquelle on déduit que  $t \mapsto x(t) + \gamma s(t)$  est bornée et que les trajectoires du système sont bornées. Déterminer les points d'équilibres de système (2.1) revient à résoudre le système suivant

$$\begin{cases} -\frac{\mu(s)}{\gamma}x + D(s_{in} - s) = 0 \\ (\mu(s) - D)x = 0. \end{cases} \quad (2.3)$$

L'équilibre du lessivage  $E_1(s_{in}, 0)$  est toujours une solution, et il y a une possibilité d'un autre point d'équilibre  $E_2(s^*, \gamma(s_{in} - s^*))$  lorsque  $s^* < s_{in}$ , avec  $s^* = \lambda$ . Pour étudier la stabilité de ces points d'équilibre, nous écrivons alors la matrice Jacobienne du système (2.1) :

$$J(s, x) = \begin{pmatrix} -\frac{\mu'(s)}{\gamma}x - D & -\frac{\mu(s)}{\gamma} \\ \mu'(s)s & \mu(s) - D \end{pmatrix}.$$

Ces valeurs propres sont

$$v_1(s, x) = -D < 0$$

et

$$v_2(s, x) = \mu(s) - D - \frac{\mu'(s)}{\gamma}x.$$

En  $E_1$ , on a  $v_2(E_1) = \mu(s_{in}) - D$  et à l'équilibre non-trivial  $E_2$  (lorsqu'il existe), on a  $v_2(E_2) = -\frac{\mu'(s^*)}{\gamma}x^* < 0$ .

Donc, dans le cas où  $\mu(s_{in}) < D$ , on conclut que l'équilibre non-trivial n'existe pas et par suite on a  $E_1$  localement exponentiellement stable. Lorsque  $\mu(s_{in}) > D$ ,  $E_1$  est instable et  $E_2$  est localement exponentiellement stable. Pour le cas particulier  $\mu(s_{in}) = D$ , l'équilibre non-trivial n'existe pas et  $E_1$  est un équilibre non-hyperbolique.

Pour le modèle du chemostat (2.2) avec deux espèces, on a le résultat suivant.



**Proposition 2.2** Notons par  $\lambda_i$  la solution lorsqu'elle existe de  $\mu_i(\lambda_i) = D$ . Sous la condition que  $s_{in} > \max(\lambda_1, \lambda_2)$ , le système (2.2) admet trois points d'équilibres qui sont donnés par  $E_0(s_{in}, 0, 0)$ ,  $E_1(\lambda_1, \gamma_1(s_{in} - \lambda_1), 0)$  et  $E_2(\lambda_2, 0, \lambda_2(s_{in} - \lambda_2))$ . De plus, on a

- lorsque  $\lambda_i < \lambda_j$ ,  $E_i$  est localement exponentiellement stable et  $E_0$  et  $E_j$  ( $j = 1, 2$ ) sont tous les deux instables.
- lorsque  $\lambda_1 = \lambda_2$  alors  $E_1 = E_2$  est un point d'équilibre non-hyperbolique.

*Preuve.* comme précédemment, les points d'équilibres sont donnés par le système suivant

$$\begin{cases} -\frac{\mu_1(s)}{\gamma_1}x_1 - \frac{\mu_2(s)}{\gamma_2}x_2 + D(s_{in} - s) = 0 \\ (\mu_1(s) - D)x_1 = 0 \\ (\mu_2(s) - D)x_2 = 0 \end{cases} \quad (2.4)$$

On peut vérifier qu'il existe au plus trois points d'équilibre  $E_0(s_{in}, 0, 0)$ ,  $E_1(\lambda_1, \gamma_1(s_{in} - \lambda_1), 0)$  et  $E_2(\lambda_2, 0, \lambda_2(s_{in} - \lambda_2))$ .

Pour l'étude de leurs stabilité, on écrit les dynamiques, pour plus de commodité, selon les variables  $(z, x_1, x_2)$  avec

$$z = \frac{x_1}{\gamma_1} + \frac{x_2}{\gamma_2} + s.$$

$$\begin{cases} \frac{dz}{dt} = D(s_{in} - z) \\ \frac{dx_1}{dt} = (\mu_1(z - \frac{x_1}{\gamma_1} - \frac{x_2}{\gamma_2}) - D)x_1 \\ \frac{dx_2}{dt} = (\mu_2(z - \frac{x_1}{\gamma_1} - \frac{x_2}{\gamma_2}) - D)x_2 \end{cases}$$

Dans ces coordonnées, la matrice Jacobienne prend la forme suivante :

$$J(z, x_1, x_2) = \begin{pmatrix} -D & 0 & 0 \\ * & -\frac{\mu'_1(s)}{\gamma_1}x_1 + \mu_1(s) - D & -\frac{\mu'_1(s)}{\gamma_2}x_1 \\ * & -\frac{\mu'_2(s)}{\gamma_1}x_2 & -\frac{\mu'_2(s)}{\gamma_2}x_1 + \mu_2(s) - D \end{pmatrix}.$$

En  $E_0$ , nous pouvons vérifier que  $J(E_0)$  admet trois valeurs propres :

$$v_1(E_0) = -D < 0, \quad v_2(E_0) = \mu_1(s_{in}) - D > 0, \quad v_3(E_0) = \mu_2(s_{in}) - D > 0.$$

Donc  $E_0$  est instable. En  $E_1$ , les valeurs propres sont

$$v_1(E_1) = -D < 0, \quad v_2(E_1) = -\frac{\mu'_1(\lambda_1)}{\gamma_1} \gamma_1 (s_{in} - \lambda_1) < 0, \quad v_3(E_1) = \mu_2(\lambda_1) - D,$$

et par symétrie pour  $E_2$ , on a

$$v_1(E_2) = -D < 0, \quad v_2(E_2) = -\frac{\mu'_2(\lambda_2)}{\gamma_2} \gamma_2 (s_{in} - \lambda_2) < 0, \quad v_3(E_2) = \mu_1(\lambda_2) - D.$$

On peut remarquer que  $\lambda_i < \lambda_j \Leftrightarrow v_3(E_i) < 0$ , et par suite on peut conclure que si  $\lambda_i < \lambda_j$ , alors  $E_i$  est localement exponentiellement stable et  $E_j$  est instable.

Concernant le cas particulier où  $\lambda_1 = \lambda_2$  on trouve que  $v_3(E_1) = v_3(E_2) = 0$ . Par suite, dans ce cas  $E_1$  (qui coïncide avec  $E_2$ ) est un point d'équilibre non-hyperbolique.

## 2.6 Conclusion

Dans ce chapitre, on a montré une possible imprécision dans les modèles numériques du transport réactifs en simulant la dynamique d'un simple écosystème de type chemostat. Notre objectif n'était pas de contester le modèle MIN3P qui a la capacité de simuler des problèmes plus complexes impliquant des flux de matière et un réseau complexe de réactions multicomposants, mais nous voulons souligner le fait que la précision numérique du modèle de MIN3P dépend de l'évolution de la concentration des espèces microbiennes. Lorsque les conditions hydrodynamiques conduisent le système à l'extinction d'un des espèces, ou bien la coexistence des espèces, on observe une divergence numérique dans le calcul de la solution qui conduit à des prédictions radicalement différentes. Par conséquent on peut se demander si ce problème numérique trouvé ici dans les systèmes simples (un seul substrat et une ou deux espèces microbiennes, transport advectif) n'apparaît pas également dans des systèmes plus complexes, quand un réseau de réactions cinétiquement contrôlées est considéré pour simuler par exemple les problèmes de remédiation des eaux souterraines. Nous pensons que l'étude des valeurs propres de la dynamique linéarisée au voisinage de ces équilibres est important pour détecter d'éventuelles imprécisions numériques.

Ce chapitre a donné lieu à une publication acceptée dans la revue "Computational Ecology and Software".

## Chapitre 3

# Les effets d'une structuration spatiale et de la diffusion sur les performances d'un chemostat

---

---

### 3.1 Résumé

Dans ce chapitre nous étudions l'effet d'une structuration spatiale sur le rendement d'un chemostat à l'équilibre. Trois configurations sont comparées : le parfaitement mélangé, la connection en série et la connection en parallèle avec diffusion. On montre l'existence d'un seuil de concentration en substrat entrant pour lequel les avantages des configurations en série et en parallèle sont inversés. De plus, on montre que la dépendance des concentrations en sortie en fonction du taux de diffusion peut être non-monotone, et on donne des conditions précises pour que l'effet de la diffusion soit *avantageux*. Cette étude permet également de considérer les modèles à "zones mortes".

## 3.2 Introduction

Partant de l'hétérogénéité qui se présente au sein d'un écosystème microbien présent dans les sols, les besoins de la considération d'une structuration spatiale dans le modèle du chemostat sont évidentes pour tenter de représenter un tel écosystème. Des habitats séparés sont aussi considérés dans les lacs, où le fond peut être modélisé comme une *zone morte* et lorsque le mixage des nutriments des deux zones s'effectue par un phénomène de diffusion [78]. Les zones mortes sont également souvent considérées dans la modélisation chimique et la modélisation des bioprocédés [33,46,59,88,89,95,107]. De la même façon, il est bien connu que les zones mortes se produisent dans des milieux poreux tels que les sols, à des degrés différents en fonction de la structure du sol. L'effet de ces zones mortes sur le transport réactif et la conservation de masse, et donc à son tour sur les cycles biogéochimiques des éléments du sol, peuvent également être significatifs [97, 106].

Les configurations en parallèle sont beaucoup moins étudiées en regardant la large bibliographie sur les modèles spatialement structurés [17–19,29–31,38–40,44,64,79,86,87,102], à part de simples considérations en génie de la réaction chimique [20,59]. On peut argumenter qu'en connaissant les taux d'entrée et les volumes des réservoirs en parallèle, leurs caractéristiques dynamiques peuvent être étudiées séparément, et il n'est pas nécessaire de consacrer une étude spécifique pour ces configurations. Par contre, ce n'est plus le cas si on considère une communication qui mélange les deux réservoirs, à travers une membrane, par exemple. Dans les sols saturés ou humides, une structure spatiale pourrait être simplement représentée par des domaines séparés avec une communication diffusive. Cette considération est analogue aux modèles en îles *islands models*, couramment utilisés en écologie [37, 65], ou dans les systèmes *LDE lattice differential equations* (qui sont des systèmes d'équations différentielles ordinaires avec une structure spatiale discrète) [96]. Par exemple, une étude récente examine l'influence des telles structures sur les modèles de consommation/ressource [32]. Les modèles de consommation/ressource en écologie sont analogues aux modèles du type chemostat, à part les termes de ressources qui sont modélisés comme des apports constants de nutriments, au lieu des taux de dilution plutôt rencontrés dans les milieux liquides.

Dans ce chapitre, on essaie d'apporter une nouvelle vision sur les configurations des chemostats connectés en parallèle, dans un esprit différent de celui qu'on adapte habituellement dans la conception des bioprocédés, où on choisit généralement la concentration du substrat en sortie que l'on souhaite, et on cherche à minimiser le volume total, ou de façon équivalente le temps de résidence, parmi toutes

les configurations qui fournissent la même concentration en sortie à l'équilibre. Ainsi nous fixons le volume hydrique total et le flux d'entrée, et on étudie la fonction entrée-sortie en examinant le rôle de la structuration spatiale et de la diffusion sur la performance du système. La performance est mesurée ici par le taux de substrat qui est dégradé par le système, et recueilli à la sortie. On établit une comparaison précise entre les trois configurations : parfaitement mélangé, en série et en parallèle (avec un coefficient de diffusion) pour le même volume hydrique totale et le même débit. Cet ensemble de configurations choisi est loin d'être exhaustif, étant limité à deux compartiments seulement, mais c'est une première tentative pour comprendre cette fonction d'entrée-sortie dans un chemostat structuré, et d'étudier comment une structure spatiale peut modifier cette fonction, et quels sont les paramètres clés. On estime que cette étude peut être intéressante dans la modélisation des écosystèmes tels que les sols saturés pour lesquels il n'est pas simple de connaître la structuration spatiale, et où on n'a accès qu'à des observations *entrée-sortie* de la dégradation du substrat.

Ce chapitre est organisé comme suit. Dans la Section 3.3, on présente les trois configurations à étudier et on donne le modèle qui correspond à chacune d'elles. La partie principale est consacrée à l'analyse des équilibres, donnée dans la section 3.4 et 3.6. La stabilité globale des équilibres est établie dans la section 3.5. Enfin, une discussion et des simulations numériques sont données dans la section 3.7.

### 3.3 Les modèles

On note par  $Q$  le débit volumique et par  $V$  le volume total du système. Les trois configurations à étudier sont représentées par la figure 3.1 :

- un simple compartiment de volume  $V$
- deux compartiments connectés en cascade de volume  $V_1, V_2$  tel que  $V = V_1 + V_2$
- deux compartiments connectés en parallèle avec diffusion de volume  $V_1, V_2$  tel que  $V = V_1 + V_2$ .

On rappelle que les dynamiques de la concentration en substrat et en biomasse, notés par  $s_i$  et  $x_i$  respectivement, dans un compartiment  $i$  de volume  $V_i$  alimenté à partir d'un compartiment  $i_-$  à un débit  $Q_i$  et connecté avec un coefficient de diffusion  $d$  à un compartiment  $i_d$  (voir Figure 3.2) sont données par le système suivant :

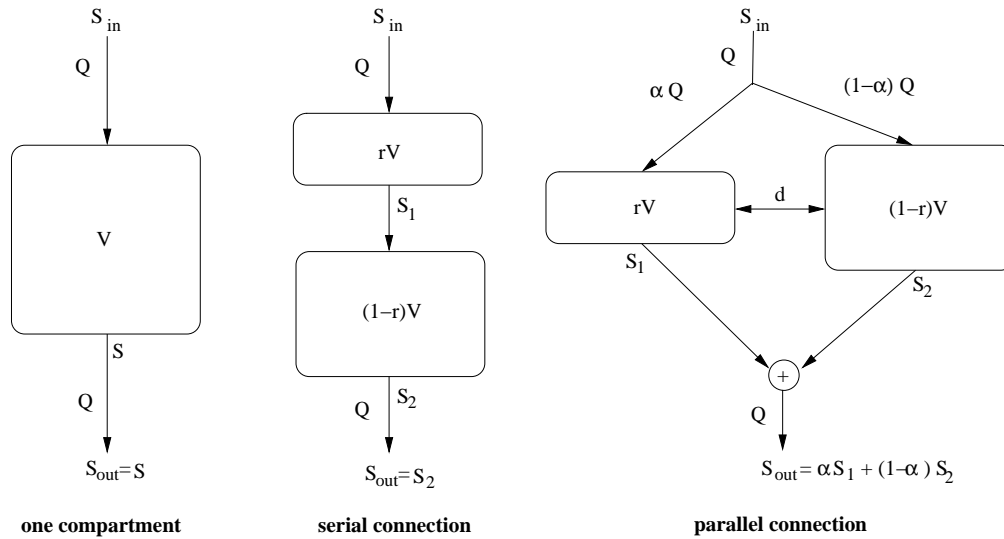


FIG. 3.1 – l'ensembles des configurations à étudier.

$$\begin{aligned} \dot{s}_i &= -\frac{\mu(s_i)}{\gamma} x_i + \frac{Q_i}{V_i} (s_{i-} - s_i) + \frac{d}{V_i} (s_{i_d} - s_i) \\ \dot{x}_i &= \mu(s_i) x_i + \frac{Q_i}{V_i} (x_{i-} - x_i) + \frac{d}{V_i} (x_{i_d} - x_i) \end{aligned}$$

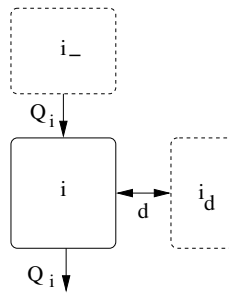


FIG. 3.2 – Une interconnection possible des compartiments.

Pour des raisons de simplicité de l'étude analytique, on suppose au début que la fonction de croissance  $\mu(\cdot)$  est une fonction linéaire en  $s$

$$\mu(s) = ms$$

Puis dans la Section 3.6, on considère une cinétique de croissance de type Monod et on montre que les résultats de notre étude ne changent pas. Le coefficient de rendement  $\gamma$  de la bio-conversion est pris égale à 1 (ceci est toujours possible en choisissant l'unité de mesure de la biomasse). Il est également commode d'adimensionner les concentrations : pour chaque concentration  $c_i$  dans le compartiment  $i$  ( $c_i$

représente  $s_i$  ou bien  $x_i$ ), on définit

$$\tilde{c}_i = m \frac{V}{Q} c_i ,$$

et

$$r_i = \frac{V_i}{V} .$$

nous considérons aussi que le temps  $t$  est mesuré dans une unité telle que  $\frac{Q}{V} = 1$ . Finalement, on suppose que la concentration en entrée  $s_{in}$  est suffisamment grande pour éviter que le lessivage (l'équilibre trivial) soit le seul état d'équilibre dans au moins un compartiment.

### 3.4 Analyse des états d'équilibres pour les trois configurations

#### 3.4.1 Configuration avec un seul compartiment

Le système dynamique dans le cas d'un seul compartiment est donné par

$$\begin{cases} \dot{s} &= -sx + s_{in} - s \\ \dot{x} &= sx - x \end{cases} \quad (3.1)$$

Sous la condition  $s_{in} > 1$ , l'équilibre non-trivial est  $(1, s_{in} - 1)$ . Donc, on a

$$s_{out}^* = 1 .$$

*Remarque.* Une propriété qui est bien connue dans la théorie du chemostat, est qu'à l'équilibre la concentration de la sortie est indépendante de celle de l'entrée, à condition que cette dernière soit suffisamment grande (i.e.  $s_{in} \geq 1$ ).

#### 3.4.2 Deux compartiments connectés en série

Le système dynamique modélisant deux compartiments connectés en série (voir Figure 3.1), en supposant que  $r$  est différent de 0 et 1, est donné par

$$\begin{cases} \dot{s}_1 &= -s_1 x_1 + \frac{1}{r} (s_{in} - s_1) \\ \dot{x}_1 &= s_1 x_1 - \frac{1}{r} x_1 \\ \dot{s}_2 &= -s_2 x_2 + \frac{1}{1-r} (s_1 - s_2) \\ \dot{x}_2 &= s_2 x_2 + \frac{1}{1-r} (x_1 - x_2) \end{cases} \quad (3.2)$$

avec  $r = V_1/V$ .

**Proposition 3.1** Si  $s_{in} > 1/r$ , alors il existe un unique équilibre  $(s_1^*, x_1^*, s_2^*, x_2^*)$  pour (3.2) dans l'orthant positif. On a nécessairement  $s_1^* = 1/r$  et  $s_2^* < \min(1/r, 1/(1-r))$ . De plus, on a

$$s_{out}^* < 1 \iff s_{in} > 1 + 1/r .$$

*Preuve.* On peut facilement vérifier qu'il existe un équilibre non-trivial  $(1/r, s_{in} - 1/r)$  pour le premier compartiment exactement lorsque  $s_{in} > 1/r$ . De plus, cet équilibre est unique. Donc, tout équilibre pour le système global (3.2) est tel que  $(s_2^*, s_{in} - s_2^*)$  est un équilibre pour le second compartiment, où  $s_2^*$  est solution de l'équation

$$s_2(s_{in} - s_2) = \frac{1}{1-r}(1/r - s_2) \quad (3.3)$$

avec  $s_2^* < 1/r$ . On peut facilement vérifier qu'il existe un unique  $s_2^*$  solution de (3.3) sur  $(0, 1/r)$ . Graphiquement,  $s_2^*$  est l'abscisse du point d'intersection des graphes (voir Figure 3.3) de la fonction polynomiale

$$\phi(s_2) = s_2(s_{in} - s_2)$$

avec la fonction affine

$$l(s_2) = \frac{1}{1-r}(1/r - s_2) .$$

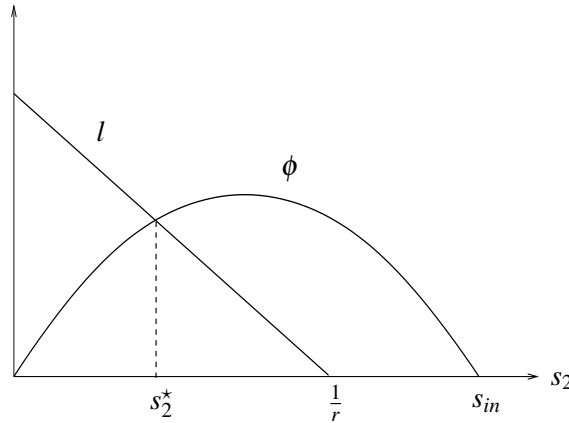


FIG. 3.3 – Détermination graphique de  $s_2^*$ .

Remarquons que  $s_{in} > 1/r$  implique l'inégalité  $\phi(1/(1-r)) > l(1/(1-r))$ , à partir de laquelle on peut déduire que  $s_2^* < 1/(1-r)$ . Finalement on compare  $s_{out}^* = s_2^*$  avec la valeur obtenue dans le cas d'une seule configuration :

$$s_{out}^* < 1 \iff \phi(1) > l(1) \iff s_{in} > 1 + 1/r . \quad \blacksquare$$



### 3.4.3 Deux compartiments interconnectés en parallèle

Le système dynamique modélisant deux compartiments interconnectés en parallèle avec diffusion (voir Figure 3.1), en supposant que  $r$  est différent de 0 et 1, est donné par le système suivant :

$$\begin{cases} \dot{s}_1 &= -s_1x_1 + \frac{\alpha}{r}(s_{in} - s_1) + \frac{d}{r}(s_2 - s_1) \\ \dot{x}_1 &= s_1x_1 - \frac{\alpha}{r}x_1 + \frac{d}{r}(x_2 - x_1) \\ \dot{s}_2 &= -s_2x_2 + \frac{1-\alpha}{1-r}(s_{in} - s_2) + \frac{d}{1-r}(s_1 - s_2) \\ \dot{x}_2 &= s_2x_2 - \frac{1-\alpha}{1-r}x_2 + \frac{d}{1-r}(x_1 - x_2) \end{cases} \quad (3.4)$$

où la concentration en sortie  $s_{out}$  est donnée par

$$s_{out} = \alpha s_1 + (1 - \alpha) s_2 .$$

Le lessivage dans les deux compartiments correspond à l'équilibre trivial  $(s_{in}, 0, s_{in}, 0)$ , ce qui conduit à l'état d'équilibre à  $s_{out}^* = s_{in}$ . Posons

$$\alpha_1 = \frac{\alpha}{r} \text{ et } \alpha_2 = \frac{1-\alpha}{1-r},$$

et supposons, sans perte de généralité, que  $\alpha_2 \geq \alpha_1$  (si ce n'est pas le cas on échange les indices 1 et 2).

*Remarque* On a nécessairement  $\alpha_1 \leq 1$  et  $\alpha_2 \geq 1$ .

Pour  $d = 0$  (sans diffusion), les équilibres du système peuvent être calculés indépendamment dans chaque compartiment comme deux chemostats simples. Dans ce cas, on a un unique équilibre non-trivial  $(s_1^*, s_{in} - s_1^*, s_2^*, s_{in} - s_1^*)$  dans  $\mathbb{R}_+^4$ , qui est globalement asymptotiquement stable, avec  $s_i^* = \min(\alpha_i, s_{in})$  ( $i = 1, 2$ ).

Pour  $d > 0$ , on définit les fonctions suivantes

$$\begin{aligned} \phi_2(s_1) &= s_1 + \frac{r}{d}(s_{in} - s_1)(s_1 - \alpha_1) \\ \phi_1(s_2) &= s_2 + \frac{1-r}{d}(s_{in} - s_2)(s_2 - \alpha_2). \end{aligned}$$

et

$$g(s_1) = \phi_1(\phi_2(s_1)) - s_1.$$

**Proposition 3.2** Pour tout  $s_{in} > 1$  et pour tout  $d > 0$ , il existe un unique équilibre non-trivial  $(s_1^*, x_1^*, s_2^*, x_2^*)$  dans l'orthant positif, à  $(s_1^*, s_2^*)$  est l'unique solution du système

$$\phi_1(s_2^*) = s_1^* \text{ et } \phi_2(s_1^*) = s_2^* \quad (3.5)$$

dans le domaine  $(0, s_{in}) \times (0, s_{in})$ , avec  $x_i^* = s_{in} - s_i^*$  ( $i = 1, 2$ ). De plus on a  $s_1^* = s_2^* = 1$  dans le cas où  $\alpha_1 = \alpha_2$  et

$$\alpha_1 < s_1^* < s_2^* < \min(s_{in}, \alpha_2) \quad (3.6)$$

dans le cas où  $\alpha_1 < \alpha_2$

*Preuve.* A l'équilibre on a,

$$\begin{aligned} r(\dot{s}_1 + \dot{x}_1) + (1-r)(\dot{s}_2 + \dot{x}_2) &= 0, \\ r(\dot{s}_1 + \dot{x}_1) &= 0, \end{aligned}$$

donc, en utilisant le système (3.4), on peut écrire

$$\begin{aligned} \alpha(s_{in} - s_1^* - x_1^*) + (1-\alpha)(s_{in} - s_2^* - x_2^*) &= 0, \\ \alpha(s_{in} - s_1^* - x_1^*) + d(s_2^* + x_2^* - s_1^* - x_1^*) &= 0. \end{aligned}$$

Ce qui est équivalent à écrire

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \alpha & 1-\alpha \\ \alpha+d & -d \end{bmatrix}}_M \begin{pmatrix} s_{in} - s_1^* - x_1^* \\ s_{in} - s_2^* - x_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

avec  $\det(M) = \alpha^2 - \alpha - d \leq -d < 0$ . Ce qui nous permet de conclure la propriété suivante

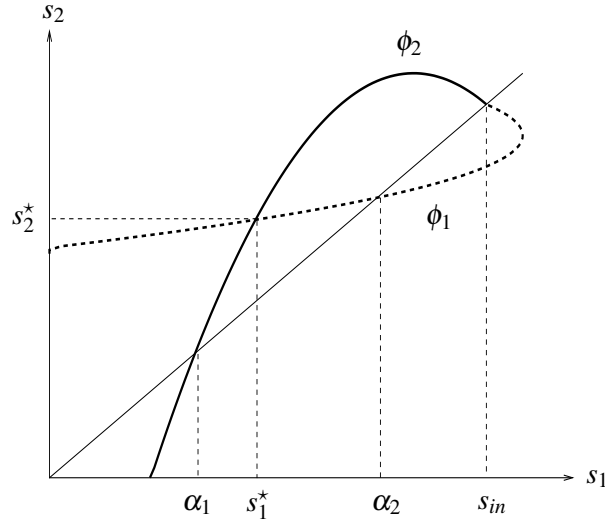
$$s_1^* + x_1^* = s_2^* + x_2^* = s_{in}.$$

Et par suite, un équilibre dans l'orthant positif vérifie  $s_i^* \in [0, s_{in}]$  for  $i = 1, 2$ . En remplaçant  $x_i^*$  par  $s_{in} - s_i^*$  dans les équations (3.4) à l'équilibre, on obtient les équations

$$\begin{aligned} d(s_2^* - s_1^*) &= r(s_{in} - s_1^*)(s_1^* - \alpha_1) \\ d(s_1^* - s_2^*) &= (1-r)(s_{in} - s_2^*)(s_2^* - \alpha_2) \end{aligned} \quad (3.7)$$

ce qui revient à écrire que  $(s_1^*, s_2^*)$  est solution du système 3.5 (voir Figure 3.4) ou par équivalence  $s_1^*$  est un zéro pour la fonction  $g(\cdot)$ .

Lorsque  $\alpha_2 = \alpha_1 = 1$ , on peut bien vérifier que  $s_1^* = s_2^* = 1 < s_{in}$  est solution du 3.5. Lorsque  $\alpha_2 > \alpha_1$ , on a nécessairement  $\alpha_1 < 1$  et la condition  $s_{in} > 1$ , implique que  $g(\alpha_1) < 0$ . On distingue deux cas différents :

FIG. 3.4 – Détermination graphique de l'équilibre (cas où  $\alpha_1 < \alpha_2 < s_{in}$ ).

**Cas où  $\alpha_2 < s_{in}$ .** Si  $\phi_2(\alpha_2) \leq s_{in}$ , notons qu'on a  $\phi_2(\alpha_2) > \alpha_2$  et par suite  $g(\alpha_2) > 0$ . Si  $\phi_2(\alpha_2) > s_{in}$ , notons que  $\phi_2(\alpha_1) = \alpha_1 < s_{in}$ , alors en utilisant le théorème des valeurs intermédiaires on peut déduire qu'il existe un  $\tilde{s}_2 \in (\alpha_1, \alpha_2)$  tel que  $\phi_2(\tilde{s}_2) = s_{in}$ , ce qui implique que  $g(\tilde{s}_2) = s_{in} - \tilde{s}_2 > 0$ . Dans les deux cas, on peut déduire en utilisant le théorème des valeurs intermédiaires qu'il existe un  $s_1^* \in (\alpha_1, \alpha_2)$  tel que  $g(s_1^*) = 0$ .

**Cas où  $\alpha_2 \geq s_{in}$ .** On a  $g(s_{in}) = 0$  avec

$$g'(s_{in}) = \frac{r(1-r)}{d^2}(\alpha_1 - s_{in})(\alpha_2 - s_{in}) + \frac{1-s_{in}}{d} < 0.$$

Les Théorèmes de Rolle et des valeurs intermédiaires permettent de conclure qu'il existe un  $s_1^* \in (\alpha_1, s_{in})$  tel que  $g(s_1^*) = 0$ .

Dans tous les cas, on obtient l'existence d'un  $(s_1^*, s_2^*)$  solution du (3.5) avec  $s_1^* \in (\alpha_1, \min(\alpha_2, s_{in}))$ , ceci implique que  $s_2^* = \phi_2(s_1^*) > s_1^*$ . Et  $s_1^* = \phi_1(s_2^*) < s_2^*$  implique que  $s_2^* < \min(\alpha_2, s_{in})$ . Ainsi, les inégalités (3.6) sont accomplies.

Finalement, remarquons que  $\phi_1(\cdot)$ ,  $\phi_2(\cdot)$  sont deux fonctions strictement concave, et que les équilibres  $(s_1^*, s_2^*)$  sont les intersections de  $\mathcal{G}_1$ , le graphe de la fonction  $\phi_1(\cdot)$ , et  $\mathcal{G}_2$  la symétrique de celui de  $\phi_2(\cdot)$  par rapport à la première diagonale. Par conséquent, si  $(s_1^*, s_2^*)$  est un équilibre différent de  $(s_{in}, s_{in})$ ,  $\mathcal{G}_1$  et  $\mathcal{G}_2$  sont respectivement au-dessus et en dessous de la ligne de segment  $(s_1^*, s_2^*) - (s_{in}, s_{in})$ . On peut donc conclure qu'il existe au plus un seul équilibre non-trivial. ■

**Corollary 3.1** Lorsque  $s_{in} > 1$  et  $d > 0$ , la valeur  $s_1^*$  de l'équilibre non-trivial est l'unique zéro de la fonction  $g(\cdot)$  sur  $(\alpha_1, \min(\alpha_2, s_{in}))$ . De plus, on a  $g'(s_1^*) > 0$ .

*Preuve.* Lorsque  $\alpha_1 = \alpha_2$ , on a  $s_1^* = s_2^* = 1$  et on peut facilement vérifier que

$$g'(s_1^*) = \left(1 + \frac{r}{d}(s_{in} - 1)\right) \left(1 + \frac{1-r}{d}(s_{in} - 1)\right) - 1 > 0.$$

Lorsque  $\alpha_2 > \alpha_1$ , on a  $g(\alpha_1) < 0$  et on rappelle d'après la preuve de la proposition précédente que  $s_1^*$  est l'unique zéro de  $g(\cdot)$  dans  $(\alpha_1, \min(\alpha_2, s_{in}))$ .

Ce qui nous amène à conclure que  $g$  est croissante en  $s_1^*$ . Notons que  $\phi_1$  et  $\phi_2$  sont deux fonctions concaves et que

$$\phi_1'(\phi_2(s_1^*)) = 1 + \frac{1-r}{d} ((s_{in} - s_2^*)\mu'(s_2^*) + \alpha_2 - \mu(s_2^*)) > 0$$

ce qui implique

$$g''(s_1^*) = \phi_1''(\phi_2(s_1^*)) \cdot [\phi_2'(s_1^*)]^2 + \phi_1'(\phi_2(s_1^*)) \cdot \phi_2''(s_1^*) < 0.$$

Donc on déduit que  $g'(s_1^*)$  ne peut pas être égal à zéro, et par conséquent on a  $g'(s_1^*) > 0$ . ■

À partir de la proposition 3.2, on peut bien définir la fonction  $d \mapsto s_{out}^* = \alpha s_1^* + (1 - \alpha)s_2^*$  pour l'équilibre non-trivial. Par la Proposition 3.2,  $s_{out}^*$  est égal à 1 pour toute valeur du paramètre  $d$  dans le cas non-générique  $\alpha_2 = \alpha_1$ . On s'intéresse donc aux cas où  $\alpha_2 \neq \alpha_1$  (et sans perte de généralité, on peut considérer que  $\alpha_2 > \alpha_1$ ). On commence avec les deux situations extrêmes : sans diffusion et avec une diffusion de valeur infinie.

**Lemma 3.1** Pour l'équilibre non-trivial, on a

$$s_{out}^*(0) \geq 1 \iff s_{in} \geq s_{in}^0 = \frac{r - \alpha^2}{r(1 - \alpha)}$$

avec  $s_{in}^0 \in (1, 2)$ .

*Preuve.* Sous les conditions  $s_{in} > 1$  et  $\alpha_2 \geq \alpha_1$ , on distingue deux cas pour  $d = 0$ .

Si  $s_{in} \geq \alpha_2$ , on a  $s_1^* = \alpha_1$  et  $s_2^* = \alpha_2$ . Donc, on peut écrire

$$s_{out}^* = \frac{\alpha^2}{r} + \frac{(1 - \alpha)^2}{1 - r} = 1 + \frac{(\alpha - r)^2}{r(1 - r)} \geq 1.$$

Si  $s_{in} < \alpha_2$ , on a  $s_1^* = \alpha_1$ ,  $s_2^* = s_{in}$  et

$$s_{out}^* \geq 1 \iff s_{in} \geq \frac{1 - \alpha\alpha_1}{1 - \alpha} = s_{in}^0.$$

(rappelons qu'en supposant que  $\alpha_2 \geq \alpha_1$  ceci impose que  $\alpha < 1$ , et par suite  $s_{in}^0$  sera définie). Notons que le nombre  $s_{in}^0$  est nécessairement plus grand que 1 parce que  $\alpha_1 \leq 1$ , et on a aussi

$$\alpha_2 - s_{in}^0 = \frac{(r - \alpha)^2}{r(1 - r)(1 - \alpha)} \geq 0.$$

Et par conséquent, on déduit que  $s_{out}^* \geq 1$  exactement lorsque  $s_{in} \geq s_{in}^0$ . Finalement, remarquons qu'on a

$$s_{in}^0 = \frac{r - \alpha^2}{r(1 - \alpha)} = 1 - \frac{(\alpha - r)^2}{r(r - \alpha)} + \frac{r - \alpha}{1 - \alpha} < 2. \quad \blacksquare$$

**Lemma 3.2** Pour  $s_{in} > 1$ , l'équilibre non-trivial vérifie

$$\lim_{d \rightarrow +\infty} s_1^*(d) = \lim_{d \rightarrow +\infty} s_2^*(d) = \lim_{d \rightarrow +\infty} s_{out}^*(d) = 1.$$

*Preuve.* Pour tout  $d > 0$ , la Proposition 3.2 garantit l'existence et l'unicité d'un équilibre non-trivial  $(s_1^*, s_2^*) \in (0, s_{in}) \times (0, s_{in})$  solution de l'équation (3.7). Lorsque  $d$  est arbitrairement large, on obtient l'équation (3.7)

$$\lim_{d \rightarrow +\infty} s_1^*(d) - s_2^*(d) = 0.$$

On déduit encore à partir des équations (3.7), l'égalité suivante, qui est vraie pour tout  $d$ ,

$$r(s_{in} - s_1^*)(s_1^* - \alpha_1) + (1 - r)(s_{in} - s_2^*)(s_2^* - \alpha_2) = 0.$$

Alors on peut écrire, en tenant compte de l'égalité  $r\alpha_1 + (1 - r)\alpha_2 = 1$ ,

$$(s_{in} - s_1^*)(s_1^* - 1) = (1 - r)(s_1^* - s_2^*)(s_{in} + \alpha_2 - s_1^* - s_2^*).$$

Et par conséquent, on a

$$\lim_{d \rightarrow +\infty} s_1^*(d) = \lim_{d \rightarrow +\infty} s_2^*(d) = 1 \text{ or } \lim_{d \rightarrow +\infty} s_1^*(d) = \lim_{d \rightarrow +\infty} s_2^*(d) = s_{in}.$$

Si  $\alpha_2 < s_{in}$ , la propriété  $s_1^* < \alpha_2$  vraie pour tout  $d > 0$  implique que  $s_1^*$  ne converge pas vers  $s_{in}$ .

si  $\alpha_2 \geq s_{in}$  et  $\lim s_1^* = \lim s_2^* = s_{in}$ , il existe un  $d$  tel que  $rs_1^* + (1 - r)s_2^* > (s_{in} + 1)/2$ . Donc, on a

$$g'(s_1^*) = \frac{r(1 - r)}{d^2}(s_{in} + \alpha_1 - 2s_1^*)(s_{in} + \alpha_2 - 2s_2^*) + \frac{s_{in} + 1 - 2(rs_1^* + (1 - r)s_2^*)}{d} < 0$$

ce qui contredit le Corollaire 3.1. Finalement, on a  $\lim s_1^* = \lim s_2^* = 1$  et par conséquent  $\lim s_{out}^* = 1$ . ■

On présente maintenant le résultat concernant les propriétés de la fonction  $d \mapsto s_{out}^*$ , définie à l'équilibre non-trivial trouvé.

**Proposition 3.3** *Supposons que  $\alpha_2 > \alpha_1$ .*

- Lorsque  $s_{in} \geq 2$ , la fonction  $d \mapsto s_{out}^*(d)$  (pour l'équilibre non-trivial) est décroissante et  $s_{out}^*(d) > 1$  pour tout  $d \geq 0$ .
- Lorsque  $s_{in} < 2$ , la fonction  $d \mapsto s_{out}^*(d)$  (pour l'équilibre non-trivial) admet un minimum en  $d^* < +\infty$ , qui est strictement plus petit que 1. De plus, on a

$$s_{in} > \underline{s}_{in} = \frac{2\alpha_1\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \implies d^* > 0$$

avec  $\underline{s}_{in} < \min(2, \alpha_2)$ .

*Preuve.* Dérivons suivant  $d$  les équations (3.7) à l'équilibre, on obtient le système

$$\begin{aligned} (s_2^* - s_1^*) + d(\partial_d s_2^* - \partial_d s_1^*) &= \underbrace{r(s_{in} - 2s_1^* + \alpha_1)}_A \partial_d s_1^* \\ (s_1^* - s_2^*) + d(\partial_d s_1^* - \partial_d s_2^*) &= \underbrace{(1-r)(s_{in} - 2s_2^* + \alpha_2)}_B \partial_d s_2^* \end{aligned}$$

qui peut être réécrit comme suit

$$\underbrace{\begin{bmatrix} A+d & -d \\ d & -B-d \end{bmatrix}}_{\Gamma} \begin{pmatrix} \partial_d s_1^* \\ \partial_d s_2^* \end{pmatrix} = (s_2^* - s_1^*) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Remarquons qu'on a

$$\begin{aligned} A+d &= d\phi_2'(s_1^*) \\ B+d &= d\phi_1'(s_2^*) \\ \det(\Gamma) &= d^2(1 - \phi_1'(s_2^*)\phi_2'(s_1^*)) = -d^2g'(s_1^*). \end{aligned}$$

À partir du corollaire (3.1), on a  $\det(\Gamma) < 0$  et par suite on déduit que les dérivés  $\partial_d s_1^*$ ,  $\partial_d s_2^*$  sont définies par

$$\begin{aligned} \partial_d s_1^* &= (s_2^* - s_1^*) \frac{-B}{\det(\Gamma)} \\ \partial_d s_2^* &= (s_2^* - s_1^*) \frac{A}{\det(\Gamma)}. \end{aligned} \tag{3.8}$$

Notons qu'à partir de (3.6) on a  $B > 0$  et par suite on déduit que  $\partial_d s_1^* > 0$  pour tout  $d$ . Le Lemme 3.2 nous amène à conclure que  $s_1^*(d) < 1$  pour tout  $d$ .

À partir des équations (3.16), on peut écrire

$$\partial_d s_{out}^* = (s_2^* - s_1^*) \frac{\alpha B - (1 - \alpha)A}{-det(\Gamma)} = \underbrace{[\alpha_1(s_{in} - 2s_2^*) - \alpha_2(s_{in} - 2s_1^*)]}_{\sigma} \frac{(s_2^* - s_1^*)r(1 - r)}{-det(\Gamma)}.$$

Lorsque  $s_{in} \geq 2$ , on a  $A > 0$  et par suite  $\partial_d s_2^* < 0$ . À partir du Lemme 3.2 on peut conclure que  $s_2^*(d) > 1$  pour tout  $d$ . Alors, on obtient l'inégalité

$$\sigma < (s_{in} - 2)(\alpha_1 - \alpha_2) \leq 0$$

qui montre avec le Lemme 3.2 que  $s_{out}^*$  est une fonction décroissante en  $d$  et qui converge vers 1.

Lorsque  $s_{in} < 2$ , on écrit

$$\sigma = (s_{in} - 2)(\alpha_1 - \alpha_2) + 2(\alpha_1(1 - s_2^*) - \alpha_2(1 - s_1^*)).$$

Comme  $s_1^*$  et  $s_2^*$  tend vers 1 lorsque  $d$  prend des valeurs grandes, on conclut qu'il existe un  $\bar{d} < +\infty$  tel que  $\sigma > 0$  pour tout  $d > \bar{d}$  et par conséquent  $s_{out}^*$  est plus petit que 1 est croissant pour  $d > \bar{d}$ . On conclut que la fonction  $d \mapsto s_{out}^*(d)$  admet un minimum  $d^* < +\infty$ , et qui est strictement plus petit que 1.

Pour  $d = 0$ , on a  $s_1^* = \alpha_1$  et si  $s_{in} \geq \alpha_2$  on a  $s_2^* = \alpha_2$ . Donc, on obtient  $\sigma = s_{in}(\alpha_1 - \alpha_2) < 0$ . Donc la fonction  $d \mapsto \partial_d s_{out}^*(d)$  est décroissant en  $d = 0$  et par conséquent  $d^* > 0$ .

lorsque  $d = 0$  avec  $s_{in} < \alpha_2$ , on a  $s_2^* = s_{in}$  et par suite  $\sigma = 2\alpha_1\alpha_2 - s_{in}(\alpha_1 + \alpha_2)$ , d'où nous concluons que

$$\sigma < 0 \iff s_{in} > \frac{2\alpha_1\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} = \underline{s}_{in}.$$

Remarquons que ce cas est faisable grâce à l'inégalité  $2\alpha_1\alpha_2 < \min(2, \alpha_2)(\alpha_1 + \alpha_2)$ . On conclut donc que pour  $s_{in}$  plus grand que cette dernière valeur,  $d^*$  est nécessairement strictement positif.

*Remarque.* Le cas particulier  $\alpha = 0$  correspond à une configuration d'un compartiment parfaitement mélangé de volume  $(1 - r)V$  connecté à une *zone-morte* de volume  $rV$  (voir Figure 3.5). C'est un modèle pour représenter un réservoir qui n'est pas bien mélangé ou bien des bioréacteurs *séparés* de volume total  $V$ , en estimant le volume occupé par la partie parfaitement mélangée.

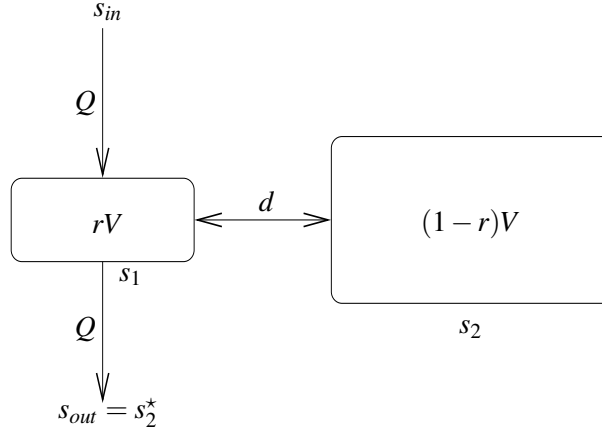


FIG. 3.5 – La configuration de la zone-morte est un cas particulier de la configuration en parallèle avec  $\alpha = 0$ .

### 3.5 Stabilité exponentielle globale pour l'équilibre non-trivial

Tout d'abord, il est simple à vérifier que le domaine  $D = \mathbb{R}_+^4$  est invariant par les dynamiques (3.2) et (3.4). On considère le vecteur  $z$  de dimension 2 défini par  $z_i = s_{in} - x_i - s_i$  ( $i = 1, 2$ ) dont sa dynamique est donnée respectivement pour les configurations en série et en parallèle par

$$\dot{z} = A_s z = \begin{bmatrix} -\frac{1}{r} & 0 \\ \frac{1}{1-r} & -\frac{1}{1-r} \end{bmatrix} z$$

$$\dot{z} = A_p z = \begin{bmatrix} -\alpha_1 - \frac{d}{r} & \frac{d}{r} \\ \frac{d}{1-r} & -\alpha_2 - \frac{d}{1-r} \end{bmatrix} z.$$

Notons que les matrices  $A_s$  et  $A_p$  sont des matrices de Hurwitz :

$$\begin{aligned} \text{tr}(A_s) &= -\frac{1}{r} - \frac{1}{1-r} < 0, & \det(A_s) &= \frac{1}{r(1-r)} > 0 \\ \text{tr}(A_p) &= -\alpha_1 - \alpha_2 - \frac{d}{r} - \frac{d}{1-r} < 0, & \det(A_p) &= \alpha_1 \alpha_2 + \frac{d}{r(1-r)} > 0. \end{aligned}$$

Donc  $z$  converge exponentiellement vers 0 pour les deux systèmes, ce qui implique que les dynamiques (3.2) et (3.4) sont dissipatives, dans le sens que toute solution de (3.2) ou (3.4) dans  $D$  converge exponentiellement vers le compact  $K = \{(s_1, x_1, s_2, x_2) \in D \text{ t.q. } x_1 + s_1 = s_{in} \text{ et } x_2 + s_2 = s_{in}\}$ .

Rappelons un résultat du [74, Theorem 1.8] qui sera utile dans la suite.



**Theorem 3.1** Soit  $\Phi$  un semi-flot asymptotiquement autonome de limite le semi-flot  $\Theta$ , et tel que l'orbite  $\mathcal{O}_\Phi(\tau, \xi)$  admet une clôture compacte. Alors l'ensemble  $\omega$ -limite  $\omega_\Phi(\tau, \xi)$  est non-vide, compacte, connexe, invariant et récurrent par chaîne par le semi-flot  $\Theta$  et attire  $\Phi(t, \tau, \xi)$  lorsque  $t \rightarrow \infty$ .

### 3.5.1 La configuration en série

**Proposition 3.4** Sous la condition  $s_{in} > 1/r$ , toute trajectoire du (3.2) avec une condition initiale dans  $D$  telle que  $(s_1(0), x_1(0)) \neq (s_{in}, 0)$  converge exponentiellement vers l'unique équilibre non-trivial  $(s_1^*, x_1^*, s_2^*, x_2^*)$  donné par la Proposition 3.1.

*Preuve.* Le dynamique (3.2) a une structure en cascade. Il est simple de vérifier que les solutions du sous-système  $(s_1, x_1)$  convergent asymptotiquement vers l'équilibre non-trivial  $(1/r, s_{in} - 1/r)$  pour toute condition initiale différente que  $(s_{in}, 0)$ . Puisque  $z_2$  converge vers 0, on déduit que le variable  $s_2$  converge vers l'intervalle borné  $[0, s_{in}]$  et par suite sa dynamique peut être écrite comme une équation différentielle scalaire non-autonome :

$$\dot{s}_2 = -s_2(s_{in} - s_2 - z_2(t)) + \frac{1}{1-r}(s_1(t) - s_2). \quad (3.9)$$

Cette dernière dynamique à la propriété d'une dynamique asymptotiquement autonome avec comme limite l'équation différentielle suivante :

$$\dot{s}_2 = f(s_2) = -s_2(s_{in} - s_2) + \frac{1}{1-r}(1/r - s_2). \quad (3.10)$$

La Proposition 3.1 implique que cette dernière dynamique a un équilibre unique  $s_2^*$  appartenant à  $[0, s_{in}]$ . De plus, on a  $f(0) > 0$  et  $f(s_{in}) < 0$ . Par conséquent, toute solution de (3.10) dans  $[0, s_{in}]$  converge asymptotiquement vers  $s_2^*$ . Par suite, nous appliquons le Théorème 3.1, et on conclut que toute solution bornée de (3.9) converge vers  $s_2^*$ . Finalement, toute solution du sous-système  $(s_2, x_2)$  converge asymptotiquement vers  $(s_2^*, s_{in} - s_2^*)$ .

La matrice Jacobienne du dynamique (3.2) à l'équilibre non-trivial  $(s_1^*, x_1^*, s_2^*, x_2^*)$  calculée dans les coordonnées  $(z_1, z_2, s_1, s_2)$  est donnée par :

$$\begin{bmatrix} A_s & 0 \\ \star & J^* \end{bmatrix} \quad \text{avec} \quad J^* = \begin{bmatrix} s_1^* - s_{in} & 0 \\ \frac{1}{1-r} & 2s_2^* - \frac{1}{1-r} - s_{in} \end{bmatrix}$$

Rappelons que  $A_s$  est une matrice de Hurwitz. Les valeurs propres de  $J^*$  sont  $-(s_{in} - s_1^*)$ ,  $-(s_{in} - s_2^*) - (1/(1-r) - s_2^*)$  qui sont toutes les deux négatives, d'après la Proposition 3.1. Ceci montre la stabilité exponentielle de l'équilibre non-trivial. ■

### 3.5.2 La configuration parallèle

**Proposition 3.5** *Lorsque  $s_{in} > 1$  et  $d > 0$ , toute trajectoire de (3.4) avec une condition initiale dans  $D$ , telle que  $x_1(0) > 0$  et  $x_2(0) > 0$  converge exponentiellement vers l'unique équilibre non-trivial  $(s_1^*, x_1^*, s_2^*, x_2^*)$  donné par la Proposition 3.2.*

*Preuve.* Considérons le vecteur  $z(\cdot)$ ; le sous-système  $(s_1, s_2)$  du dynamique (3.4) peut être écrit comme solution du système dynamique non-autonome suivante

$$\begin{cases} \dot{s}_1 &= s_1(z_1(t) + s_1 - s_{in}) + \alpha_1(s_{in} - s_1) + \frac{d}{r}(s_2 - s_1) \\ \dot{s}_2 &= s_2(z_2(t) + s_2 - s_{in}) + \alpha_2(s_{in} - s_2) + \frac{d}{1-r}(s_1 - s_2) \end{cases} \quad (3.11)$$

On sait que  $z$  converge vers 0 et par conséquent le vecteur  $S$  de variables  $s_1, s_2$  converge vers l'ensemble  $\mathcal{S} = [0, s_{in}] \times [0, s_{in}]$ . On étudie maintenant le dynamique limite autonome suivant

$$\begin{cases} \dot{s}_1 &= (s_{in} - s_1)(\alpha_1 - s_1) + \frac{d}{r}(s_2 - s_1) \\ \dot{s}_2 &= (s_{in} - s_2)(\alpha_2 - s_2) + \frac{d}{1-r}(s_1 - s_2) \end{cases} \quad (3.12)$$

dans le domaine  $\mathcal{S}$ . Soit  $\mathcal{B}$  la frontière  $\{s_1 = s_{in}\} \cup \{s_2 = s_{in}\}$ . Dans le domaine  $\mathcal{S} \setminus \mathcal{B}$ , on considère le vecteur  $\sigma$  de variables  $\sigma_i = \log(s_{in} - s_i)$ , dont sa dynamique peut être écrite comme

$$\dot{\sigma} = F(\sigma) = \begin{bmatrix} -\alpha_1 + s_{in} - e^{\sigma_1} - \frac{d}{r}(1 - e^{\sigma_2 - \sigma_1}) \\ -\alpha_2 + s_{in} - e^{\sigma_2} - \frac{d}{1-r}(1 - e^{\sigma_1 - \sigma_2}) \end{bmatrix} \quad (3.13)$$

On peut facilement calculer

$$\text{div}(F) = -e^{\sigma_1} - e^{\sigma_2} - \frac{d}{r}e^{\sigma_2 - \sigma_1} - \frac{d}{1-r}e^{\sigma_1 - \sigma_2} < 0$$

En utilisant le théorème de Poincaré-Bendixon et le critère de Dulac, on peut conclure que le système (3.13) n'admet ni des orbites périodiques ni des cycles limites et par suite ses trajectoires bornées convergent nécessairement vers un point d'équilibre. Et par conséquent, toute trajectoire de (3.12) dans  $\mathcal{S}$  converge ou bien vers le point d'équilibre  $S^* = (s_1^*, s_2^*)$  ou bien s'approche de la frontière  $\mathcal{B}$ . Notons qu'on a

$$s_i = s_{in}, s_j < s_{in} \Rightarrow \dot{s}_i < 0 \quad (i \neq j)$$

Donc la seule possibilité pour approcher de  $\mathcal{B}$  est de converger vers  $S^0 = (s_{in}, s_{in})$ . Cela montre que les seuls sous-ensembles non-vides de  $\mathcal{S}$ , fermés, connexes, invariants et récurrents par chaîne sont les singletons  $\{S^*\}$  et  $\{S^0\}$ .

Appliquons le Théorème 3.1, nous concluons qu'une trajectoire du (3.11), issue d'une condition initiale de la dynamique (3.4) dans  $\mathcal{D}$ , converge asymptotiquement vers  $S^*$  ou  $S^0$ . Considérons maintenant une condition initiale avec  $x_1(0) > 0$  et  $x_2(0) > 0$ ; on montre que la solution  $(s_1(\cdot), s_2(\cdot))$  du (3.4) ne peut pas converger vers  $S^0$ . Sinon, il existe un  $T < +\infty$  tel que, sous la condition  $s_{in} > 1$ , on a

$$s_1(t) > \alpha_1 \quad \text{and} \quad rs_1(t) + (1-r)s_2(t) > 1 \quad \text{pour } t \geq T.$$

Considérons la fonction

$$V(x_1, x_2) = \min(rx_1 + (1-r)x_2, x_1)$$

(voir Figure 3.6) et  $v(t) = V(x_1(t), x_2(t))$  est positive et converge vers 0 lorsque  $t$  tend vers  $+\infty$

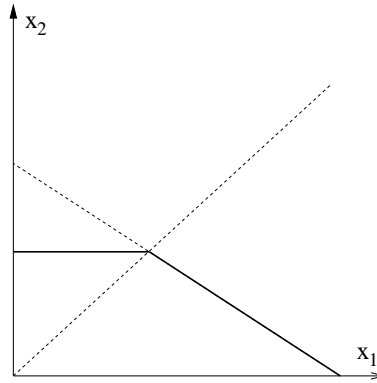


FIG. 3.6 – Ensemble de niveau de la fonction  $V$ .

Si  $x_1(t) < x_2(t)$ , on a  $v(t) = x_1(t)$  et

$$\dot{v} = \dot{x}_1 > (s_1(t) - \alpha_1)x_1 > 0 \quad \text{for } t \geq T$$

Si  $x_1(t) > x_2(t)$ , on a  $v(t) = rx_1(t) + (1-r)x_2(t)$  et

$$\begin{aligned} \dot{v} &= r\dot{x}_1 + (1-r)\dot{x}_2 = r(s_1 - \alpha_1)x_1 + (1-r)(s_2 - \alpha_2)x_2 \\ &> (rs_1 + (1-r)s_2 - 1)x_2 > 0 \quad \text{for } t \geq T \end{aligned}$$

On conclut que la fonction  $t \mapsto v(t)$  est croissante pour  $t \geq T$  et par conséquent elle ne peut pas converger vers zéro, donc c'est une contradiction.

La matrice Jacobienne de la dynamique (3.4) à l'équilibre non-trivial  $(s_1^*, x_1^*, s_2^*, x_2^*)$  s'écrit de la forme suivante suivant les coordonnées  $(z_1, z_2, s_1, s_2)$

$$\begin{bmatrix} A_p & 0 \\ \star & J^* \end{bmatrix} \quad \text{with} \quad J^* = \begin{bmatrix} -\frac{d}{r}\phi_2'(s_1^*) & \frac{d}{r} \\ \frac{d}{1-r} & -\frac{d}{1-r}\phi_1'(s_2^*) \end{bmatrix}$$

Rappelons que  $A_p$  est une matrice de Hurwitz. On a

$$\det(J^*) = \frac{d^2}{r(1-r)}(\phi_1'(s_2^*)\phi_2'(s_1^*) - 1) \quad \text{et} \quad \text{tr}(J^*) = -\frac{d}{r}\phi_2'(s_1^*) - \frac{d}{1-r}\phi_1'(s_2^*).$$

La fonction  $\phi_1(\cdot)$  étant concave, on a  $\phi_1(s_{in}) \leq \phi_1(s_2^*) + \phi_1'(s_2^*)(s_{in} - s_2^*)$ . Via les inégalités  $s_{in} > s_2^*$  et  $\phi_1(s_{in}) = s_{in} > s_1^* = \phi_1(s_2^*)$ , on déduit que  $\phi_1'(s_2^*) > 0$ . Rappelons que suite au Corollaire 3.1 on a  $g'(s_1^*) = \phi_1'(s_2^*)\phi_2'(s_1^*) - 1 > 0$ . Donc l'inégalité  $\phi_2'(s_1^*) > 0$  est nécessairement satisfaite. Finalement, nous avons démontré que  $\det(J^*) > 0$  et  $\text{tr}(J^*) < 0$ , ce qui garantit la stabilité exponentielle de l'équilibre non-trivial  $(s_1^*, x_1^*, s_2^*, x_2^*)$ . ■

*Remarque.* L'équilibre du lessivage  $(s_{in}, 0, s_{in}, 0)$  est non nécessairement hyperbolique. Cela explique pourquoi on n'a pas pu utiliser le Théorème de la convergence des dynamiques asymptotiquement autonomes donné dans l'Appendice de [98].

### 3.6 Généralisation pour une cinétique de croissance de type Monod

Dans cette section on considère une cinétique de croissance  $\mu(\cdot)$  qui a les caractéristiques suivantes :

$$\mu(0) = 0, \mu'(s) > 0 \text{ et } \mu''(s) < 0 \text{ sur } (0, +\infty).$$

Et on note par  $v(\cdot)$  sont inverse sur  $(0, +\infty)$ .

Les détails de démonstration de l'existence d'un équilibre non trivial  $(s_1^*, x_1^*, s_2^*, x_2^*)$  unique ainsi que sont stabilité exponentielle globale, avec une telle  $\mu(\cdot)$ , pour les deux configurations (en série et en parallèle) sont presque identiques que précédemment sauf que l'énoncé de la proposition 3.1 et 3.2 devient :

**Proposition 3.6** Si  $\mu(s_{in}) > 1/r$ , alors il existe un unique équilibre  $(s_1^*, x_1^*, s_2^*, x_2^*)$  pour (3.2) dans l'orthant positif. On a nécessairement  $\mu(s_1^*) = 1/r$  et  $\mu(s_2^*) < \min(1/r, 1/(1-r))$ . De plus, on a

$$s_{out}^* < v(1) \iff s_{in} > v(1) + 1/r \frac{v(1/r) - v(1)}{1/r - 1}.$$

**Proposition 3.7** Pour tout  $s_{in} > v(1)$  et pour tout  $d > 0$ , il existe un unique équilibre non-trivial  $(s_1^*, x_1^*, s_2^*, x_2^*)$  dans l'orthant positif, avec  $(s_1^*, s_2^*)$  unique solution du système

$$\phi_1(s_2^*) = s_1^* \text{ et } \phi_2(s_1^*) = s_2^* \quad (3.14)$$

dans le domaine  $(0, s_{in}) \times (0, s_{in})$ , avec  $x_i^* = s_{in} - s_i^*$  ( $i = 1, 2$ ). De plus on a,  $s_1^* = s_2^* = v(1)$  dans le cas où  $\alpha_1 = \alpha_2$ , et

$$v(\alpha_1) < s_1^* < s_2^* < \min(s_{in}, v(\alpha_2)), \quad (3.15)$$

(lorsque  $v(\alpha_2)$  existe) dans le cas où  $\alpha_1 < \alpha_2$ .

Ici  $\phi_1$  et  $\phi_2$  sont données par

$$\begin{aligned} \phi_2(s_1) &= s_1 + \frac{r}{d}(s_{in} - s_1)(\mu(s_1) - \alpha_1) \\ \phi_1(s_2) &= s_2 + \frac{1-r}{d}(s_{in} - s_2)(\mu(s_2) - \alpha_2). \end{aligned}$$

Il est facile de vérifier que pour tout  $s_{in} > v(1)$  et pour tout  $d > 0$  on a toujours  $g'(s_1^*) > 0$ , et que

$$\lim_{d \rightarrow +\infty} s_1^* = \lim_{d \rightarrow +\infty} s_2^* = \lim_{d \rightarrow +\infty} s_{out}^* = v(1).$$

Donc dans cette section, on développe seulement la démonstration du résultat concernant les propriétés de la fonction  $d \mapsto s_{out}^*$ .

**Proposition 3.8** Supposons que  $\alpha_2 > \alpha_1$ .

- Lorsque  $s_{in} \geq v(1) + v'(1)$ , la fonction  $d \mapsto s_{out}^*(d)$  (pour l'équilibre non-trivial) est décroissante et  $s_{out}^*(d) > v(1)$  pour tout  $d \geq 0$ .
- Lorsque  $s_{in} < v(1) + v'(1)$ , la fonction  $d \mapsto s_{out}^*(d)$  (pour l'équilibre non-trivial) admet un minimum en  $d^* < +\infty$ , qui est strictement plus petit que un. De plus, on a

$$s_{in} > \underline{s}_{in} = v\left(\frac{2\alpha_1\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2}\right) \implies d^* > 0$$

avec  $\mu(\underline{s}_{in}) < \min(2, \alpha_2)$ .

*Preuve.* Comme précédemment on peut facilement vérifier qu'on a

$$\begin{aligned}\partial_d s_1^* &= (s_2^* - s_1^*) \frac{-B}{\det(\Gamma)} \\ \partial_d s_2^* &= (s_2^* - s_1^*) \frac{A}{\det(\Gamma)}\end{aligned}\tag{3.16}$$

avec  $\det(\Gamma) < 0$ .  $A$  et  $B$  sont données cette fois-ci par

$$\begin{aligned}A(s) &= r(\alpha_1 - \mu(s) + \mu'(s)(s_{in} - s)) \\ B(s) &= (1 - r)(\alpha_2 - \mu(s) + \mu'(s)(s_{in} - s)).\end{aligned}$$

Notons qu'à partir des (3.15) on a  $B(s_2^*) > 0$  et par suite on déduit que  $\partial_d s_1^* > 0$  pour tout  $d$ . De plus on a  $\lim_{d \rightarrow +\infty} s_1^* = v(1)$ , ce qui nous amène à conclure que  $s_1^*(d) < v(1)$  pour tout  $d$ .

A partir des équations (3.16), on peut écrire

$$\partial_d s_{out}^* = (s_2^* - s_1^*) \frac{\alpha B(s_2^*) - (1 - \alpha)A(s_1^*)}{-\det(\Gamma)} = \sigma \frac{(s_2^* - s_1^*)r(1 - r)}{-\det(\Gamma)}$$

avec

$$\sigma = \alpha_1 (\mu'(s_2^*)(s_{in} - s_2^*) - \mu(s_2^*)) - \alpha_2 (\mu'(s_1^*)(s_{in} - s_1^*) - \mu(s_1^*)).$$

$A$  et  $B$  sont décroissantes en  $s$ . De plus on a

$$A(v(1)) = r(\alpha_1 + \underbrace{\mu'(v(1))(s_{in} - v(1)) - 1}_{\delta})$$

Il est simple de vérifier qu'on a

$$\delta \geq 0 \Leftrightarrow s_{in} \geq v(1) + v'(1).$$

Lorsque  $s_{in} \geq v(1) + v'(1)$ , on a  $A(s_1^*) > A(v(1)) > 0$  et par suite  $\partial_d s_2^* < 0$ . Or, du fait qu'on a  $\lim_{d \rightarrow +\infty} s_2^* = v(1)$ , on peut conclure que  $s_2^*(d) > v(1)$  pour tout  $d$ . Alors, on obtient l'inégalité

$$\sigma < (\alpha_1 - \alpha_2)\delta \leq 0$$

donc  $s_{out}^*$  est une fonction décroissante en  $d$  et converge vers  $v(1)$  lorsque  $d$  prend des valeurs grandes.

Lorsque  $s_{in} < v(1) + v'(1)$ , on écrit

$$\sigma = (\alpha_1 - \alpha_2)\delta + \alpha_1 (A(s_2^*) - A(v(1))) - \alpha_2 (B(s_1^*) - B(v(1)))$$

Comme  $s_1^*$  et  $s_2^*$  tend vers  $v(1)$  lorsque  $d$  prend des valeurs grandes, on conclut qu'il existe un  $\bar{d} < +\infty$  tel que  $\sigma > 0$  pour tout  $d > \bar{d}$  et par conséquent  $s_{out}^*$  est plus petite que  $v(1)$  est croissante pour  $d > \bar{d}$ . On conclut que la fonction  $d \mapsto s_{out}^*(d)$  admet un minimum, appelons le  $d^* < +\infty$ , qui est strictement plus petit que  $v(1)$ .

Lorsque  $d = 0$ , on a  $s_1^* = v(\alpha_1)$  et si  $\mu(s_{in}) \geq \alpha_2$  on a  $s_2^* = v(\alpha_2)$ . Donc, on obtient  $\sigma < (\alpha_1 - \alpha_2)\mu'(v(\alpha_1))(s_{in} - v(\alpha_1)) < 0$ . Donc la fonction  $d \mapsto \partial_d s_{out}^*(d)$  est décroissante en  $d = 0$  et par conséquent  $d^* > 0$ .

Lorsque  $d = 0$  avec  $\mu(s_{in}) < \alpha_2$ , on a  $s_2^* = s_{in}$  et par suite

$$\sigma = -\alpha_1 \mu(s_{in}) - \alpha_2 (\mu'(v(\alpha_1))(s_{in} - v(\alpha_1)) - \alpha_1).$$

$\mu(\cdot)$  est une fonction croissante concave sur  $(0, +\infty)$ . Or, puisqu'on a  $v(\alpha_1) < s_{in}$ , l'inégalité suivante est toujours vraie

$$\mu(s_{in}) - \alpha_1 < \mu'(v(\alpha_1))(s_{in} - v(\alpha_1)). \quad (3.17)$$

Ceci nous permet de conclure que  $\sigma < -(\alpha_1 + \alpha_2)\mu(s_{in}) + 2\alpha_1\alpha_2$  pour laquelle nous concluons que

$$\mu(s_{in}) > \mu(\underline{s}_{in}) = \frac{2\alpha_1\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \implies \sigma < 0.$$

Remarquons que ce cas est faisable grâce à l'inégalité suivante :

$$\frac{2\alpha_1\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} < \min(2, \alpha_2),$$

on conclut donc que pour  $s_{in}$  plus grande que  $\underline{s}_{in} = v(\frac{2\alpha_1\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2})$ ,  $d^*$  est nécessairement strictement positive.

*Remarque.* En remplaçant  $\alpha_1$  par 1, l'inégalité 3.17 reste vraie, et par suite on peut remarquer que dans ce cas on a toujours  $\mu(s_{in}) < 2$ .

### 3.7 Simulation numérique et discussion

Les Propositions 3.6 et 3.7 révèlent l'existence d'un seuil de concentration en substrat entrant  $s_{in}$ , (égale à  $v(1) + v'(1)$  dans le cas de notre choix des unités de paramètres), qui inverse les performances des configurations en parallèle et en série en terme de  $s_{out}^*$ , comparés au cas d'un seul compartiment (pour lequel  $s_{out}^* = v(1)$ ) :

- pour  $s_{in} > v(1) + v'(1)$ , il existe des configurations en série, telle que pour  $r$  suffisamment grand (i.e le premier réservoir est suffisamment grand) on a  $s_{out}^* < v(1)$ . Par contre pour toute configuration parallèle on a  $s_{out}^* > v(1)$ ,
- pour  $s_{in} < v(1) + v'(1)$ , il existe des configurations en parallèle telle que  $s_{out}^* < v(1)$ , tandis que pour toute configuration en série on a  $s_{out}^* > v(1)$ . Il existe un autre seuil  $s_{in}^0$  (où l'expression de  $s_{in}^0$  peut être facilement déduite d'après le Lemme 3.1 pour toute cinétique monotone) avec  $\mu(s_{in}^0) \in (1, 2)$ , tel que si  $s_{in} > s_{in}^0$ , il faut un  $d$  suffisamment grand pour avoir  $s_{out}^* < v(1)$ .

Par ailleurs, la meilleure performance de la configuration en parallèle est obtenue

- pour des valeurs de  $d$  arbitrairement grand dans le cas où  $s_{in} > v(1) + v'(1)$ ,
- pour un  $d^*$  fini et strictement positif lorsque  $s_{in} \in (s_{in}, v(1) + v'(1))$  (où l'expression de  $s_{in}$  est donné par la Proposition 3.8).

### 3.7.1 Cas d'une cinétique linéaire

Dans ce cas le seuil en  $s_{in}$  est égale à 2. Pour la configuration en série, le graphe de la fonction  $s_{out}^*$  est tracé en fonction de  $r \in [1/s_{in}, 1]$  par la Figure 3.7 pour différentes valeurs en substrat entrant  $s_{in}$ . Pour la configuration en parallèle, on représente sur la Figure 3.8 les deux types des configurations qui

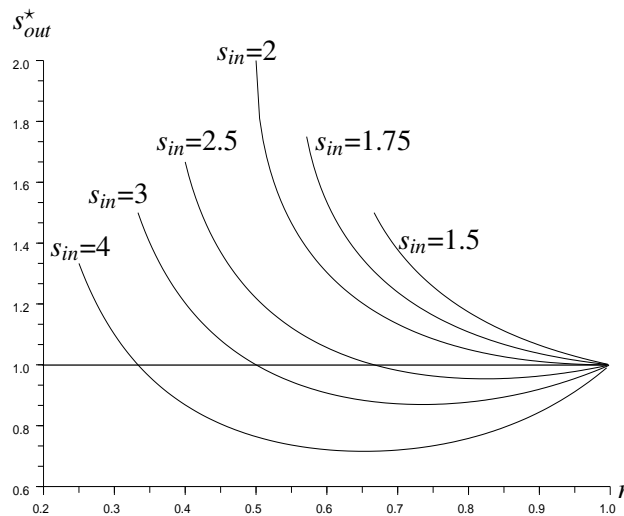


FIG. 3.7 – Comparaison des  $s_{out}^*$  pour la configuration série.



se produisent, selon que le nombre  $s_{in}$  est plus petit ou bien plus grand que 1.

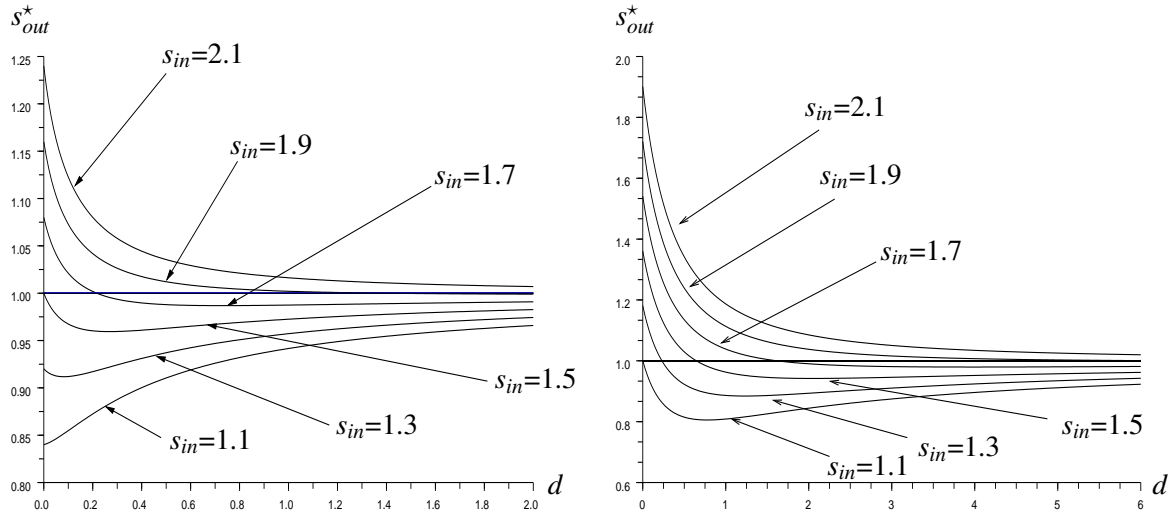


FIG. 3.8 – Comparaison des  $s_{out}^*$  pour la configuration en parallèle ( $s_{in} > 1$  sur la gauche et  $s_{in} < 1$  sur la droite).

Les valeurs des paramètres sont donnés par le tableau ci-dessous

	$\alpha$	$r$	$s_{in}$	$s_{in}^0$
figure gauche	0.6	0.9	1.14	1.5
figure droite	0.1	0.9	0.21	1.09

### 3.7.2 Cas d'une cinétique de type Monod

Considerons la fonction de Monod suivante (voire Figure 3.9) :

$$\mu(S) = \frac{6S}{5+S}$$

Dans ce cas le seuil en  $s_{in}$  est égale à  $2 + 1/5$ . Pour la configuration série, le graphe de la fonction  $s_{out}^*$  est tracé en fonction de  $r \in [1/\mu(s_{in}), 1]$  sur la Figure 3.10 pour différentes valeurs en substrat entrant  $s_{in}$ .

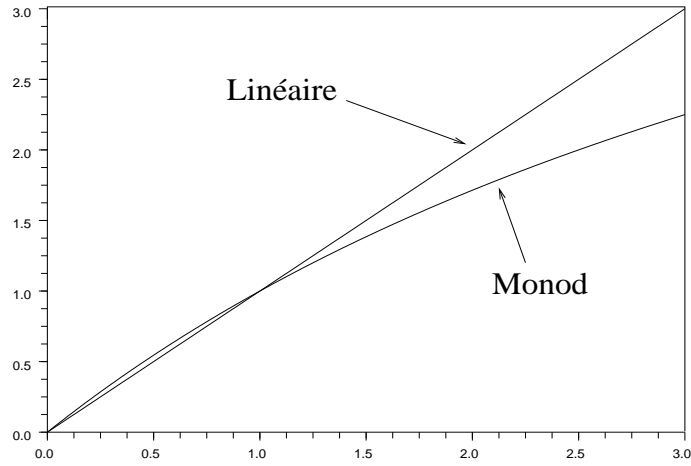


FIG. 3.9 – Fonctions linéaire et Monod.

Cette fonction est choisie pour maintenir  $s_{out}^* = 1$  pour la configuration d'un seul compartiment, dans le but de comparer avec le cas d'une croissance linéaire.

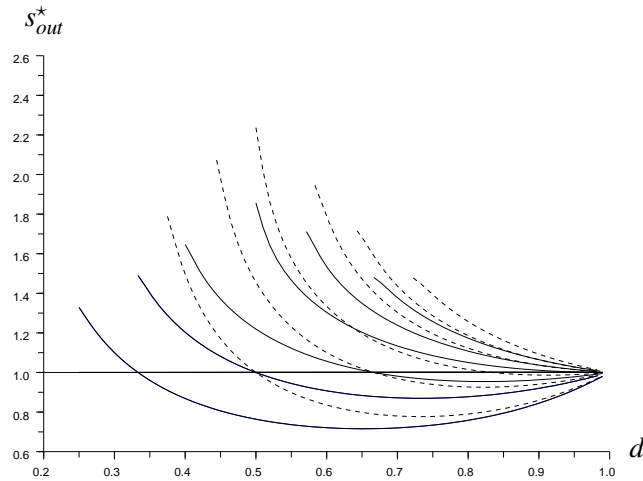


FIG. 3.10 – Comparaison de  $s_{out}^*$  pour Monod (traits pointillés) et linéaire (traits pleins) pour la configuration série.

Pour la configuration parallèle, on représente sur la Figure 3.11 les deux types des configurations qui se produisent, selon que le nombre  $\underline{s}_{in}$  est plus petit ou bien plus grand que 1.

Les valeurs des paramètres sont donnés par le tableau ci-dessous

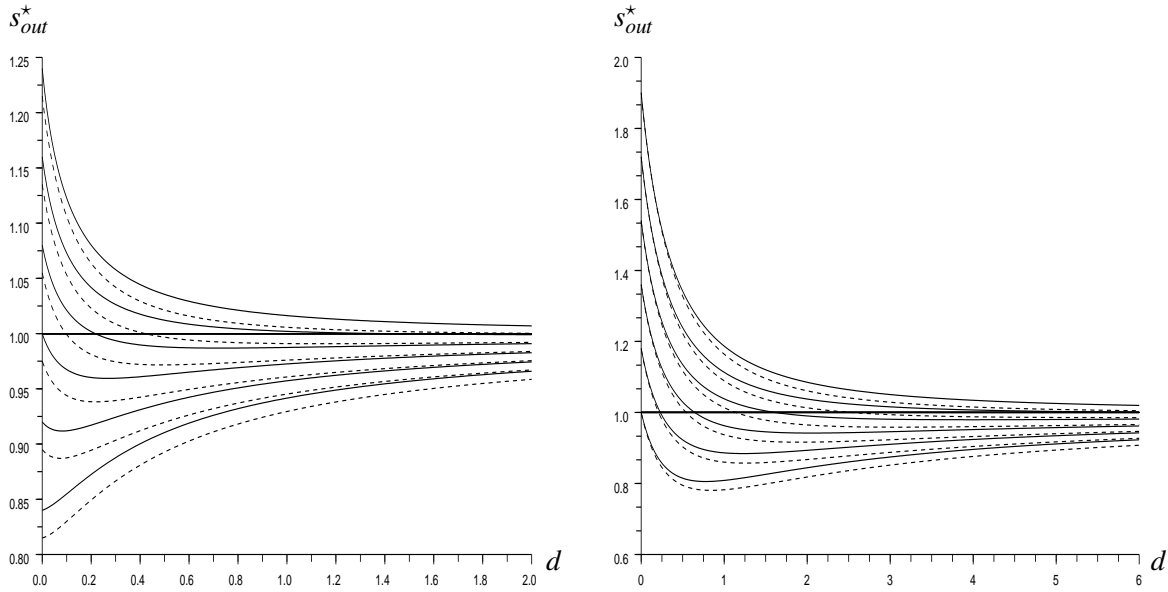


FIG. 3.11 – Comparaison de  $s_{out}^*$  pour Monod (traits pointillés) et linéaire (traits pleins) pour la configuration parallèle ( $\underline{s}_{in} > 1$  sur la gauche et  $\underline{s}_{in} < 1$  sur la droite).

	$\alpha$	$r$	$\underline{s}_{in}$	$s_{in}^0$
figure gauche	0.6	0.9	1.17	1.67
figure droite	0.1	0.9	0.18	1.11

*Remarque.* La configuration en série pour la valeur limite  $r = 1$  est équivalente à un simple compartiment. Cela explique pourquoi toutes les courbes dans les Figures 3.7 et 3.10 coïncident pour cette valeur du paramètre  $r$ .

Pour la configuration en parallèle avec  $\alpha = 0.1$  et  $r = 0.9$  on a  $\alpha_2 = 9$ . Ceci implique que pour la valeur limite  $d = 0$  le seul équilibre dans le deuxième réservoir est le lessivage lorsque  $s_{in} < 9$ . Ce n'est pas le cas pour le premier, mais comme le débit  $\alpha Q$  est petit, la sortie  $s_{out}^*$  reste proche de  $s_{in}$ , comme on peut le voir par les Figures 3.8 et 3.11 pour de petites valeurs du paramètre  $d$ .

### 3.8 Conclusion

Etant donné le volume total et le débit pour un système de type chemostat, cette étude montre l'existence d'un seuil sur le substrat entrant  $s_{in}$ , tels qu'en-dessus et en-dessous de ce seuil, les configurations série et parallèle sont respectivement les meilleurs en ce qui concerne le critère de minimisation de la concentration en sortie  $s_{out}^*$  à l'équilibre. Concernant la connection parallèle, les meilleures performances sont obtenues pour des valeurs précises du paramètre de diffusion  $d$  qui est prouvé strictement positif

lorsque  $s_{in}$  n'est pas trop petit. Cette étude concerne aussi les modèles de *zone morte*, comme étant un cas particulier des configurations parallèle. Quel que soient les données du problème, il existe toujours une configuration qui est meilleure qu'un seul bioréacteur parfaitement mélangé.

Finalement, cette étude révèle le rôle de la structure spatiale sur la performance d'un simple écosystème ou d'un bioprocédé. L'influence non-monotone de la diffusion sur la sortie à l'équilibre n'est pas intuitif, et demande des études supplémentaires pour comprendre les écosystèmes naturels (comme les sols saturés ou les lacs) ainsi que pour appliquer des idées bénéfiques pour les bioprocédés (tels que les traitement des eaux usées). Cette étude peut aussi être intéressante dans l'ingénierie inverse lorsqu'il s'agit de décider qui, parmi les configurations série et parallèle, représente le mieux un écosystème de type chemostat, à condition qu'on connaisse une estimation du volume hydrique total du système.

Ce travail a fait l'objet d'une publication parue dans la revue "Mathematical Biosciences and Engineering".

## Chapitre 4

# L'effet d'une structuration spatiale sur la stabilité du chemostat pour une croissance non-monotone

---

---

### 4.1 Résumé

Dans ce chapitre on montre qu'une structuration spatiale peut stabiliser globalement le modèle du chemostat à l'équilibre avec une cinétique de croissance non-monotone. Lorsqu'un effet d'inhibition est présent dans la croissance des micro-organismes (ce qui se traduit par une courbe de croissance non-monotone), une bi-stabilité peut apparaître dans le modèle du chemostat à un seul compartiment. Pour le même volume hydrique, une structuration "en série" ou "en parallèle" présente aussi une telle bi-stabilité, alors que nous montrons qu'une structuration de l'espace "en poche" permet d'obtenir un seul équilibre positif globalement attractif.

## 4.2 Introduction

Considérons le modèle classique du chemostat (cf chapitre 1, 1.24) avec une seule espèce microbienne et un seul substrat limitant. Soit  $\mu(\cdot)$  une cinétique de croissance non-monotone (de type Haldane par exemple 1.23), et soit  $\lambda_-$  et  $\lambda_+$  les solutions de  $\mu(s) = D$  lorsqu'elles existent, avec  $\lambda_- < \lambda_+$  (voir Figure 4.1). Il est bien connu que lorsque  $\lambda_+ < s_{in}$ , la dynamique 1.24 admet deux points d'équilibres stables : le lessivage  $(s_{in}, 0)$  et l'équilibre positif  $E_1 = (\lambda_-, s_{in} - \lambda_-)$  (voir par exemple [98]), phénomène appelé "bi-stabilité".

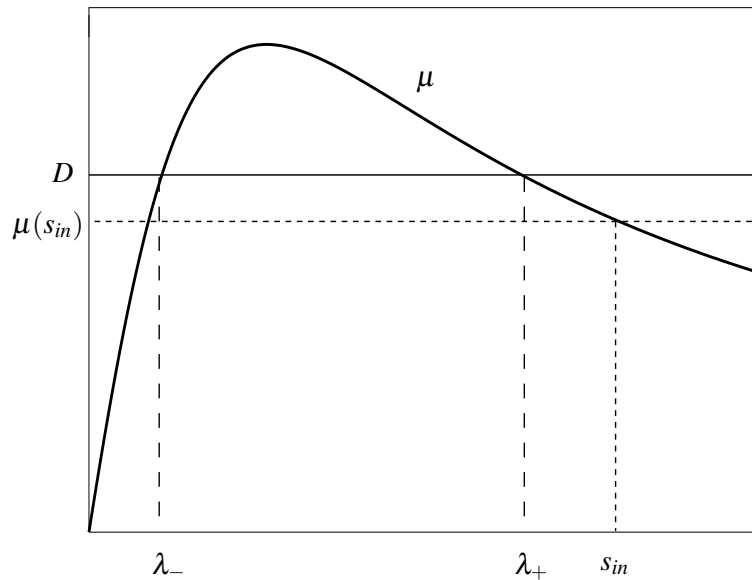


FIG. 4.1 – Bi-stabilité avec une cinétique de croissance non-monotone

Des telles situations sont bien connues parmi les micro-biologistes et les automaticiens : pour certaines conditions initiales, le taux de dilution  $D$  peut conduire au lessivage du bioréacteur. Plusieurs stratégies proposées par la littérature consistent à manipuler le taux de dilution vis-à-vis de mesures des concentrations en substrat ou en biomasse [3]. Le but est de rendre  $E_1$  globalement asymptotiquement stable pour toute condition initiale  $s(0) \geq 0$  et  $x(0) > 0$ . Une autre étude, réalisée en 2008 vise à contrôler le chemostat biologiquement [85]. Cette méthode consiste à ajouter au temps initial une autre espèce qui va être en compétition avec la première pour le même substrat. Le nouveau système que l'on obtiendra devient le système 1.25 avec  $n = 2$  (mais dans cette étude les taux de disparition des biomasses  $D_1$  et  $D_2$  peuvent être différents et plus petits que le taux de dilution  $D$  du substrat). Une extension

du Principe d'Exclusion Compétitif pour les cinétiques non-montones permet de conduire à la stabilité asymptotique globale de  $E_1$  [108].

Dans ce chapitre nous proposons un nouveau point de vue d'intérêt pour les écosystèmes du sol, qui se base sur une structuration de l'espace dans le chemostat. Nous raisonnons à volume hydrique, débit d'alimentation et concentration de substrat en entrée fixés, et montrons comment une structure particulière de l'espace peut conduire à un seul équilibre positif stable, alors que d'autres structures présentent une bi-stabilité.

Ce chapitre est organisé comme suivant. Dans la Section 4.3, nous introduisons la structuration spatiale dite "poche". Les conditions pour l'existence et l'unicité d'un point d'un équilibre positif ainsi que son stabilité asymptotique globale sont établies dans la Section 4.4. Enfin, une discussion et des simulations numériques sont présentées dans la Section 4.5.

### 4.3 Définition du problème et notations

On note par  $Q$  le débit volumique et par  $V$  le volume total d'un système donné. Sans perte de généralité, on suppose que le temps est mesuré dans une unité telle que  $D = \frac{Q}{V} = 1$ .

**Hypothèse H1.** La fonction de croissance  $\mu(\cdot)$  est supposée positive, bornée, de classe  $C^3([0, +\infty))$  avec  $\mu(0) = 0$  et  $\mu''' \geq 0$ , telle que l'ensemble  $\{s \geq 0 / \mu(s) > 1\}$  est un intervalle  $(\lambda_-, \lambda_+)$  non vide avec  $\lambda_+ < s_{in}$ .

Sous l'hypothèse **H1**, la fonction  $\mu(\cdot)$  change au plus une seule fois sa concavité sur  $(0, +\infty)$ . On peut facilement vérifier qu'une telle fonction vérifie la propriété suivante :

$$(P) \text{ il existe deux réels } \bar{s}, \hat{s} \text{ tel que } 0 < \bar{s} < \hat{s} \text{ avec } \begin{cases} \mu' \geq 0 \text{ sur } (0, \bar{s}) \text{ et } \mu' \leq 0 \text{ sur } (\bar{s}, +\infty) \\ \mu'' \leq 0 \text{ sur } (0, \hat{s}) \text{ et } \mu'' \geq 0 \text{ sur } (\hat{s}, +\infty). \end{cases}$$

*Remarque.* La fonction d'Haldane (donnée par 1.23) satisfait l'hypothèse **H1**.

**Proposition 4.1** Soit  $\mu(\cdot)$  une cinétique de croissance qui vérifie **H1**. Pour tout  $s_{in} > 0$ , la configuration à un seul compartiment, à deux compartiments en série et à deux compartiments en parallèle (sans

diffusion) introduites dans le chapitre précédent (voir figure 3.1) présentent nécessairement une bi-stabilité.

**Preuve.** Pour le cas d'une configuration à un seul compartiment, il suffit de revoir le calcul déjà fait dans le chapitre 2 (voir proposition 2.1) pour remarquer que dans le cas d'une cinétique de croissance qui vérifie **H1** les points d'équilibres  $E_0 = (s_{in}, 0)$  et  $E_1 = (\lambda_-, s_{in} - \lambda_-)$  sont tous les deux stables.

Pour le cas d'une configuration à deux compartiments en série, c'est le cas d'un système en cascade, on aura une mono-stabilité s'il existe  $r \in (0, 1)$  tel que  $\mu(s_{in}) > \frac{1}{r}$ , or comme par hypothèse on a  $\mu(s_{in}) < 1$ , il est impossible de trouver une configuration à deux compartiments en série pour laquelle il y a mono-stabilité.

Pour le cas d'une configuration à deux compartiments en parallèle (sans diffusion), on aura une mono-stabilité s'il existe un couple  $(\alpha, r) \in (0, 1)^2$  tels que  $\mu(s_{in}) > \frac{\alpha}{r}$  et  $\mu(s_{in}) > \frac{1-\alpha}{1-r}$  simultanément dans chaque compartiments, ce qui est impossible du fait qu'on a  $\max(\frac{\alpha}{r}, \frac{1-\alpha}{1-r}) > 1$ . ■

Par suite toutes les configurations données précédemment présentent nécessairement une bi-stabilité, d'où l'intérêt de la configuration qui est définie ci-dessous.

La structure en poche (voir Figure 4.2) est composée de deux compartiments interconnectés en parallèle, parfaitement mélangés, de volume  $rV$  et  $(1-r)V$ , dont l'entrée apporte un substrat à une concentration constante  $s_{in}$  à un débit  $\alpha Q$  et  $(1-\alpha)Q$  respectivement. On nommera *poche* le bioréacteur situé à droite. Le contenu de la poche s'écoule dans le deuxième bioréacteur au débit  $\alpha Q$ , et on considère que la sortie du système s'effectue par le bioréacteur gauche au même débit total que l'entrée  $Q$ .

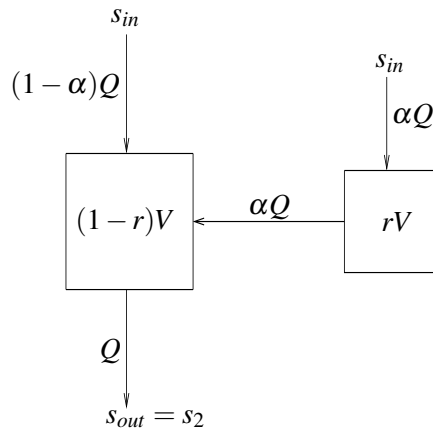


FIG. 4.2 – La structure en poche



Nous adaptons les mêmes notations que celles utilisées dans le chapitre 3 :  $\alpha_1 = \frac{\alpha}{r}$  et  $\alpha_2 = \frac{1-\alpha}{1-r}$  avec  $\alpha_1 < \alpha_2$ . Le système dynamique qui modélise cette interconnection, en supposant que  $r$  est différent de 0 et 1, est le suivant :

$$(S) \begin{cases} \dot{s}_1 &= -\mu(s_1)x_1 + \alpha_1(s_{in} - s_1) \\ \dot{x}_1 &= (\mu(s_1) - \alpha_1)x_1 \\ \dot{s}_2 &= -\mu(s_2)x_2 + \alpha_2(s_{in} - s_2) + \frac{r}{1-r}\alpha_1(s_1 - s_2) \\ \dot{x}_2 &= (\mu(s_2) - \alpha_2)x_2 + \frac{r}{1-r}\alpha_1(x_1 - x_2) \end{cases} \quad (4.1)$$

où  $(s_1, x_1)$  et  $(s_2, x_2)$  désignent les concentrations en (substrat, biomasse) dans les volumes  $rV$  et  $(1-r)V$  respectivement.

## 4.4 Analyse du modèle

### 4.4.1 Existence et unicité d'un équilibre non-trivial

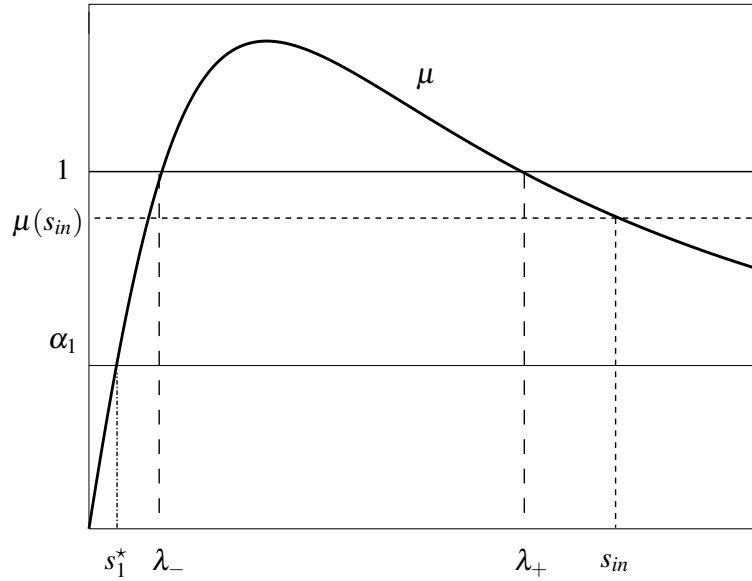


FIG. 4.3 – La poche admet un unique équilibre positif et plus petit que  $s_{in}$

Lorsque  $\alpha_1$  vérifie  $\mu(s_{in}) > \alpha_1$ , on définit la fonction  $\phi$  sur  $[0, s_{in})$  par

$$\phi(s) = \alpha_2 + \frac{r}{1-r}\alpha_1 \frac{s_1^* - s}{s_{in} - s}$$

où  $s_1^*$  l'unique solution positive de  $\mu(s) = \alpha_1$  dans  $(0, s_{in})$  (voir Figure 4.3). Il est immédiat de vérifier que la fonction  $\phi$  est continue, strictement décroissante, concave sur  $(0, s_{in})$  et satisfait  $\lim_{s \rightarrow s_{in}} \phi(s) = -\infty$ .

En remplaçant  $\alpha_2$  par  $\frac{1-r\alpha_1}{1-r}$  dans l'expression de  $\phi$ , on peut alors la réécrire de la façon suivante

$$\phi(s) = 1 + \frac{r}{1-r} \left( \frac{\underline{s} - s}{s_{in} - s} \right)$$

avec

$$\underline{s} = \alpha_1 s_1^* + (1 - \alpha_1) s_{in}.$$

Ainsi pour chaque  $\alpha_1$  choisi dans  $(0, \mu(s_{in}))$ , la fonction  $\phi(\cdot)$  est paramétrisée par  $r$ . Soit la famille  $(\phi_r)_{r \in (0,1)}$  de fonctions  $\phi$  paramétrisées par  $r$ . Cette famille admet quelques propriétés qui sont données par le lemme suivant :

**Lemma 4.1** Pour tout  $r \in (0, 1)$ ,  $\phi_r(\underline{s}) = 1$  et pour tout  $s < s_{in}$ , on a

$$\lim_{r \rightarrow 0} \phi_r(s) = 1.$$

De plus on a

$$\lim_{r \rightarrow 1} \phi_r(s) = \begin{cases} +\infty & \text{si } s < \underline{s} \\ -\infty & \text{si } \underline{s} < s < s_{in} \end{cases}$$

*Preuve.* Une simple vérification démontre le lemme. ■

**Lemma 4.2** Soit  $s \in (0, s_{in})$ . On a

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi_r(s)}{\partial r} > 0 & \text{si } s \in (0, \underline{s}) \\ \frac{\partial \phi_r(s)}{\partial r} < 0 & \text{si } s \in (\underline{s}, s_{in}) \\ \frac{\partial \phi_r'(s)}{\partial r} < 0 \end{cases}$$

*Preuve.* Pour tout  $s \in (0, s_{in})$ , en dérivant  $\phi_r(s)$  et  $\phi_r'(s)$  par rapport à  $r$ , on trouve

$$\frac{\partial \phi_r(s)}{\partial r} = \frac{1}{(1-r)^2} \frac{\underline{s} - s}{s_{in} - s}$$

et

$$\frac{\partial \phi_r'(s)}{\partial r} = -\frac{1}{(1-r)^2} \frac{s_{in} - \underline{s}}{(s_{in} - s)^2}.$$

On a  $\text{sgn}\left(\frac{\partial \phi_r(s)}{\partial r}\right) = \text{sgn}(\underline{s} - s)$  et  $\frac{\partial \phi_r'(s)}{\partial r} < 0$ . D'où le lemme. ■

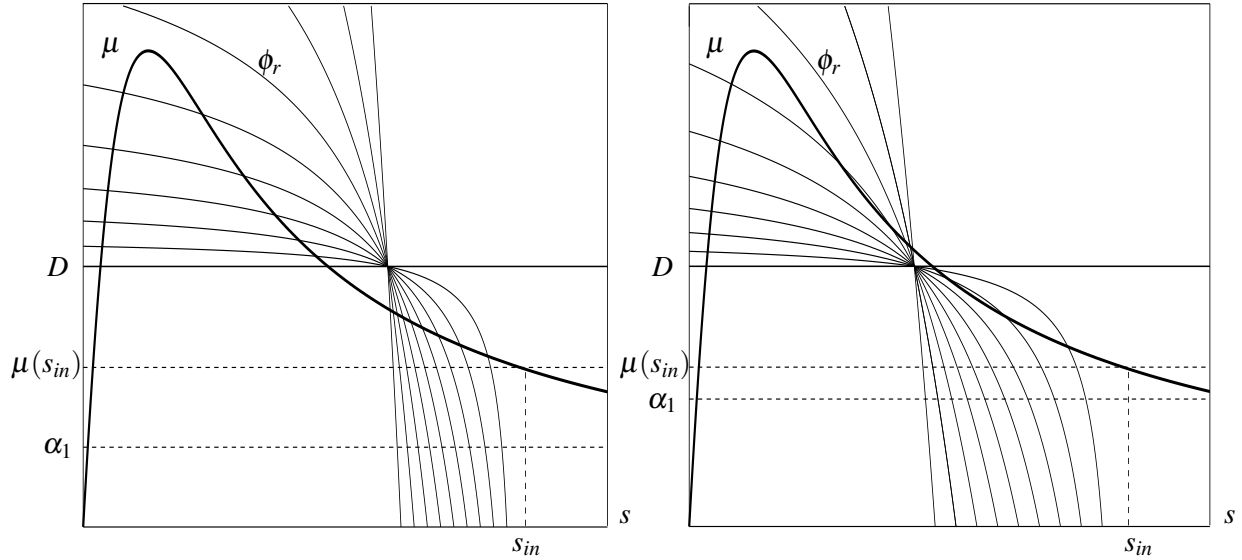


FIG. 4.4 – Plusieurs cas de figure pour :  $\underline{s} > \lambda_+$  (gauche) et  $\underline{s} < \lambda_+$  (droite)

**Proposition 4.2** *Pour tout  $\alpha_1 \in (0, \mu(s_{in}))$ , il existe un unique triplet  $(r_0, r_1, r_2) \in (0, 1)^3$ , avec  $r_0 \leq r_1 \leq r_2$  et tel que pour tout  $r \in (r_0, r_1) \cup (r_2, 1)$  le système 4.1 admet un unique équilibre non-trivial  $E^* = (s_1^*, x_1^*, s_2^*, x_2^*)$  dans l'orthant positif, où  $s_2^*$  est l'unique solution de l'équation  $\mu(s_2^*) = \phi_r(s_2^*)$  dans  $(0, s_{in})$  et  $x_2^* = s_{in} - s_2^*$ .*

**Preuve** A l'équilibre on a,

$$\begin{aligned} \dot{s}_1 + \dot{x}_1 &= -\alpha_1(s_1 + x_1 - s_{in}) = 0 \\ \dot{s}_2 + \dot{x}_2 &= -\frac{1}{1-r}(s_2 + x_2 - s_{in}) + \frac{r}{1-r}\alpha_1(s_1 + x_1 - s_{in}) = 0 \end{aligned}$$

ce qui revient à écrire

$$s_1^* + x_1^* = s_2^* + x_2^* = s_{in}.$$

Et par suite, un équilibre positif pour 4.1 doit vérifier  $s_i^* \in (0, s_{in})$  pour  $i = 1, 2$ . Donc, en remplaçant  $x_i^*$  par  $s_{in} - s_i^*$  dans les équations de 4.1 à l'équilibre, on obtient l'équation suivante

$$(\mu(s_2^*) - \alpha_2)(s_{in} - s_2^*) = \frac{\alpha}{1-r}(s_1^* - s_2^*)$$

ce qui revient à écrire

$$\mu(s_2^*) = \phi_r(s_2^*).$$

Pour tout  $r \in (0, 1)$ , on définit sur  $(0, s_{in})$  la fonction suivante

$$k_r(s) = \mu(s) - \phi_r(s).$$

Le système 4.1 admet un unique équilibre non-trivial dans l'orthant positif si et seulement si l'équation

$$k_r(s) = 0 \tag{4.2}$$

admet une solution unique dans  $(0, s_{in})$ . On distingue deux cas différents (voir Figure 4.4) :

1. **Cas où  $\lambda_+ \leq \underline{s} < s_{in}$ .**

Nous cherchons d'abord suivant  $r$  les solutions de 4.2 sur  $(0, \underline{s})$ . On a  $k_r(0) < 0$  et  $k_r(\underline{s}) < 0$ . De plus, d'après le lemme 4.1, lorsque  $r$  varie entre 0 et 1 la fonction  $k_r(s)$  prend des valeurs positives sur  $(0, \underline{s})$ . Suite à l'hypothèse faite sur  $\mu$ , on peut définir pour tout  $r \in (0, 1)$  le maximum de  $k_r(\cdot)$  sur  $(0, \underline{s})$ . Soit la fonction

$$M : r \in (0, 1) \mapsto \max_{(0, \underline{s})} k_r(s)$$

Etant donnée que  $k_r \in C^3([0, +\infty))$ , la fonction  $M$  est bien une fonction continue sur  $(0, 1)$ . De plus, d'après le lemme 4.2 la fonction  $M$  est strictement décroissante sur  $(0, 1)$ . Le Théorème des valeurs intermédiaires implique qu'il existe un unique  $r_0 \in (0, 1)$  tel que  $M(r_0) = 0$ . Le maximum de  $k(\cdot)$  est atteint, donc il existe un  $s_0 \in (0, \underline{s})$  tel que  $k_{r_0}(s_0) = k'_{r_0}(s_0) = 0$ . L'unicité de  $s_0$  vient de l'hypothèse faite sur  $\mu$ . Pour tout  $r > r_0$ , 4.2 n'admet aucune solution sur  $(0, \underline{s})$ .

Cherchons maintenant, pour  $r > r_0$ , les solutions de 4.2 sur  $(\underline{s}, s_{in})$ . On a  $k_r(\underline{s}) < 0$  et  $\lim_{s \rightarrow s_{in}} k_r(s) = +\infty$ . Donc il y a deux possibilités : pour tout  $r > r_0$  l'équation 4.2 admet une solution unique sur  $(\underline{s}, s_{in})$ , ou bien il existe un  $r_\beta \in (r_0, 1)$  pour lequel l'équation 4.2 admet trois solutions distinctes  $\beta_1 < \beta_2 < \beta_3$  dans  $(\underline{s}, s_{in})$ . Si c'est la première possibilité qui est satisfaite, on conclut que pour tout  $r > r_0$  le système 4.1 admet une solution unique sur  $(0, s_{in})$ . Sinon, on définit la fonction

$$M_1 : r \in (r_0, 1) \mapsto \max_{(\underline{s}, \beta_2)} k_r(s)$$

On a  $M_1(r_0) < 0$  et  $M_1(r_\beta) > 0$ . Par un raisonnement analogue à celui fait pour  $M$ , on déduit l'existence d'un unique couple  $(r_1, s_1) \in (r_0, r_\beta) \times (\underline{s}, \beta_2)$  tel que  $k_{r_1}(s_1) = k'_{r_1}(s_1) = 0$ , et tel que pour tout  $r \in (r_0, r_1)$  le système 4.1 admet une solution unique sur  $(0, s_{in})$ .

Considérons maintenant le cas  $r > r_1$ . On a  $k'_{r_1}(s) > 0$  sur  $(\underline{s}, s_1)$ , donc d'après le lemme 4.2 on a  $k'_r(s) > k'_{r_1}(s) > 0$  pour tout  $r > r_1$ . Et par suite pour tout  $r > r_1$  il existe une solution unique de 4.2 sur  $(\underline{s}, s_1)$ . Donc seule l'étude de 4.2 sur  $(s_1, s_{in})$  est nécessaire. Pour cela on définit la fonction

$$m : r \in (r_1, 1) \mapsto \min_{(s_1, s_{in})} k_r(s)$$

On a  $m(r_1) < 0$  et  $\lim_{r \rightarrow 1} m(r) = +\infty$ . En répétant le même raisonnement fait sur  $M$ , on déduit l'existence et l'unicité d'un unique couple  $(r_2, s_2) \in (r_1, 1) \times (s_1, s_{in})$  qui vérifie  $k_{r_2}(s_2) = k'_{r_2}(s_2) = 0$ , et tel que pour tout  $r > r_2$ , 4.2 admet aucune solution sur  $(s_1, s_{in})$ . D'où on conclut dans ce cas que pour tout  $r \in (r_0, r_1) \cup (r_2, 1)$  le système 4.1 admet un unique équilibre non-trivial dans l'orthant positif.

2. **Cas où  $0 < \underline{s} < \lambda_+$ .** En utilisant le même raisonnement que pour le premier cas, mais en commençant cette fois-ci par chercher le nombre des solutions de 4.2 sur  $(\underline{s}, s_{in})$  puis en passant à  $(0, \underline{s})$ , on peut déduire l'existence d'un unique triplet  $(r_0, r_1, r_2) \in (0, 1)^3$ , avec  $r_0 \leq r_1 \leq r_2$  tel que pour tout  $r \in (r_0, r_1) \cup (r_2, 1)$  l'équation (4.2) admette une solution unique dans  $(0, s_{in})$ .

#### 4.4.2 Stabilité de l'équilibre non-trivial

Pour chaque  $\alpha_1 < \mu(s_{in})$ , on note par

$$I_{\alpha_1} = \{r \in (0, 1) \setminus (4.2) \text{ admet une solution unique dans } (0, s_{in})\}.$$

**Proposition 4.3** *Sous les condition  $\alpha_1 < \mu(s_{in}) < 1$  et  $r \in I_{\alpha_1}$  toutes les trajectoires de (4.2) pour une condition initiale  $(s_1(0), x_1(0))$  telle que  $s_1(0) \geq 0$  et  $x_1(0) > 0$  convergent exponentiellement vers l'unique point d'équilibre non-trivial  $E^*$ .*

*Preuve.* On peut d'abord vérifier facilement que le domaine  $D = \mathbb{R}_+^4$  est invariant par la dynamique (4.1). On considère le vecteur  $z = (z_1, z_2)$  défini par  $z_i = s_i + x_i - s_{in}$  ( $i = 1, 2$ ) et qui a pour dynamique

$$\dot{z} = Az = \begin{bmatrix} -\alpha_1 & 0 \\ \frac{r}{1-r}\alpha_1 & -\alpha_2 - \frac{r}{1-r}\alpha_1 \end{bmatrix} z.$$

Remarquons que  $A$  est une matrice de Hurwitz :

$$\text{tr}(A) = -\alpha_1 - \alpha_2 - \frac{r}{1-r}\alpha_1 < 0 \text{ et } \det(A) = \alpha_1(\alpha_2 + \frac{r}{1-r}\alpha_1) > 0.$$

Par suite  $z$  converge exponentiellement vers 0, ce qui implique que la dynamique (4.1) est dissipative, dans le sens que toute solution de (4.1) dans  $D$  converge exponentiellement vers le compact  $k$  défini par :

$$k = \{(s_1, x_1, s_2, x_2) \in D \mid s_1 + x_1 = s_{in} \text{ et } s_2 + x_2 = s_{in}\}.$$

Sous la condition  $\alpha_1 < \mu(s_{in})$ , les solutions du sous-système  $(s_1, x_1)$  convergent asymptotiquement, pour toute condition initiale  $(s_1(0), x_1(0))$  tel que  $x_1(0) > 0$ , vers l'équilibre non-trivial  $(s_1^*, s_{in} - s_1^*)$  avec  $s_1^*$  est la solution positive unique de  $\mu(s_1) = \alpha_1$  dans  $(0, s_{in})$ . Ceci se vérifie à l'aide de la fonction définie positive suivante

$$V(s_1, x_1) = \frac{1}{\alpha_1} \int_{s_1^*}^{s_1} (\mu(s(\tau)) - \alpha_1) d\tau + x_1 - x_1^* - x_1^* \ln\left(\frac{x_1}{x_1^*}\right)$$

qui est une fonction de Lyapunov dans  $\mathbb{R}_+^2$  ayant une dérivée temporelle strictement négative [86]. Le système (4.1) peut être réécrit sous la forme

$$\begin{cases} \dot{z} &= Az \\ \dot{s}_1 &= -\mu(s_1)(z_1 + s_{in} - s_1) + \alpha_1(s_{in} - s_1) \\ \dot{s}_2 &= -\mu(s_2)(z_2 + s_{in} - s_2) + \alpha_2(s_{in} - s_2) + \frac{r}{1-r} \alpha_1(s_1 - s_2) \end{cases} \quad (4.3)$$

D'après la convergence du vecteur  $z_2$  vers 0, on peut déduire que  $s_2$  converge vers l'intervalle borné  $[0, s_{in}]$  ayant pour dynamique le système non-autonome suivant :

$$\dot{s}_2 = -\mu(s_2)(z_2(t) + s_{in} - s_2) + \alpha_2(s_{in} - s_2) + \frac{r}{1-r} \alpha_1(s_1(t) - s_2) \quad (4.4)$$

qui est asymptotiquement autonome avec comme limite la dynamique suivante :

$$\dot{s}_2 = f(s_2) = (\alpha_2 - \mu(s_2))(s_{in} - s_2) + \frac{r}{1-r} \alpha_1(s_1^* - s_2). \quad (4.5)$$

L'étude de la proposition 4.2 montre que sous la condition  $\alpha_1 < \mu(s_{in}) < 1$  et pour tout  $r \in I_{\alpha_1}$  la dynamique (4.5) admet un unique point d'équilibre  $s_2^*$  dans  $(0, s_{in})$ . De plus, on a  $f(0) > 0$  et  $f(s_{in}) < 0$ , et par suite toutes les solutions de 4.5 dans  $(0, s_{in})$  converge asymptotiquement vers  $s_2^*$ . En appliquant ([74]-Théorème 1.8) on peut déduire que les solutions du système 4.4 convergent vers  $s_2^*$ , puisque toutes les trajectoires de 4.5 restent bornées. Enfin on peut déduire que toute solution du sous-système  $(s_2, x_2)$  converge vers  $(s_2^*, s_{in} - s_2^*)$ .

La matrice Jacobienne de la dynamique (4.1) calculée en  $(s_1^*, x_1^*, s_2^*, x_2^*)$  dans les variables  $(z_1, z_2, s_1, s_2)$  est donnée par

$$\begin{bmatrix} A & 0 \\ \star & J^* \end{bmatrix}$$

avec

$$J^* = \begin{bmatrix} -\mu'(s_1)(s_{in} - s_1) - (\alpha_1 - \mu(s_1)) & 0 \\ \frac{r}{1-r}\alpha_1 & -\mu'(s_2)(s_{in} - s_2) - (\alpha_2 - \mu(s_2)) - \frac{r}{1-r}\alpha_1 \end{bmatrix}$$

Les valeurs propres de  $J^*$  sont données par

$$\lambda_1 = -\mu'(s_1^*)(s_{in} - s_1^*) < 0$$

et

$$\begin{aligned} \lambda_2 &= -\mu'(s_2^*)(s_{in} - s_2^*) - (\alpha_2 - \mu(s_2^*)) - \frac{r}{1-r}\alpha_1 \\ &< -\phi'(s_2^*)(s_{in} - s_2^*) - (\alpha_2 - \phi(s_2^*)) - \frac{r}{1-r}\alpha_1 = 0 \end{aligned}$$

On conclut ainsi la convergence exponentielle vers l'équilibre non-trivial  $E^*$ . ■

### 4.4.3 Étude du rendement à l'équilibre

La configuration "poche" que nous avons étudié peut présenter l'intérêt d'une stabilité lorsqu'elle est bien dimensionnée. On peut se demander si cette propriété de robustesse n'est pas obtenue en détriment de ses performances en termes de dégradation. Nous examinons ici le temps de séjour ou volume total nécessaire pour que la sortie à l'équilibre soit identique à celle d'une configuration d'un seul compartiment. Soit  $\theta$  un réel positif. Pour toutes données  $Q, V$  et  $s_{in}$  fixées, nous allons montrer l'existence d'un volume  $V^\theta = \theta V$  tel que  $s_{out}^*(\theta) = \lambda_-$ , où  $s_{out}^*(\theta)$  désigne la sortie à l'équilibre du système 4.1 pour un volume total égale à  $V^\theta$ . Nous proposons également une condition sur  $s_{in}$  pour que  $V^\theta$  soit plus petit que  $V$ . Le nouveau système avec un volume  $V^\theta$  est donné par le suivant

$$(S^\theta) \begin{cases} \dot{s}_1 &= -\mu(s_1)x_1 + \frac{\alpha_1}{\theta}(s_{in} - s_1) \\ \dot{x}_1 &= (\mu(s_1) - \frac{\alpha_1}{\theta})x_1 \\ \dot{s}_2 &= -\mu(s_2)x_2 + \frac{\alpha_2}{\theta}(s_{in} - s_2) + \frac{r}{1-r}\frac{\alpha_1}{\theta}(s_1 - s_2) \\ \dot{x}_2 &= (\mu(s_2) - \frac{\alpha_2}{\theta})x_2 + \frac{r}{1-r}\frac{\alpha_1}{\theta}(x_1 - x_2) \end{cases} \quad (4.6)$$

**Proposition 4.4** Supposons  $\alpha_2 > \alpha_1$ .

Pour tout  $s_{in} > 0$  tel que  $\alpha_1 < \mu(s_{in}) < 1$ , il existe  $\theta \in (\alpha_1 / \mu(s_{in}), \alpha_2)$  tel que  $s_{out}^*(\theta) = \lambda_-$ . De plus, on a

$$\theta > 1 \iff \frac{s_{in} - \lambda_-}{\lambda_- - s_{in}^-} > \frac{\mu(s_{in})}{1 - \mu(s_{in})}$$

où  $s_{in}^-$  est la solution unique de  $\mu(s) = \mu(s_{in})$  dans  $(0, s_{in})$  (voir Figure 4.5).

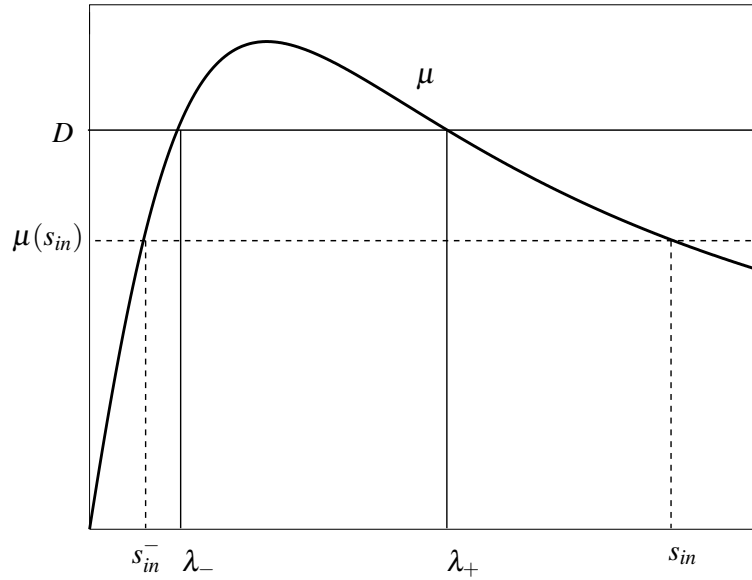


FIG. 4.5 –  $s_{in}^-$  est la solution unique de  $\mu(s) = \mu(s_{in})$  dans  $(0, s_{in})$

**Preuve.** La sortie à l'équilibre pour le système 4.6 vérifie l'équation suivante

$$\left(\mu(s_{out}^*(\theta)) - \frac{\alpha_2}{\theta}\right)(s_{in} - s_{out}^*(\theta)) = \frac{\alpha_1}{\theta} \frac{r}{1-r} (s_1^* - s_{out}^*(\theta)). \quad (4.7)$$

Cherchons donc l'équation que doit vérifier  $\theta$  en imposant que la sortie du système 4.6 soit égale à  $\lambda_-$ .

En remplaçant  $s_{out}^*(\theta)$  par  $\lambda_-$  dans l'équation 4.7, on trouve

$$(s_{in} - \lambda_-)(\alpha_2 - \theta) = \alpha_1 \frac{r}{1-r} \left(\lambda_- - s_1^*\left(\frac{\alpha_1}{\theta}\right)\right), \quad (4.8)$$

soient

$$g(\theta) = \alpha_2 - \theta \text{ et } f(\theta) = \alpha_1 \frac{r}{1-r} \frac{\lambda_- - s_1^*\left(\frac{\alpha_1}{\theta}\right)}{s_{in} - \lambda_-},$$



deux fonctions continues sur  $(0, +\infty)$ . De plus on a :

$$g(\alpha_1) > f(\alpha_1) \text{ et } g(\alpha_2) < f(\alpha_2)$$

Donc il existe au moins un  $\theta_0 \in (\alpha_1, \alpha_2)$  solution de 4.8. Comme  $f$  est strictement croissante et  $g$  est strictement décroissante sur  $(0, +\infty)$ , on déduit l'unicité de  $\theta_0$ .

Soit  $\theta = \theta_0$ . D'après la proposition 4.3, pour tout  $s_{in} > 0$  tel que  $\frac{\alpha_1}{\theta} < \mu(s_{in}) < 1$  et pour tout  $r \in I_{\frac{\alpha_1}{\theta}}$ , le système 4.6 admet un point d'équilibre globalement exponentiellement stable tel que  $s_{out}^*(\theta) = \lambda_-$ . Remarquons que l'inégalité  $\frac{\alpha_1}{\theta} < \mu(s_{in}) < 1$  est faisable. En fait, il suffit de trouver pour chaque  $\alpha_1$ , une condition sur  $s_{in}$  pour que  $\theta$  soit plus grand que  $\alpha_1/\mu(s_{in})$ . Or on sait que

$$\theta > \alpha_1/\mu(s_{in}) \iff g(\alpha_1/\mu(s_{in})) > f(\alpha_1/\mu(s_{in}))$$

ce qui peut être traduit par

$$\theta > \alpha_1/\mu(s_{in}) \iff \frac{s_{in} - \lambda_-}{\lambda_- - s_{in}^-} > \alpha_1 \frac{r}{1-r} \left( \alpha_2 - \frac{\alpha_1}{\mu(s_{in})} \right)^{-1}$$

Remarquons que cette dernière inégalité peut être vérifiée pour tout  $\alpha_1$  tel que  $\alpha_1 < \mu(s_{in}) < 1$ . Il suffit de constater  $\lim_{\mu(s_{in}) \rightarrow 1} \left( \frac{s_{in} - \lambda_-}{\lambda_- - s_{in}^-} \right) = +\infty$ .

Enfin, un simple calcul nous montre qu'en faisant tendre  $\mu(s_{in})$  vers  $\alpha_1$ , nous aurons la propriété suivante

$$\theta > 1 \iff \frac{s_{in} - \lambda_-}{\lambda_- - s_{in}^-} > \frac{\mu(s_{in})}{1 - \mu(s_{in})}.$$

Donc si on choisit  $s_{in}$  tel que

$$\frac{s_{in} - \lambda_-}{\lambda_- - s_{in}^-} < \frac{\mu(s_{in})}{1 - \mu(s_{in})},$$

alors il existe  $\alpha_1$  et  $\theta$  positifs qui vérifient  $\alpha_1/\theta < \mu(s_{in})$  et  $\theta < 1$  et tels que  $s_{out}^*(\theta) = \lambda_-$ .

## 4.5 Simulation numérique et discussion

Les propositions 4.2 et 4.3 montrent que la structure en poche peut aboutir à la stabilisation d'une cinétique de conversion de type Haldane. D'après la proposition 4.2, pour garantir la stabilisation d'une telle cinétique il suffit de concentrer le volume total dans la poche. Ainsi pour un même volume hydrique  $V$ , un même débit d'alimentation  $Q$  et une même concentration en substrat à l'entrée  $s_{in}$  telle

que  $\mu(s_{in}) < Q/V$ , et en partant d'une même condition initiale en biomasse et substrat, dans le bassin d'attraction du lessivage de la biomasse pour la configuration à un simple compartiment, nous vérifions en simulation qu'avec la structure en poche on peut garder une concentration en biomasse positive à l'équilibre (voir Figure 4.6).

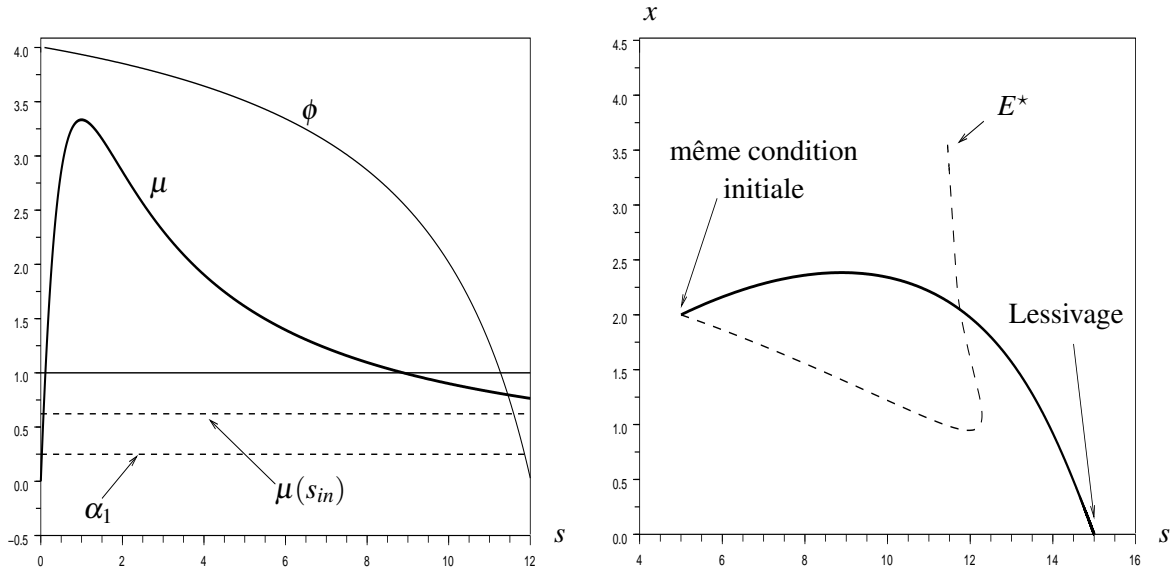


FIG. 4.6 – La structure en poche garde une concentration positive en biomasse pour  $\mu(s) = 10 \frac{s}{1+s+s^2}$ ,  $s_{in} = 15, r = 0.8$  et  $\alpha_1 = 0.4$

Pour les simulations, nous avons considéré la cinétique de croissance suivante :

$$\mu(s) = 3.1 \frac{s}{1+s+s^2}.$$

Bien que la structure en poche puisse stabiliser une cinétique non-monotone, le rendement de cette conversion peut être faible comparativement à celui d'un seul bioréacteur dans le cas du non-lessivage (voir Figure 4.7). Or la proposition 4.4 montre que pour une  $\mu(\cdot)$  donné, un bon choix du volume total et de la concentration en substrat entrant améliore le rendement de la structure en poche qui peut même être meilleur que celui d'un seul bioréacteur (voir Figure 4.8). Nous pensons que cette caractéristique est également d'intérêt en biotechnologie et applications industrielles.

Pour montrer graphiquement la dépendance du choix du volume  $V^\theta$  par rapport à  $s_{in}$  et  $\alpha_1$ , nous avons fixé  $r = 0.4$  et tracé le graphe de  $\theta$  par rapport à  $\alpha_1 \in (0, \mu(s_{in}))$  pour différentes valeurs de  $s_{in}$  choisies

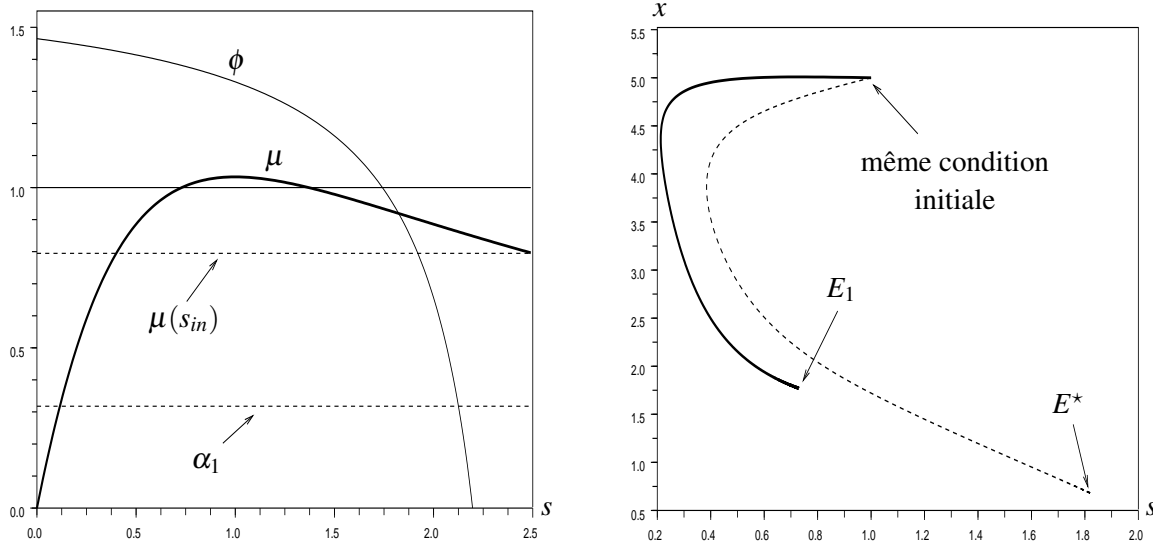


FIG. 4.7 – comparaison du rendement entre la structure en poche et la structure en un seul compartiment pour  $s_{in} = 2.5, r = 0.4$  et  $\alpha_1 = 0.3$

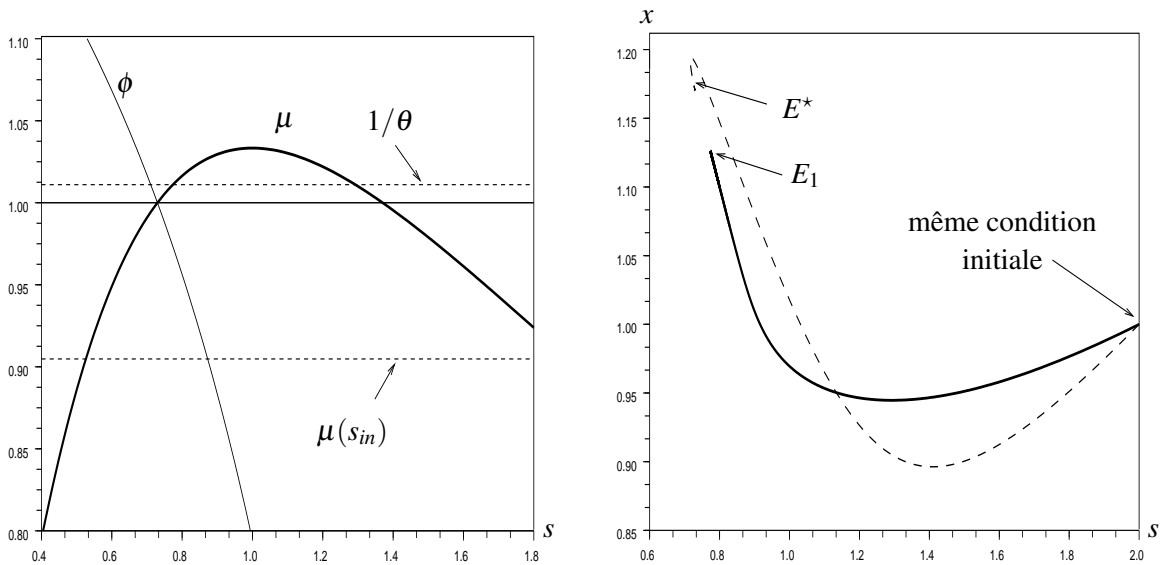


FIG. 4.8 – comparaison du rendement entre la structure en poche et la structure en un seul compartiment pour  $s_{in} = 1.9, r = 0.4, \alpha_1 = 0.8$  et  $\theta = 0.98$

dans l'intervalle  $[1.38, 2.7]$  (voir Figure 4.9). On remarque d'après la figure 4.9 que les graphes de  $\theta$  sont superposés par ordre croissant en passant de  $s_{in} = 1.38$  vers  $s_{in} = 2.7$ , et convergent vers la valeur  $\alpha_2$  lorsque  $\alpha_1$  converge vers zéro. Ceci est vérifié par l'équation 4.8 et peut être bien expliqué par le fait suivant : lorsque  $\alpha_1 = 0$ , les deux compartiments sont découplés et on considère que la sortie du système s'effectue à partir du bioréacteur de gauche avec un débit égal à  $\frac{\alpha_2}{\theta}$ . Dans ce cas, alors l'unique

volume  $V^\theta$  qui peut assurer un débit égal à un est celui qui correspond à  $\theta = \alpha_2$ .

nous appelons seuil la quantité suivante

$$\text{seuil} = \frac{s_{in} - \lambda_-}{\lambda_- - s_{in}^-} - \frac{\mu(s_{in})}{1 - \mu(s_{in})},$$

qui va nous permettre de déduire l'existence de valeurs  $\theta < 1$  selon le signe de seuil.

Le tableau ci-dessous permet de faire le lien avec la figure 4.9. Il contient pour chaque valeur  $s_{in}$  choisie, la valeur seuil qui lui correspond et fait le lien avec ce qui est démontré dans la proposition 4.4 : lorsque ce seuil est positif il n'existe aucune valeur de  $\theta$  inférieur à 1, par contre lorsqu'il est négatif on peut trouver en fonction de  $\alpha_1$  un  $\theta$  plus petit que 1.

$s_{in}$	1.38	1.5	1.7	1.9	2.1	2.3	2.5	2.7
seuil	-543	-34.3	-9.61	-3.75	-1.1	0.43	1.49	2.28
$\theta \in (\alpha_1/\mu(s_{in}), 1)$	$\exists$	$\exists$	$\exists$	$\exists$	$\exists$	$\nexists$	$\nexists$	$\nexists$

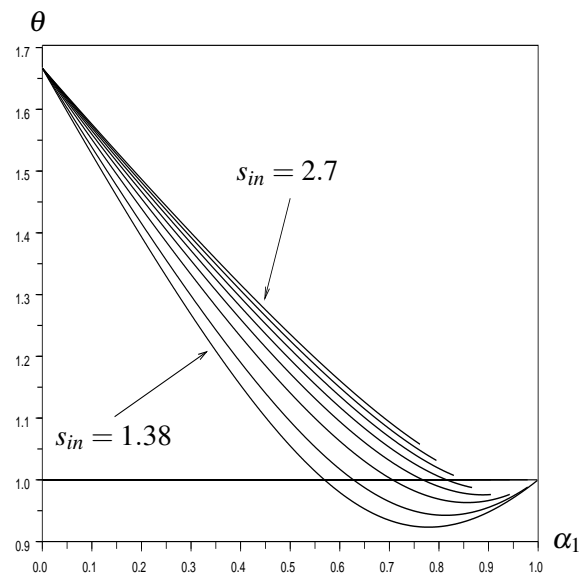


FIG. 4.9 – Les graphes de  $\theta$  par rapport à  $\alpha_1$  pour différentes  $s_{in}$

## 4.6 Conclusion

Dans ce chapitre on a montré que la structure en poche peut stabiliser globalement le chemostat avec une cinétique de croissance non-monotone. L'idée repose sur une propriété des équations à l'équilibre

---

du système représentant un tel motif qui peuvent avoir, pour des choix bien précis de la répartition des volumes et des débits d'alimentations, une solution positive unique. Cet équilibre unique trouvé est montré être globalement exponentiellement stable. De plus on a donné l'expression d'une valeur seuil pour  $s_{in}$  pour laquelle le rendement avec la structure en poche peut être meilleur que celui d'un seul bioréacteur lorsque  $s_m$  est en dessous de ce seuil.



## Chapitre 5

# Conclusion

---

---

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés aux problèmes liés à la modélisation des écosystèmes microbiens des sols. Nous avons commencé par simuler de simples transformations microbiennes dans les conditions des modèles de type chemostat. En utilisant le modèle du transport réactif MIN3P, nous avons remarqué à l'aide de ses simulations que la précision numérique de ce modèle dépend de l'évolution de la concentration des espèces microbiennes. L'idée de ce travail était de souligner que les modèles de transport réactif sont très performants pour modéliser la biogéochimie des sols mais ne sont pas nécessairement pertinents pour modéliser aussi les activités microbiologiques dans les sols.

Puis dans un deuxième temps, et dans le but d'une représentation spatiale plus simplifiée que les modèles de transport réactif mais suffisamment pertinente pour rendre compte de phénomènes biologiques, nous avons essayé de comprendre comment une structure spatiale peut modifier la fonction entrée-sortie dans un chemostat structuré. Pour cela, nous avons procédé à l'étude mathématique de l'effet d'une structuration spatiale sur le rendement dans un chemostat structuré, en présence d'une seule biomasse que croît sur un seul substrat avec une cinétique de croissance monotone. Nous avons considéré au début trois différentes configurations : la parfaitement mélangée, la série et la parallèle. Nous avons montré l'existence d'un seuil sur la concentration en substrat entrant, tel qu'en-dessus et en-dessous de ce seuil, les configurations série et parallèle sont respectivement les meilleures en ce qui concerne le critère de minimisation de la concentration en sortie à l'équilibre, en comparaison avec un seul compartiment parfaitement mélangé de même volume total. Enfin nous avons introduit une nouvelle structure *en poche* qui possède une particularité qui la distingue des configurations précédentes ; elle peut stabiliser glo-

bablement le modèle du chemostat vers un unique équilibre positif avec une cinétique de croissance non-monotone, dans les conditions où les autres structures (un seul réacteur, la série, et la parallèle sans diffusion) présentent des instabilités.

L'étude de la fonction entrée-sortie pour la configuration parallèle est faite en présence d'une seule biomasse. Dans le but de rendre notre étude plus consistante du point de vue écologique, on compte poursuivre ce travail en considérant deux espèces ou plus qui sont en compétition pour le même substrat limitant. De plus, une autre perspective nous paraît importante, pour le développement de la structure en poche vers des structures plus complexes. En fait, on a bien montré que cette structure peut stabiliser globalement le modèle du chemostat à l'équilibre avec une cinétique de croissance non-monotone, mais cette structure est loin d'être représentative d'un écosystème microbien de type sol où on trouve beaucoup d'hétérogénéités. Dans le but d'être plus réaliste, il pourrait être intéressant de compléxifier cette structure de façon récursive en *poche de poche* (voir la Figure 5.1).

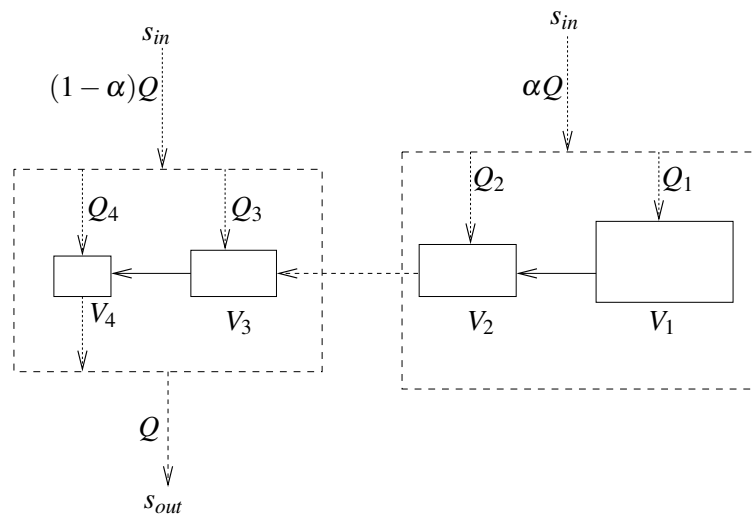


FIG. 5.1 – La poche de poche



# Chapitre A

## Annexe

---

---

Dans cette partie nous exposons quelques notions mathématiques que nous avons utilisées dans cette thèse.

### A.1 Les systèmes dynamiques

Un système dynamique est un modèle permettant de décrire l'évolution au cours du temps d'un ensemble d'objets en interaction. Cet ensemble d'objets est défini par le modélisateur.

Soient  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  et  $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$  une application supposée localement Lipschitzienne sur  $\Omega$ . Un système dynamique est donné dans  $\mathbf{R}^n$ , par le suivant :

$$\frac{dx}{dt} = f(x) \tag{A.1}$$

Généralement pour étudier le comportement du système dynamique autonome A.1, on détermine d'abord ses points d'équilibre (notés par  $x^*$ ) qui sont les solutions de  $f(x) = 0$ , et ensuite étudier les valeurs propres de la dynamique linéaire

$$\frac{dx}{dt} = J(x^*)x,$$

appelée la linéarisation de (A.1) au voisinage de  $x^*$ , où  $J(x^*)$  est la matrice Jacobienne de  $f$  en  $x^*$ . Si les

parties réelles des valeurs propres  $v_i$  ( $i = 1, \dots, n$ ) de  $J(x^*)$  sont toutes non-nulles, alors on dit que  $x^*$  est hyperbolique. Quand au moins un de ses valeurs propres a une partie réelle nulle, alors on dit que  $x^*$  est non-hyperbolique (voir par exemple le référence [84]).

## Notions de stabilité

Nous rappelons maintenant les définitions habituelles de la stabilité et un résultat principal permettant de conclure à propos de la nature de l'équilibre (voir par exemple le référence [84] pour plus de détails).

**1 Définition** *On dit que l'équilibre  $x^*$  est stable si pour tout  $\varepsilon > 0$  il existe  $\delta > 0$  tel que*

$$\|x(t_0) - x^*\| < \delta \Rightarrow \|x(t) - x^*\| < \varepsilon \quad \forall t \geq t_0.$$

*Si cette condition n'est pas satisfaite, l'équilibre est instable.*

**2 Définition** *On dit que l'équilibre  $x^*$  est (localement) exponentiellement stable si pour tout  $\varepsilon > 0$  il existe trois nombres réels  $a > 0, b > 0$  et  $\delta > 0$  tel que*

$$\|x(t_0) - x^*\| < \delta \Rightarrow \|x(t) - x^*\| < a \|x(t_0) - x^*\| e^{-bt} \quad \forall t \geq t_0.$$

**Theorem A.1** – *Si toutes les valeurs propres de  $J(x^*)$  ont une partie réelle strictement négative alors le point d'équilibre  $x^*$  est exponentiellement stable.*

– *Si  $J(x^*)$  possède au moins une valeur propre à partie réelle strictement positive alors le point d'équilibre  $x^*$  est instable.*

*Remarque.* Si la matrice Jacobienne  $J(x^*)$  possède au moins une valeur propre à partie réelle nulle, donc on fait appel à d'autres résultats (comme par exemple le Principe d'Invariance de Lasalle, qu'on va l'énoncé en suite) pour conclure à propos du comportement des trajectoires du système (A.1).

### Stabilité au sens de Lyapunov

Soit  $D^*$  un ensemble invariant pour (A.1).

**3 Définition** Une fonction  $V$  appelée fonction de Lyapunov pour (A.1) sur un ouvert  $D \subset D^*$  si :

1.  $V$  est continûment différentiable sur  $D$ ,
2. pour tout  $\bar{x} \in \bar{D}$ , la limite  $\lim_{\substack{x \rightarrow \bar{x} \\ x \in D}} V(x)$  existe dans  $\mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ , et on la note  $V(\bar{x})$ ,
3.  $\nabla V \cdot f \leq 0$  sur  $D$ .

On note

$$E = \{x \in \bar{D} : V(x) < \infty \text{ et } \dot{V}(x(t))|_{t=0} = 0\}$$

où  $x(t)$  est la solution de (A.1) avec  $x(0) = x$  et on définit  $M$  le plus grand ensemble invariant pour (A.1) dans  $E$ .

Soit  $x(t)$  une solution de (A.1). On a alors, en vertu de l'hypothèse *iii.*,

$$\dot{V}(x(t))|_{t=0} = \nabla V(x(t)) \cdot \dot{x}(t) = \nabla V(x(t)) \cdot f(x(t)) \leq 0.$$

La fonction  $V$  peut être vue comme une énergie. L'hypothèse *iii.* assure que l'énergie est décroissante le long des trajectoires du système. L'ensemble  $E$  consiste en l'ensemble des points où l'énergie est nulle. Le résultat suivant, connu sous le nom de *principe d'invariance de LaSalle*, signifie que les solutions de (A.1) convergent vers des états d'énergie nuls.

#### **Theorem A.2** (Principe d'invariance de LaSalle)

Soit  $V$  une fonction de Lyapunov pour le système (A.1) sur  $D$  et  $\gamma^+ = \{x(t), t \geq 0\}$  une orbite positive bornée de (A.1) incluse dans  $D$ . Alors, l'ensemble omega-limite de  $\gamma^+$  est inclus dans  $M$ .

#### **Critère de Dulac**

**Theorem A.3** Soit  $\Omega$  un ouvert simplement connexe de  $\mathbb{R}^2$ . Si  $\text{div}(f) = \frac{\partial f_1}{\partial x_1} + \frac{\partial f_2}{\partial x_2}$  est de signe constant et non identiquement nulle sur  $\Omega$ , alors  $\dot{x} = f(x)$  n'a aucune orbite périodique incluse dans  $\Omega$ .

### **Théorème de Poincaré-Bendixson**

**Theorem A.4** *Si l'ensemble  $\omega$ -limite,  $\omega(x)$  est borné et ne contient aucun point d'équilibre, alors  $\omega(x)$  est une orbite périodique.*

### **Résultat de Thieme**

Considérons les deux équations différentielles ordinaires suivantes :

$$\dot{y} = g(t, y) \quad y \in \mathbb{R}^n \quad (\text{A.2})$$

$$\dot{x} = f(x) \quad x \in \mathbb{R}^n \quad (\text{A.3})$$

L'équation (A.2), dite asymptotiquement autonome, est d'équation limite (A.3) si :

$$g(t, x) \rightarrow f(x), \quad t \rightarrow +\infty \quad \text{localement uniformément en } x \in \mathbb{R}^n$$

**Theorem A.5** *Soient  $n = 2$  et  $\omega$  l'ensemble  $\omega$ -limite d'une solution bornée  $x$  de (A.2). Supposons qu'il existe un voisinage de  $\omega$  qui contient au plus un nombre fini d'équilibre de (A.3) alors on a un des trois cas :*

1.  $\omega$  est constitué des équilibres de (A.3).
2.  $\omega$  est l'union d'orbites périodiques de (A.3) ou des centres de (A.3) entourés par des orbites périodiques de (A.3) dans  $\omega$ .
3.  $\omega$  contient des équilibres de (A.3) enchainés entre eux dans  $\omega$  par une orbite de (A.3).

## **A.2 Définitions importantes en dynamique du fluide**

Dans cette partie on rappelle les définitions de quelques termes physiques importants pour décrire l'écoulement du fluide.

## Conductivité hydraulique

La conductivité hydraulique  $K$  est un coefficient dépendant des propriétés physique du milieu poreux où l'écoulement a lieu, des propriétés du fluide concerné par les écoulements et de la saturation du milieu poreux. Elle s'exprime en fonction des propriétés intrinsèques du milieu poreux et du fluide par :

$$K = \frac{k \cdot \rho \cdot g}{\mu}$$

où

- $k$  la perméabilité intrinsèque du milieu poreux, [ $m^2$ ],
- $\rho$  représente la masse volumique du fluide, [ $kg \cdot m^{-3}$ ],
- $g$  représente l'accélération de la pesanteur, [ $m \cdot s^{-2}$ ]
- $\mu$  la viscosité dynamique du fluide, [ $kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$ ].

## La loi de Darcy

Les causes de déplacement d'un fluide en milieu poreux sont les gradients de pression et la gravité. La loi de Darcy exprime la vitesse de filtration de la charge hydraulique. Pour un fluide incompressible, la loi de Darcy s'écrit :

$$q = -k_r \kappa \nabla \left( \frac{p}{\rho g} + z \right) = -\kappa \nabla h,$$

où

- $q$  représente la vitesse de Darcy, [ $m \cdot s^{-1}$ ],
- $z$  la cote verticale, [ $m$ ],
- $p$  la pression,
- $h = \frac{p}{\rho g} + z$  la charge hydraulique, [ $m$ ],
- $k_r$  est la perméabilité relative du milieu.

### La porosité géométrique

La porosité géométrique  $\phi$  du milieu poreux est déterminée aussi à l'échelle de l'EVR. Elle indique le rapport entre le volume total des vides (ensemble des pores contenant les phases liquide et gazeuse) et le volume de l'EVR. Sa formulation est la suivante :

$$\phi = \frac{V_l + V_g}{V_t}$$

avec  $V_l$  et  $V_g$  sont respectivement les volumes liquides et gazeux contenus dans l'EVR.

### Degré de saturation $S$

La première variable descriptive utilisée pour décrire l'écoulement d'un fluide dans un sol non-saturé est la teneur volumique  $\theta$ , définie par le rapport entre le volume d'eau contenu dans l'EVR  $V_f$  et le volume total de l'EVR  $V_t$ . Ses valeurs sont bornées par deux données caractéristiques du sol considéré :

- la teneur en fluide résiduelle  $\theta_r$ ,
- la teneur en fluide à saturation  $\theta_{sat}$ .

Soit :

$$\theta = \frac{V_f}{V_t} \text{ avec } \theta_r \leq \theta \leq \theta_{sat}.$$

Enfin, dans les sols non-saturés, le rapport entre la teneur en fluide volumique  $\theta$  et la porosité géométrique  $\phi$  permet de connaître le degré de saturation  $S$  du milieu défini par la relation :

$$S = \frac{\theta}{\phi}.$$

# Bibliographie

- [1] R. ARIS & A. HUMPHREY – « Dynamics of a chemostat in which two organisms compete for a common substrate », *Biotechnology and Bioengineering* **19** (1977), p. 1375–1386.
- [2] R. A. ARMSTRONG & R. MCGEHEE – « Competitive exclusion », *The American Naturalist* **115** (1980), p. 151–170.
- [3] G. BASTIN & D. DOCHAIN – « On-line estimation and adaptative control of bioreactors », *Elsevier* (1990).
- [4] J. BEAR – « Dynamics of fluid in porous media », *Elsevier Science, New York* (1972).
- [5] — , « Hydraulics of Groudwater », *McGraw Hill, New York* (1979), p. 567.
- [6] E. BERETTA, G. BISCHI & F. SOLIMANO – « Stability in chemostat equations with delayed nutrient recycling », *J. Math. Biol.* **28(1)** (1990), p. 99–111.
- [7] E. BERETTA & Y. TAKEUCHI – « Global stability for chemostat equations with delayed nutrient recycling », *Nonlinear World* **1** (1994), p. 191–206.
- [8] — , « Qualitative properties of chemostat equations with time delays : boundedness, local and global asymptotic stability », *Mathematical Biosciences* **2(1)** (1994), p. 19–40.
- [9] — , « Qualitative properties of chemostat equations with time delays II », *Differential Equations and Dynamical Systems* **2(4)** (1994), p. 263–288.
- [10] G. BUTLER & G. WOLCOWICZ – « A mathematical model of the chemostat with a general class of functions describing nutrient uptake », *SIAM Journal on Applied Mathematics* **45(1)** (1985), p. 138–151.

- [11] J. CARRAYROU, J. HOFFMANN, P. KNABNER, S. KRAUTLE, C. DE DIEULEVEULT, J. ERTHEL, J. V. DER LEE, V. LAGNEAU, K. MAYER & K. MACQUARRIE – « Comparison of numerical methods for simulating strongly nonlinear and heterogeneous reactive transport problems—the MoMas benchmark case », *Comput Geosci* **14** (2010), p. 483–502.
- [12] C. CENENS, I. SMETS & J. V. IMPE – « Modeling the competition between floc-forming and filamentous bacteria in activated sludge waste water treatment systems - II. A prototype mathematical model based on kinetic selection and filamentous backbone theory », *Water Research* **34(9)** (2000), p. 535–541.
- [13] A. CHILAKAPATI, A. YABUSAKI, J. SZECSDY & W. MACEVOY – « Groundwater flow, multicomponent transport and biogeochemistry, Development and application of a coupled process model », *J. Contam. Hydrol.* **43** (2000), p. 303–325.
- [14] T. P. CLEMENT – « RT3D-A modular computer code for simulating reactive multi-species transport in 3-dimensional groundwater aquifers. », *PNNL11, 720, Pac. Northwest Natl. Lab., Richland, Wash* (1997).
- [15] B. COCHEPIN, L. TROTIGNON, O. BILDSTEIN, C. I. STEEFEL, V. LAGNEAU & J. V. DER LEE – « Approaches to modelling coupled flow and reaction in a 2D cementation experiment », *Advances in Water Resources* **31** (2008), p. 1540–1551.
- [16] C. DE DIEULEVEULT & J. ERTHEL – « A global approach to reactive transport, application to the MoMas benchmark », *Comput Geosci* **14** (2010), p. 451–464.
- [17] P. DORAN – « Design of mixing systems for plant cell suspensions in stirred reactors », *Biotechnology Progress* **15** (1999), p. 319–335.
- [18] A. DRAMÉ, J. HARMAND, A. RAPAPORT & C. LOBRY – « Multiple steady state profiles in interconnected biological systems », *Mathematical and Computer Modelling of Dynamical Systems* **12 (5)** (2006), p. 379–399.
- [19] A. DRAMÉ, C. LOBRY, J. HARMAND, A. RAPAPORT & F. MAZENC – « Multiple stable equilibrium profiles in tubular bioreactors », *Mathematical and Computer Modelling* **48 (11-12)** (2008), p. 1840–1853.



- [20] S. FOGER – « Elements of Chemical Reaction Engineering », *Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ (USA)* **4th Edition**.
- [21] H. FREEDMAN & Y. XU – « Models of competition in the chemostat with instantaneous and delayed nutrient recycling », *J. Math. Biol.* **31(5)** (1993), p. 513–527.
- [22] H. FREEDMAN, J. SO & P. WALTMAN – « Coexistence in a model of competition in the chemostat incorporating discrete delays », *SIAM Journal on Applied Mathematics* **49(3)** (1989), p. 859–870.
- [23] M. V. GENUCHTEN – « Analytical solutions for chemical transport with simultaneous adsorption, zero-order production and first-order decay », *J. Hydrol.* **49** (1981), p. 213–233.
- [24] F. GÉRARD, A. CLÉMENT & B. FRITZ – « Numerical validation of an Eulerian hydrochemical code using a 1-D multisolute mass transport system involving heterogeneous kinetically-controlled reactions », *Journal of Contaminant Hydrology* **30** (1998), p. 201–216.
- [25] F. GÉRARD, A. CLÉMENT, B. FRITZ & J. CROVISIER – « Introduction of transport phenomena into the thermo-kinetic code KINDIS : The code KIRMAT », *C.R. Acad. Sci. Paris* **322IIa** (1996), p. 377–384.
- [26] F. GÉRARD & K. U. MAYER – « VisualMin3P User Guide (version 2) », (2010).
- [27] F. GÉRARD, K. U. MAYER, M. J. HODSON & J. RANGER – « Modelling the biogeochemical cycle of silicon in soils : application to a temperate forest ecosystem », *Geochimica et Cosmochimica Acta* **72** (2008), p. 741–758.
- [28] F. GÉRARD, M. TINSLEY & K. U. MAYER – « Preferential flow revealed by hydrologic modeling based on predicted hydraulic properties », *Soil Science Society of America Journal* **68** (2004), p. 1526–1538.
- [29] C. D. GOOIJER, W. BAKKER, H. BEEFTINK & J. TRAMPER – « Bioreactors in series : an overview of design procedures and practical applications », *Enzyme and Microbial Technology* **18** (1996), p. 202–219.

- [30] C. D. GOOIJER, H. BEEFTINK & J. TRAMPER – « Optimal design of a series of continuous stirred tank reactors containing immobilised growing cells », *Biotechnology Letters* **18** (1996), p. 397–402.
- [31] L. GRADY, G. DAIGGER & H. LIM – « Biological Wastewater Treatment », *Environmental Science and Pollution Control Series. Ed. Marcel Dekker, New-York 3rd Edition* (1999).
- [32] D. GRAVEL, F. GUICHARD, M. LOREAU & N. MOUQUET – « Source and sink dynamics in metaecosystems », *Ecology* **91** (2010), p. 2172–2184.
- [33] A. GROBICKI & D. STUCKEY – « Hydrodynamic characteristics of the anaerobic baffled reactor », *Water Research* **26** (1992), p. 371–378.
- [34] K. HADELER & H. FREEDMAN – « Predator-prey population with parasite infection », *Journal of Mathematical Biology* **27** (1989), p. 609–631.
- [35] I. HAIDAR, A. RAPAPORT & F. GÉRARD – « Effects of spatial structure and diffusion on the performances of the chemostat », *Mathematical Bioscience and Engineering* **8(4)** (2011), p. 953–971.
- [36] M. E. HAJJI & A. RAPAPORT – « Practical coexistence of two species in the chemostat-A slow-fast characterization- », *Math Biosci.* **218(1), 33-39 (2009)** (2009), p. 33–39.
- [37] I. HANSKI – « Metapopulation ecology », *Oxford University Press* (1999).
- [38] J. HARMAND & D. DOCHAIN – « Towards a unified approach for the design of interconnected catalytic and auto-catalytic reactors », *Computers and Chemical Engineering* **30** (2005), p. 70–82.
- [39] J. HARMAND, A. RAPAPORT & A. DRAMÉ – « Optimal design of two interconnected enzymatic reactors », *Journal of Process Control* **14 (7)** (2004), p. 785–794.
- [40] J. HARMAND, A. RAPAPORT & A. TROFINO – « Optimal design of two interconnected bioreactors–some new results », *American Institute of Chemical Engineering Journal* **49 (6)** (2003), p. 1433–1450.
- [41] X. HE & S. RUAN – « Global stability in chemostat-type plankton models with delayed nutrient recycling », *Technical Report, 96-8, University of Sydney, School of Mathematics & Statistics* (1996).

- [42] X. HE, S. RUAN & H. XIA – « Global stability in chemostat-type equations with distributed delays », *Technical Report, 96-34, University of Sydney, School of Mathematics & Statistics* (1996).
- [43] — , « Global stability in chemostat-type equations with distributed delays », *SIAM Journal on Mathematical Analysis* **29(3)** (1997), p. 681–696.
- [44] G. HILL & C. ROBINSON – « Minimum tank volumes for CFST bioreactors in series », *The Canadian Journal of Chemical Engineering* **67** (1989), p. 818–824.
- [45] S. HSU, S. HUBBELL & P. WALTMAN – « A mathematical theory for single-nutrient competition in continuous cultures of micro-organisms », *SIAM Journal on Applied Mathematics* **32** (1977), p. 366–383.
- [46] W. S. HU, K. WLASHCHIN, M. BETENBAUGH, F. WURM, G. SETH & W. ZHOU – « Cellular Bioprocess Technology, Fundamentals and Frontier », *Lectures Notes. University of Minesota* (2007).
- [47] D. JACQUES, J. SIMUNEK, D. MALLANTS & M. T. VAN GENUCHTEN – « Modelling coupled water flow, solute transport and geochemical reactions affecting heavy metal migration in a podzol soil », *Geoderma* **145** (2008), p. 449–461.
- [48] S. JANG – « Dynamics of variable-yield nutrient-phytoplankton-zooplankton models with nutrient recycling and self-shading », *J. Math. Biol.* **40(3)** (2000), p. 229–250.
- [49] L. JIANG & Z. MA – « Stability of a chemostat model for a single species with delayed nutrient recycling-case of weak kernel function », *Chinese Quart. J. Math.* **13(1)** (1998), p. 64–69.
- [50] Q. JIN & M. BETHKE – « Kinetics of Electron Transfer Trough the Respiratory Chain », *Biophysical Journal* **83** (2002), p. 1797–1808.
- [51] — , « A New Rate Law Describing Microbial Respiration », *Applied And Enviromental Microbiology* **69(4)** (2003), p. 2340–2348.
- [52] — , « Predicting the rate of microbial respiration in geochemical environments », *Geochimica et Cosmochimica Acta* **69(5)** (2005), p. 1133–1143.
- [53] — , « The Thermodynamics And Kinetics Of Microbial Metabolism », *American Journal Of Science* **307** (2007), p. 643–677.

- [54] F. KANDIL – « Model of competition in the chemostat with instantaneous recycling », *Applied Mathematics and Computation* **108** (2000), p. 1–10.
- [55] M. KEIZER & W. V. RIEMSDIJK – « ECOSAT, a computer program for the calculation of chemical speciation and transport in soil-water systems », *Wageningen Agricultural University* (1995).
- [56] A. C. LASAGA – « Chemical kinetics of water-rock interactions », *Journal of Geophysical Research* **89(B6)** (1984), p. 4009–4025.
- [57] — , « Rate laws of chemical reactions, in Kinetics of geochemical processes », *Ch. 1 in Reactive transport in porous media. Rev. Min., edited by A. C. Lasaga, and R. J. Kirkpatrick Chapter 1* (Washington, D.C. USA, Mineralogical Society of America, 1981.), p. 1–68.
- [58] J. V. DER LEE, V. LANGEAU & P. GOBLET – « Module-oriented modelling of reactive transport with HYTEC », *Comput. Geosci.* **29** (2003), p. 265–275.
- [59] O. LEVENSPIEL – « Chemical reaction engineering », *Wiley, New York 3rd edition*.
- [60] P. LICHTNER – « Continuum formulation of multicomponent-multiphase reactive transport, Ch. 1 in Reactive transport in porous media », *Reviews in Mineralogy, Mineralogical Society of America* **34** (1996), p. 1–81.
- [61] — , « Modeling of reactive flow and transport in natural systems », in *Proceedings of the Rome Seminar on Environmental Geochemistry* (Castelnuovo di Porto, 1996a, May 22-26), p. 5–72.
- [62] R. LOVITT & J. WIMPENNY – « The gradostat : a bidirectional compound chemostat and its applications in microbial research », *Journal of General Microbiology* **127** (1981), p. 261–268.
- [63] Z. LU – « Global stability for a chemostat-type model with delayed nutrient recycling », *Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series B* **4(3)** (2004), p. 663–670.
- [64] K. LUYBEN & J. TRAMPER – « Optimal design for continuously stirred tank reactors in series using Michaelis-Menten kinetics », *Biotechnology and Bioengineering* **24** (1982), p. 1217–1220.
- [65] R. H. MACARTHUR & E. WILSON – « The Theory of Island Biogeography », *Princeton University Press* (1967).

- [66] U. MAIER, C. DEBIASE, O. BAEDER-BEDERSKI & P. BAYER – « Calibration of hydraulic parameters for large-scale vertical flow constructed wetlands », *Journal of Hydrology* **369** (2009), p. 260–273.
- [67] Y. MASUE-SLOWEY, B. D. KOCAR, S. A. B. JOFRE, K. U. MAYER & S. FENDORF – « Transport Implications Resulting from Internal Redistribution of Arsenic and Iron within Constructed Soil Aggregates », *Environmental Science and Technology* **45(2)** (2011), p. 582–588.
- [68] K. MAYER, S. BENNER & D. BLOWES – « Process-based reactive transport modelling of a permeable reactive barrier for the treatment of mine drainage », *J. Contam. Hydrol* **85** (2006), p. 195–211.
- [69] K. MAYER, S. BENNER, E. FRIND, S. THORNTON & D. LENER – « Reactive transport modeling of processes controlling the distribution and natural attenuation of phenolic compounds in a deep sandstone aquifer », *J. Contam. Hydrol.* **53** (2001), p. 341–368.
- [70] K. MAYER, E. FRIND & D. BLOWES – « Multicomponent reactive transport modeling in variably saturated porous media using a generalised formulation for kinetically controlled reactions », *Water Resour. Res.* **38** (2002), p. 1174.
- [71] K. MAYER & K. MACQUARRIE – « Solution of the MoMas reactive transport benchmark with MIN3P-model formulation and simulation results », *Comput. Geosci.* **14** (2010), p. 405–419.
- [72] J. MEEUSSEN – « ORCHESTRA : an object-oriented framework for implementing chemical equilibrium models », *Environ Sci Technol.* **37** (2003), p. 1175–1182.
- [73] L. MICHAELIS & M. MENTEN – « Die kinetik der invertinwirkung », *Biochemische Zeitschrift* **49** (1931), p. 333–369.
- [74] M. MISCHAIKOW, H. SMITH & H. THIEME – « Asymptotically autonomous semiflows : chain recurrence and Lyapunov functions », *Transactions of the American Mathematical Society* **347** (5) (1995), p. 1669–1685.
- [75] S. MOLINS, K. U. MAYER, C. SCHEUTZ & P. KJELDSSEN – « Transport and reaction processes affecting the attenuation of landfill gas in cover soils », *Journal of Environmental Quality* **37** (2008), p. 459–468.

- [76] J. MONOD – « The growth of bacterial cultures », *Ann Rev Microbiol* **3** (1949), p. 371–394.
- [77] — , « La technique de la culture continue : théorie et applications », *Annales de l'Institut Pasteur* **79** (1950), p. 390–410.
- [78] S. NAKAOKA & Y. TAKEUCHI – « Competition in chemostat-type equations with two habitats », *Mathematical Biosciences* **201** (2006), p. 157–171.
- [79] M. I. NELSON & H. SIDHU – « Evaluating the performance of a cascade of two bioreactors », *Chemical Engineering Science* **61** (2006), p. 3159–3166.
- [80] S. P. NEUMAN – « Saturated-unsaturated seepage by nite elements, ASCE », *Journal of the Hydraulics Division* **99(HY12)** (1973), p. 2233–2250.
- [81] A. NOVICK & L. SZILARD – « Description of the chemostat », *Science* **112** (1950), p. 715–716.
- [82] B. NOWACK, K. MAYER, S. OSWALD, W. VAN BEINUM, C. APPELO, D. JACQUES, A. SEUNTJENS, F. GÉRARD, B. JAILLARD, A. SCHNEPF & T. ROOSE – « Verification and intercomparison of reactive transport codes to describe root-uptake », *Plant Soil* **285** (2006), p. 305–321.
- [83] D. PARKHUST & C. APPELO – « User's guide to PHREEQC (version2). A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations », *Water resources investigations report 99-4259 US Geological Survey* **312** (1999).
- [84] L. PERKO – « Differential Equations and Dynamical Systems », *Springer-Verlag New York, Inc., 175 Fifth Avenue, New York, NY 10010, USA* **1991**.
- [85] A. RAPAPORT & J. HARMAND – « Biological control of the chemostat with nonmonotonic response and different removal rates », *Mathematical Biosciences and Engineering* **5(3)** (2008), p. 539–547.
- [86] A. RAPAPORT, J. HARMAND & F. MAZENC – « Coexistence in the design of a series of two chemostats », *Nonlinear Analysis, Real World Applications* **9** (2008), p. 1052–1067.
- [87] K. V. RIET & J. TRAMPER – « Basic bioreactor design », *Marcel Dekker, New-York* (1991).

- [88] E. ROCA, C. GHOMMIDH, J. M. NAVARRO & J. M. LEMA – « Hydraulic model of a gas-lift bioreactor with flocculating yeast », *Bioprocess and Biosystems Engineering* **12 (5)** (1995), p. 269–272.
- [89] G. ROUX, B. DAHHOU & I. QUEINNEC – « Adaptive non-linear control of a continuous stirred tank bioreactor », *Journal of Process Control* **4 (3)** (1994), p. 121–126.
- [90] S. RUAN – « Persistence and coexistence in zooplankton-phytoplankton-nutrient models with instantaneous nutrient recycling », *J. Math. Biol.* **31(6)** (1993), p. 633–654.
- [91] S. RUAN & X. HE – « Global stability in chemostat-type competition models with nutrient recycling », *SIAM J. Appl. Math.* **58** (1998), p. 170–192.
- [92] S. RUAN & X. HE – « Global stability in chemostat-type competition models with nutrient recycling », *Technical Report 96-9, University of Sydney, School of Mathematics & Statistics.*
- [93] — , « Global stability in chemostat-type competition models with nutrient recycling », *SIAM Journal on Applied Mathematics* **58(1)** (1998), p. 170–192.
- [94] J. RUBIN – « Transport of reacting solutes in porous media : Relation between mathematical nature of problem formulation and chemical nature of reactions », *Water Resources Research* **19(5)** (1983), p. 1231–1252.
- [95] A. SADDODD, T. SARI, A. RAPAPORT, R. LORTIE, J. HARMAND & E. DUBREUCQ – « Amathematical study of an enzymatic hydrolysis of a cellulosic substrate in non homogeneous reactors », *Proceedings of the IFAC Computer Applications in Biotechnology Conference Leuven, Belgium, July 7–9* (2010).
- [96] A. SCHEEL & E. V. VLECK – « Lattice differential equations embedded into reaction-diffusion systems », *Proceedings of the Royal Society Edinburgh Section A* **139 (1)** (2009), p. 193–207.
- [97] R. SCHWARTZ, A. JUO & K. MCINNES – « Estimating parameters for a dual-porosity model to describe non-equilibrium, reactive transport in a fine-textured soil », *Journal of Hydrology* **229 (3-4)** (2000), p. 149–167.
- [98] H. SMITH & P. WALTMAN – « The theory of chemostat, dynamics of microbial competition », *Cambridge Studies in Mathematical Biology, Cambridge University Press.*

- [99] C. STEEFEL – « Crunch-users guide. USA. Lawrence Berkeley Laboratory », (2006).
- [100] C. STEEFEL & A. C. LASAGA – « A coupled model for transport of multiple chemical species and kinetic precipitation/dissolution reactions with application to reactive flow in single phase hydrothermal systems », *American Journal of Science* **294** (1994), p. 529–592.
- [101] G. STEPHANOPOULOS & A. FREDERICKSON – « Effect of inhomogeneities on the coexistence of competing microbial populations », *Biotechnology and Bioengineering* **21** (1979), p. 1491–1498.
- [102] G. STEPHANOPOULOS & A. G. FREDRICKSON – « Effect of inhomogeneities on the coexistence of competing microbial populations », *Biotechnology and Bioengineering* **21** (1979), p. 1491–1498.
- [103] Y. SUN, J. PETERSEN & T. CLEMENT – « Analytical solutions for multiple species reactive transport in multiple dimensions », *J. Contam. Hydrol.* **35** (1999), p. 429–440.
- [104] Z. TENG, R. GAO, M. REHIM & K. WANG – « Global behaviors of Monod type chemostat model with nutrient recycling and impulsive input », *Journal of Mathematical Chemistry* **In press** (2009).
- [105] M. THULLNER, P. REGNIER & P. V. CAPPELLEN – « Modeling Microbially Induced Carbon Degredation in Redox-Stratified Subsurface Environments : Concept and Open Questions », *Geomicrobiology Journal* **24** (2007), p. 139–155.
- [106] C. TSAKIROGLOU & M. IOANNIDIS – « Dual-porosity modelling of the pore structure and transport properties of a contaminated soil », *European Journal of Soil Science* **59 (4)** (2008), p. 744–761.
- [107] F. VALDES-PARADA, J. ALVAREZ-RAMIREZ & A. OCHOA-TAPIA – « An approximate solution for a transient two-phase stirred tank bioreactor with nonlinear kinetics », *Biotechnology progress* **21 (5)** (2005), p. 1420–1428.
- [108] G. WOLKOWICZ & Z. LU – « Global dynamics of a mathematical model of competition in the chemostat : general response functions and differential death rates », *SIAM Journal on Applied Mathematics* **52(1)** (1992), p. 222–233.



- [109] G. WOLKOWICZ & H. XIA – « Global asymptotic behavior of a chemostat model with discrete delays », *SIAM Journal on Applied Mathematics* **57** (1997), p. 1019–1043.
- [110] G. WOLKOWICZ, H. XIA & S. RUAN – « Competition in the chemostat : A distributed delay model and its global asymptotic behavior », *SIAM Journal on Applied Mathematics* **57(5)** (1997), p. 1281–1310.
- [111] J. H. M. WÖSTEN & M. T. VAN GENUCHTEN – « Using texture and other soil properties to predict the unsaturated soil hydraulic functions », *Soil Sci. Soc. Am. J.* **52** (1988), p. 1762–1770,.
- [112] H. X. & S. RUAN – « Global stability in chemostat-type plankton models with delayed nutrient recycling », *J. Math. Biol.* **37(3)** (1998), p. 253–271.
- [113] G. T. YEH, M. D. SIEGEL & M. H. LI – « Numerical modeling of coupled variably saturated fluid flow and reactive transport with fast and slow chemical reactions », *Journal of Contaminant Hydrology* **47** (2001), p. 379–390.
- [114] S. YUAN, W. ZHANG & M. HAN – « Global asymptotic behavior in chemostat-type competition models with delay », *Nonlinear Analysis : Real World Applications* **10(3)** (2009), p. 1305–1320.

## RÉSUMÉ

Cette thèse adresse des problèmes liés à la modélisation des écosystèmes microbiens dans les sols. Les modèles de transport réactif sont très performants pour modéliser la biogéochimie d'un milieu poreux variablement saturé en tenant compte de plusieurs paramètres physiques et géochimiques mais ils n'intègrent pas (ou sinon de façon très sommaire) les activités microbiologiques dans les sols. Le modèle mathématique du chemostat est couramment utilisé en écologie microbienne. Dans le but d'une représentation spatiale plus simplifiée que les modèles de transport réactif mais suffisamment pertinente pour rendre compte de phénomènes biologiques, cette thèse est une première tentative pour comprendre la fonction entrées-sorties dans un chemostat structuré, et étudier comment une structure spatiale peut modifier cette fonction, et quels sont les paramètres clés.

**Mots-clés** : Systèmes dynamiques, simulations numériques, écologie microbienne des sols, modèle du chemostat.

## ABSTRACT

The aim of this thesis is to study some problems related to the modeling of microbial ecosystems in soil. Considering different physical and biogeochemical parameters, the reactive transport models are very performing to represent the biochemistry of a variably saturated porous media. In contrast, these models don't integrate (or sparsely) the microbiological activities in the soils. The mathematical model of chemostat is frequently used in microbial ecology. For the purpose of a more simplified spatial representation than the reactive transport models, but sufficiently relevant to represent biological phenomena, this thesis is a first attempt to understand the "input-output" function in a structured chemostat, and to study how a special structure can alter this function, and what are the key parameters.

**Keywords** : Dynamical systems, numerical simulations, microbial ecology of soil, chemostat model.