



HAL
open science

Modélisation, identification et commande de systèmes dynamiques biologiques: application à l'étude des processus biochimiques dans les écosystèmes

Céline Casenave

► **To cite this version:**

Céline Casenave. Modélisation, identification et commande de systèmes dynamiques biologiques: application à l'étude des processus biochimiques dans les écosystèmes. Systèmes dynamiques [math.DS]. Université de Montpellier (UM), FRA, 2022. tel-04136119

HAL Id: tel-04136119

<https://hal.inrae.fr/tel-04136119v1>

Submitted on 21 Jun 2023

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 de Montpellier

École doctorale Information, Structures et Systèmes (I2S)
Spécialité : Mathématiques et Modélisation

Manuscrit pour l'obtention de
l'HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES

Modélisation, identification et commande de systèmes dynamiques biologiques *application à l'étude des processus biochimiques dans les écosystèmes*

Céline CASENAVE

Habilitation à diriger des recherches
soutenue le 18 Novembre 2022 devant le jury composé de :

Madalena CHAVES	- BIOCORE, INRIA Sophia-Antipolis	- Rapporteur
Carole DELENNE	- HSM, Univ. Montpellier	- Examinatrice
Denis DOCHAIN	- UCL, Louvain-la-neuve, Belgique	- Président du jury
Jean-Denis MATHIAS	- LISC, INRAE Clermont-Ferrand	- Rapporteur
Jean-Christophe POGGIALE	- MIO, Aix-Marseille Université	- Rapporteur
Jean-Philippe STEYER	- LBE, INRAE Narbonne	- Examinateur

Table des matières

Introduction	8
1 Modélisation des écosystèmes	10
1.1 Les écosystèmes	11
1.2 La modélisation	12
1.3 Modèle complexe versus modèle minimaliste	17
1.4 Modèles de Volterra	17
2 Applications	20
2.1 Optimisation des systèmes agro-sylvo-pastoraux	21
2.2 Modélisation des blooms cyanobactériens dans les lacs	22
2.3 Contrôle de la fermentation alcoolique	23
3 Modélisation et analyse de dynamiques de processus agro-bio-écologiques	26
3.1 Introduction	27
3.2 Transfert de nutriments par le bétail dans les agro-écosystèmes mixtes	27
3.3 Fixation de l'azote atmosphérique par les plantes dans les pâturages	30
3.4 Synthèse de phosphatase alcaline par les cyanobactéries	32
3.5 Dégradation du sucre en alcool par les levures lors de la fermentation alcoolique	35
4 Vers des modèles plus complexes	40
4.1 Introduction	41
4.2 Modèles intégrro-différentiels de Volterra	42
4.3 Modèles compartimentaux de sols fracturés	44
4.4 Méta-écosystèmes	47
4.5 Modèles thermo-hydro-écologiques des lacs	49
5 Identification et calibration de modèles	56
5.1 Introduction	56
5.2 Identification de modèles de Volterra	57
5.3 Identification d'un modèle de la cinétique de fermentation alcoolique	60
5.4 Calibration d'un modèle de cristallisation de crème glacée	62
5.5 Calibration du modèle thermo-hydrodynamique FVCOM	64

5.6	Calibration de modèles écologiques avec l'ABC random forest	67
6	Quelques problèmes de commande	70
6.1	Introduction	70
6.2	Commande de procédés	71
6.3	Synthèse de loi de commande sous contraintes de positivité sur les entrées	76
	Conclusion	84
7	Bibliographie	86

“Je déclare avoir respecté, dans la conception et la rédaction de ce mémoire d’HDR, les valeurs et principes d’intégrité scientifique destinés à garantir le caractère honnête et scientifiquement rigoureux de tout travail de recherche, visés à l’article L.211-2 du Code de la recherche et énoncés par la Charte nationale de déontologie des métiers de la recherche et la Charte d’intégrité scientifique de l’Université de Montpellier. Je m’engage à les promouvoir dans le cadre de mes activités futures d’encadrement de recherche.”

Remerciements

A l'heure où j'écris ces remerciements, ma soutenance d'HDR date déjà de plus de 6 mois. Certainement le temps nécessaire pour me remettre de mes émotions, et de cette période de bilan que j'ai trouvée agréable, mais qui m'amène également à réfléchir à mes orientations de recherche futures.

Cette étape de ma carrière n'aurait pu se faire sans les membres de mon jury que je tenais tout particulier à remercier. D'abord mes rapporteurs, Madalena CHAVES, Jean-Denis MATHIAS et Jean-Christophe POGGIALE, et les autres membres du jury, Carole DELENNE, Denis DOCHAIN (qui a en plus accepté de présider le jury) et Jean-Philippe STEYER. Mon HDR aura été l'occasion pour moi de faire de belles rencontres, et de retrouver des personnes qui me sont chères et me soutiennent depuis longtemps dans ma carrière. Merci pour toutes les belles choses que vous avez pu me dire le jour de ma soutenance, qui m'ont beaucoup touchées, et qui feront de ce jour un souvenir inoubliable.

Les travaux que j'ai réalisés depuis ma thèse sont le fruit de collaborations riches et fortes, qui je l'espère seront amenées à perdurer. J'ai eu l'occasion et l'honneur de travailler avec des personnes formidables, qui ont participé à rendre mon travail de recherche stimulant et agréable. J'espère n'oublier personne, et m'excuse d'avance en cas d'oubli... Merci donc tout d'abord à Gérard qui m'a initié à la recherche de la plus belle manière, avec passion et rigueur. Merci à Emmanuel pour le chemin que nous avons parcouru ensemble et qui m'a amené où je suis aujourd'hui. Merci à Denis pour m'avoir fait découvrir les sciences du vivant et les possibilités d'application de la théorie de la commande en dehors de la physique. Merci ensuite à mes collaborateurs avec qui j'apprends tous les jours : Tanguy et Simon de Eco&sols qui m'ont fait découvrir l'écologie; les experts de la fermentation alcoolique, Jean-Roch, Marc, Christian et Jean-Marie de SPO et enfin Brigitte du LEESU qui me fait aller de lacs en lacs au travers des modèles.

Mes prochains remerciements vont à mes doctorant.e.s, Anne, Francesco et Joseph, que j'ai eu l'honneur et le plaisir d'accompagner pendant leur thèse. Enfin je tenais à remercier mes collègues et amis de MISTEA, et en particulier : Bertrand, Isabelle (ma co-bureau), Nicolas, Meïli, Bénédicte, Hazaël, Danaï, Nadine, Sébastien, Patrice, Anne, Pascal, l'autre Isabelle, Arnaud, Malika, Brigitte, Philippe, Clément... et les petits nouveaux Catherine, David et Agustin! Je n'oublie évidemment pas toutes les personnes de passage, les CDD, les stagiaires, les doctorant.e.s et postdoctorant.e.s. qui amènent de la jeunesse, de l'émulation et une énergie nécessaire pour la recherche!

Le parcours que j'ai effectué je le dois également à ma famille : mes parents, mon frère Sylvain et ma sœur Laurence qui sont pour moi un repère de stabilité.

Mes derniers remerciements vont à Sylvain qui me soutient depuis toujours, écoute mes doutes, mes colères et déceptions, partage également mes joies et réussites, et me conseille et m'encourage au quotidien.

Enfin merci à Raphaël, mon fils, mon petit rayon de soleil quotidien qui m'oblige à décrocher de mon travail!

Introduction

Si l'on m'avait dit, il y a 10 ans, à la fin de mon post-doctorat, que mon habilitation à diriger des recherches porterait sur l'étude des "systèmes dynamiques biologiques", je ne l'aurais pas cru. Pourtant, si je retrace mon parcours, ce titre prend tout son sens. A cheval entre les mathématiques appliquées, l'automatique, l'écologie et les sciences environnementales, mes recherches contribuent toutes, à leur manière, à l'étude, via les modèles, de système biologiques et plus spécifiquement d'écosystèmes. Mais revenons en arrière pour voir ce qui m'a amené jusque là...

Après avoir obtenu une licence et une maîtrise en mathématiques appliquées de l'Université Paul Sabatier à Toulouse, j'ai intégré l'école d'ingénieurs Supaero qui m'a plongé dans le domaine de l'aéronautique. Je m'y suis spécialisée en Automatique, et ai obtenu, en parallèle de ma dernière année d'école d'ingénieurs, un master de recherche en Systèmes Automatiques. Suite à ce master, j'ai fait une thèse, sous la direction de Gérard Montseny (LAAS-CNRS, Toulouse). Cette thèse, qui s'intitule "Représentation diffusive et inversion opératorielle pour l'analyse et la résolution de problèmes dynamiques non locaux" porte sur des modèles de type intégrro-différentiels, dans lesquels apparaissent des opérateurs dynamiques intégraux, souvent de convolution. Bien que ces modèles soient utilisés dans de nombreux domaines, et notamment dans les sciences du vivant, mes domaines d'application de l'époque étaient tous issus de la physique.

C'est au cours de mon post-doctorat à l'Université Catholique de Louvain-la-neuve, en Belgique, que j'ai découvert le domaine de la commande des procédés en compagnie de Denis Dochain. J'ai alors fait mes premiers pas en dehors du monde de la physique, pour aborder celui de la chimie, et plus particulièrement la chimie des aliments, et vers l'applicatif. Mes travaux de post-doctorat portaient en effet sur la commande d'un procédé de cristallisation de crème glacée, dont on voulait contrôler la viscosité à la fin de la chaîne de production. Entre les avions et la crème glacée, j'avais déjà fait un grand pas...

Mais c'est réellement à mon arrivée à l'INRA (à l'époque le "E" n'était pas encore présent) en septembre 2011, que j'ai fait le grand saut dans le domaine du vivant. Je me suis d'abord raccrochée à ce que je connaissais, l'automatique et la commande des procédés et suis timidement passée du contrôle d'un procédé de cristallisation de crème glacée à celui d'un fermenteur multi-étagé pour la fermentation alcoolique du vin. Mais le saut était bel est bien réel : ces organismes que sont les levures et qui sont à l'origine de la conversion du sucre en éthanol sont tellement fascinants que je me suis laissée entraînée avec plaisir dans ce nouveau monde.

Lorsque je suis arrivée à l'INRA, j'ai intégré l'UMR MISTEA (Mathématiques Informatique et STatistiques pour l'Environnement et l'Agronomie) et plus particulièrement l'équipe projet

INRA/INRIA MODEMIC (Modélisation et Optimisation des Dynamiques des Écosystèmes Microbiens) qui s'intéressait à la modélisation, l'étude, la simulation et le contrôle d'écosystèmes microbiens. J'ai donc à ce moment là naturellement orienté mes travaux de recherche vers l'étude des écosystèmes microbiens. Après mon départ de l'équipe MODEMIC en octobre 2014, j'ai choisi de garder les écosystèmes au cœur de mes travaux de recherche mais d'élargir mon champs d'application à d'autres écosystèmes (agro-écosystèmes notamment), qu'ils soient microbiens ou non. Et puis, les opportunités et les rencontres diverses m'ont amenée à travailler sur les écosystèmes lacustres et la prolifération des cyanobactéries.

Désormais je travaille donc sur la "Modélisation, l'identification et la commande de systèmes dynamiques biologiques" et plus spécifiquement sur les modèles d'écosystèmes.

L'écriture de ce manuscrit m'a amenée à faire un bilan de mon activité de recherche, que j'ai décidé de présenter selon la structure suivante :

- **Chapitre 1** : partie consacrée à la modélisation des écosystèmes, qui est un socle commun à tous mes travaux et sur lequel il était important que je revienne pour bien préciser les objets que j'étudie et les approches que j'utilise.
- **Chapitre 2** : présentation des trois domaines d'application principaux de mes travaux de recherche : l'optimisation des systèmes agro-sylvo-pastoraux, la modélisation des blooms cyanobactériens dans les lacs et la commande de la fermentation alcoolique.
- **Chapitre 3** : mes travaux d'analyse et d'optimisation de systèmes dynamiques qui ont tous pour but de mieux comprendre le système en question, sa dynamique, et d'obtenir des comportements qualitatifs qui sont cohérents avec les observations et les connaissances expertes. Ces travaux relèvent du domaine des systèmes dynamiques, avec application à l'écologie théorique.
- **Chapitre 4** : mes travaux de modélisation et de simulation de modèles plus complexes, qui relèvent du domaine des sciences de l'ingénieur avec application principalement aux sciences agro-environnementales. l'objectif est alors de proposer un modèle plus réaliste, et de le simuler en vue d'obtenir des simulations plus proches de la réalité.
- **Chapitre 5** : mes travaux de calibration et d'identification de modèles, qui relèvent là encore du domaine des sciences de l'ingénieur. Il s'agit ici de confronter les simulations aux données réelles et d'identifier les paramètres ou certains termes du modèle.
- **Chapitre 6** : mes travaux en commande, qui relèvent du domaine de l'automatique, ou de la théorie de la commande avec application aux bioprocédés, notamment pour la fermentation alcoolique.

Modélisation des écosystèmes

“L’étape ultime consiste à construire un modèle mathématique et/ou informatique qui a pour but de reproduire la dynamique observée et de l’expliquer. Les systèmes dynamiques constituent l’outil privilégié pour cette étape de modélisation mathématique et informatique.”

Pierre Auger (Auger 2000)

Cette partie de mon mémoire est inspirée de différents livres et cours que j’apprécie et que je tiens donc à citer dès maintenant. Il s’agit :

- du support de cours de George Bastin sur la “Modélisation et analyse des systèmes dynamiques” (Bastin 2013) avec qui j’ai eu la chance d’enseigner lors de mon post-doctorat.
- du livre de Jorgensen et Fath “Fundamentals of ecological modelling” (Jorgensen et al. 2001)
- du livre de cours de Serge Frontier et al intitulé “Ecosystèmes : structure, fonctionnement, évolution” (Frontier et al. 2004)
- du livre de cours de Pierre Auger et al intitulé “Modélisation mathématique en écologie” (Auger, Lett et al. 2015)
- du livre dirigé par Denis Dochain et intitulé “Automatique des bioprocédés” (Dochain 2001)

Sommaire

1.1	Les écosystèmes	11
1.1.1	Le concept d’écosystème	11
1.1.2	L’action de l’homme sur les écosystèmes	12
1.2	La modélisation	12
1.2.1	Le processus de modélisation	12
1.2.2	Le schéma conceptuel, un outil de dialogue important	13
1.2.3	La modélisation par bilan de matière	15
1.3	Modèle complexe versus modèle minimaliste	17
1.4	Modèles de Volterra	17

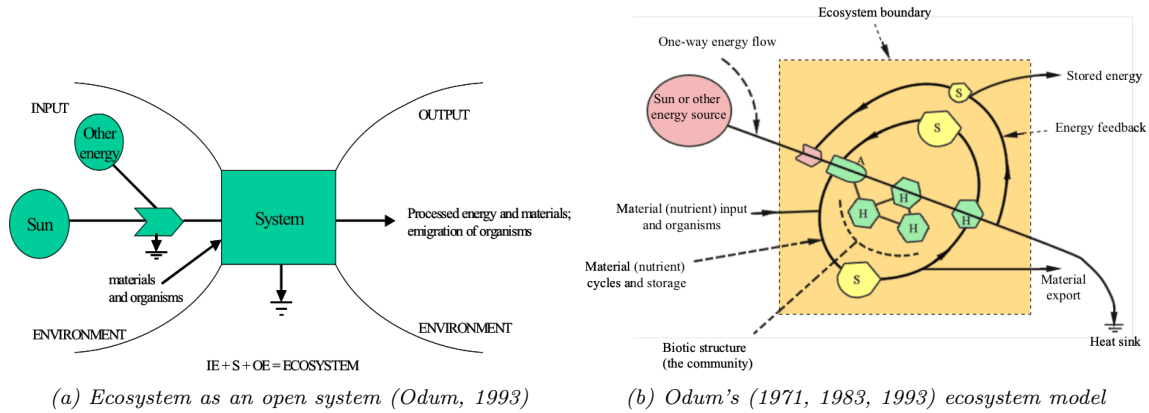


FIGURE 1.1 – ODUM ecosystem model

1.1 Les écosystèmes

1.1.1 Le concept d'écosystème

Alors que l'écologie est étymologiquement définie comme l'"étude de l'habitat" (du grec *οικος* (oikos) : l'habitat, et *λογος* (logos) : la science, l'étude), le terme "écosystème" est formé de deux parties : du préfixe "eco", qui signifie l'habitat comme dans le terme "écologie", et du mot "système" qui vient du grec *συστημα* (systēma) et qui signifie "assemblage, composition".

Le terme "écosystème" a été proposé au début des années 1930 par Arthur Roy Clapham à qui Arthur George Tansley avait demandé de trouver un mot approprié pour décrire l'ensemble des composantes physiques et biologiques d'un environnement, qui forment une unité lorsqu'on les considère les unes par rapport aux autres (Willis 1994).

Ce terme sera ensuite employé pour la première fois à l'écrit par A. G. Tansley en 1935 dans un papier publié dans le journal "Ecology" et intitulé "The use and abuse of vegetational concepts and terms" (Tansley 1935). Il définit dans cet article l'écosystème comme "*the whole system (in the sense of physics), including not only the organism-complex, but also the whole complex of physical factors forming what we call the environment of the biome-the habitat factors in the widest sense.*"

Avec cette définition, Tansley donne de l'importance aux facteurs abiotiques et aux interactions entre les organismes et l'environnement au sein d'un écosystème. Dans (Tansley 1935), il dit en effet "*Our natural human prejudices force us to consider the organisms (in the sense of the biologist) as the most important parts of these systems, but certainly the inorganic "factors" are also parts-there could be no systems without them, and there is constant interchange of the most various kinds within each system, not only between the organisms but between the organic and the inorganic.*"

Eugene Odum donne ensuite un rôle central à ce concept d'"écosystème" dans son livre "Fundamentals of ecology" (Odum et al. 1971), ce qui a contribué à sa popularisation (voir figure 1.1).

Un écosystème est maintenant généralement défini comme un ensemble d'organismes vivants interagissant entre eux et avec l'environnement dans lequel ils vivent (voir schéma de la figure 1.2). Néanmoins, comme souvent en écologie, ce concept n'est pas figé et suivant les approches, les communautés, un écosystème peut être vu de différentes manières. Certains pourront le voir comme un réseau d'interactions, d'autres comme un ensemble d'individus. Personnellement, je conçois l'écosystème comme un ensemble de processus interagissant plutôt qu'un ensemble d'organismes.

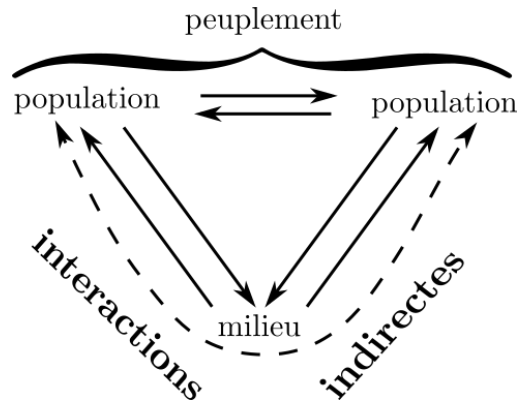


FIGURE 1.2 – Schéma symbolique d'un écosystème. Flèches en trait plein : interactions directes. Flèches en trait discontinu : interactions indirectes. (Frontier et al. 2004)

1.1.2 L'action de l'homme sur les écosystèmes

Les écosystèmes sont fortement impactés par l'action humaine. En fonction de l'objectif de l'étude, il peut parfois être intéressant et/ou nécessaire d'inclure les hommes dans l'écosystème plutôt que de ne considérer que leur impact. Dans mes travaux, je n'ai pour l'instant pas ressenti ce besoin, car je m'intéresse davantage à l'impact de l'homme sur un écosystème que aux interactions entre les hommes et les autres organismes de l'écosystème.

J'ai par contre travaillé sur des écosystèmes étant soumis à des niveaux d'action humaine différents, ce qui de mon point de vue d'automaticienne a son importance. Ces actions représentent en effet pour moi les commandes, les leviers que l'on peut actionner pour contrôler l'écosystème. Les écosystèmes que j'étudie peuvent être regroupés en trois groupes : les écosystèmes contrôlés, les écosystèmes exploités, et les écosystèmes naturels.

Les écosystèmes contrôlés sont ceux qui se prêtent le mieux à l'application de la théorie de la commande. L'exemple typique pour moi est celui de micro-organismes se développant dans des bioréacteurs soumis à des valeurs de température ou des niveaux de lumière pré-établis par exemple.

Les écosystèmes exploités sont ceux que l'homme cherche à exploiter et sur lesquels l'action humaine a un impact fort mais dont l'environnement, et notamment les conditions climatiques (de température, lumière, etc) ne sont pas contrôlés. C'est le cas des agro-écosystèmes notamment.

Enfin les écosystèmes naturels sont ceux que l'homme ne cherche pas du tout à contrôler, mais qui sont néanmoins affectés de manière indirecte par l'activité humaine. C'est le cas des lacs par exemple.

1.2 La modélisation

J'étudie les écosystèmes au travers de la modélisation. Dans cette section je donne les bases des modèles que je considère, qui sont une classe de modèles parmi d'autres, avec ses avantages et ses inconvénients. Ce sont des modèles dynamiques mécanistes qui me semblent bien adaptés au cas des écosystèmes.

1.2.1 Le processus de modélisation

Lorsqu'on s'intéresse à la modélisation d'un phénomène ou d'un système il faut toujours bien se rappeler qu'un modèle est une représentation simplifiée de la réalité qui va être utilisée comme outil

pour répondre à certaines problématiques spécifiques. Le choix du modèle, de sa structure et donc de la manière de le construire va dépendre de plusieurs choses :

- du type de système à représenter : certains types de modèles seront plus adaptés à certains systèmes que d'autres
- des connaissances et des données disponibles
- de l'objectif du modèle.



Quelques définitions d'un modèle...

- **Drouin (1988)** : “Le modèle est “quelque chose” (objet concret, représentation imagée, système d'équations...) qui **se substitue au réel** trop complexe, ou inaccessible à l'expérience, et **qui permet de comprendre ce réel** par un intermédiaire plus connu ou plus accessible à la connaissance.”
- **Legay (1996)** : “Un modèle est ce à quoi on se rapporte **pour représenter quelque chose**”.
- **Soler (2013)** : “un **cadre représentatif**, idéalisé et ouvert, reconnu **approximatif** et schématique, mais jugé fécond par rapport à un but donné”, fécond c'est à dire que “les résultats de mesure [sur le réel] s'avèrent suffisamment conformes aux prédictions du modèle”.
- **Minsky (1965)** : “Pour un observateur, un objet *M* est un modèle d'un objet *O* dans la mesure où l'observateur peut utiliser *M* **pour répondre à des questions qui l'intéressent au sujet de *O***”

Dans le cadre de mes travaux, les objectifs de la modélisation peuvent être diverses. Il s'agit parfois d'améliorer la compréhension du système, auquel cas un comportement qualitatif est suffisant. Dans d'autres cas, on cherche à prédire le comportement et/ou à utiliser le modèle comme une réalité virtuelle à partir de laquelle on pourra tester des stratégies de contrôle. Dans ce dernier cas, le modèle doit être suffisamment précis pour que la commande qui sera construite à partir du modèle soit fiable.

Contrairement aux sciences physiques, les sciences du vivant ne sont pas régies par de grandes lois sur lesquelles on peut s'appuyer pour la construction des modèles qui est donc un véritable enjeu en soi. La construction d'un modèle écologique est une démarche complexe qui comprend plusieurs étapes importantes. Dans leur livre “Fundamentals of ecological modelling” (Jorgensen et al. 2001), Jorgensen et Fath font une proposition de procédure de modélisation générique destinée à être appliquée à tout problème de modélisation en sciences environnementales. Cette démarche est synthétisée dans un schéma présenté en figure 1.3.

Cette procédure, qui peut évidemment être critiquée, correspond bien à ce que je considère être une bonne démarche de modélisation. Elle a le double avantage, de mon point de vue, de :

1. reprendre les étapes essentielles de la modélisation, dont notamment le schéma conceptuel, la mise en équations, l'analyse de sensibilité, la calibration et la validation,
2. de représenter la modélisation comme une démarche itérative, le modèle s'améliorant au fil des itérations.

Dans les paragraphes suivants, je reviendrai sur deux étapes clé que sont le schéma conceptuel, et la mise en équations.

1.2.2 Le schéma conceptuel, un outil de dialogue important

Dès mon arrivée à l'INRAE, le schéma conceptuel m'est apparu comme essentiel dans la conception d'un modèle dynamique biologique. Ce schéma constitué de boîtes et de flèches (voir un exemple

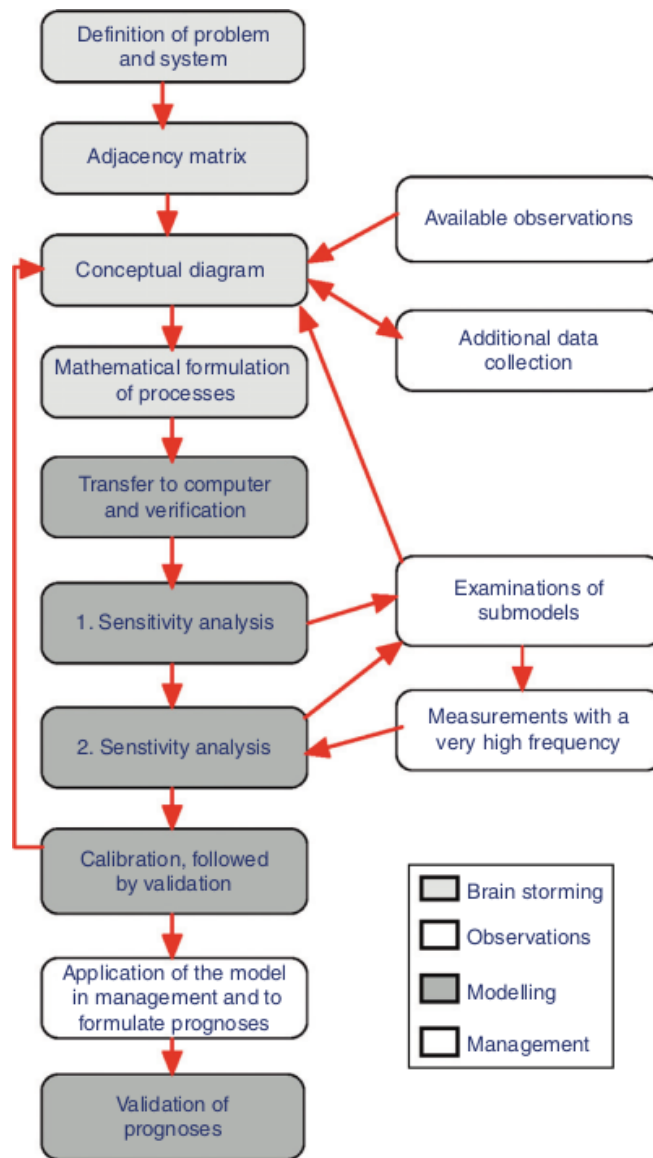


FIGURE 2.2 A tentative modelling procedure is shown. Ideally, as mentioned in the text, one should determine the data collection based on the model, not the other way around. Both possibilities are shown because models in practice have often been developed from available data, supplemented by additional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

FIGURE 1.3 – Procédure de modélisation générique proposée par Jorgensen et Fath dans leur livre “Fundamentals of ecological modelling” (Jorgensen et al. 2001).

en figure 1.4) permet de visualiser facilement et de manière synthétique les différents compartiments de l'écosystème (qui sont représentés par les boîtes) et les flux de matières entre les différents compartiments (qui sont représentés par les flèches). C'est donc une représentation tout à fait adaptée à la modélisation par bilan de matière présentée dans le paragraphe suivant (voir 1.2.3). Dans la littérature, on parle aussi de modèles “stocks-flux” ou de modèles “en boîtes”, qui fait référence au schéma conceptuel (comme je l'ai compris assez tardivement).

Au delà de l'aspect visuel de cette représentation, le schéma conceptuel est pour moi un outil de dialogue très important entre les chercheurs de communautés diverses. Même si le schéma conceptuel ne définit pas de manière précise un modèle, l'expression mathématique de chacun des flux étant essentiel, il permet de se mettre d'accord sur les différents éléments et processus pris en compte dans le modèle. Cette phase de la démarche de modélisation peut ainsi être faite en collaboration

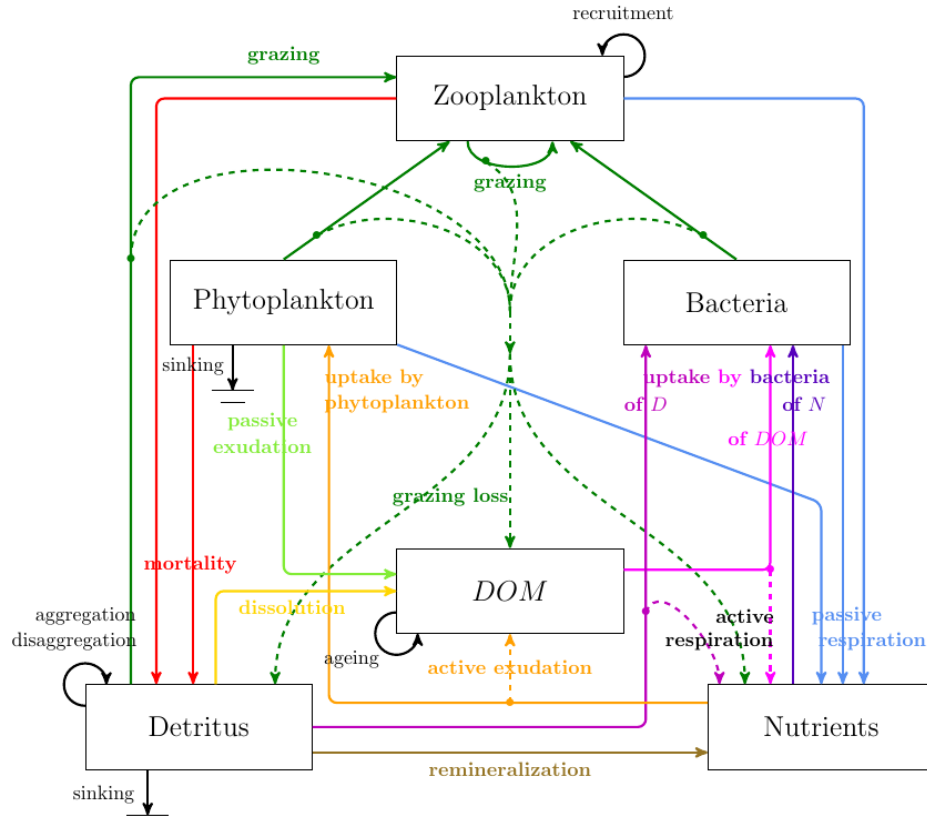


FIGURE 1.4 – Exemple de schéma conceptuel d'un modèle d'écosystème lacustre.

avec des chercheurs non mathématiciens pour lesquels les équations mathématiques du modèle seraient incompréhensibles. C'est en ce sens un outil primordial pour moi, que j'utilise quasiment systématiquement, au moins dans le cas de modèles de taille restreinte.

1.2.3 La modélisation par bilan de matière

Pour modéliser un écosystème, il faut modéliser toutes ses composantes, quelles soient biotiques ou abiotiques, ainsi que les interactions entre ses composantes et l'environnement. Toujours d'après Jorgensen et Fath (Jorgensen et al. 2001), un modèle d'écosystème comprend 5 éléments :

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

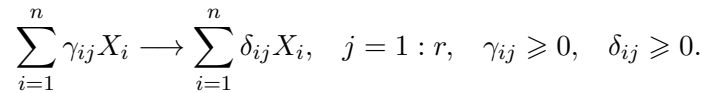
Plusieurs approches et types de modèles peuvent être utilisés. Dans mes travaux, j'utilise essentiellement des modèles déterministes mécanistes, constitués d'un ensemble d'équations différentielles ordinaires non linéaires. De tels systèmes dynamiques sont bien adaptés à la modélisation de l'évolution au cours du temps d'une concentration.

Pour les construire on procède par bilan de matière. La dérivée par rapport au temps de la quantité de matière d'une variable X est alors égale à la différence entre le flux de matière entrant et le flux de matière sortant :

$$\underbrace{\frac{dX}{dt}}_{\substack{\text{variation de } X \\ \text{par unité de temps}}} = \underbrace{F_{entrant}}_{\substack{\text{flux de matière} \\ \text{entrant}}} - \underbrace{F_{sortant}}_{\substack{\text{flux de matière} \\ \text{sortant}}} \quad (1.1)$$

Pour obtenir les expressions des flux $F_{entrant}$ et $F_{sortant}$, on peut représenter les différents processus de l'écosystème comme un ensemble de réactions en s'inspirant du formalisme de la Chimie comme le fait G. Bastin dans son cours (Bastin 2013).

En Chimie, le **schéma réactionnel d'une réaction** est l'ensemble des réactions élémentaires qui composent une réaction. Considérons un schéma réactionnel composé de r **réactions élémentaires** avec n **espèces** X_i que l'on peut représenter avec le formalisme de la Chimie suivant :



où γ_{ij} et δ_{ij} sont les **coefficients stœchiométriques**, et r_j , $j = 1 : r$ sont les **cinétiques (ou vitesses) des réactions**. Les espèces telles que $\gamma_{ij} > \delta_{ij}$ sont les **réactifs** de la $j^{\text{ème}}$ réaction. Celles avec $\gamma_{ij} < \delta_{ij}$ sont les **produits** et celles telles que $\gamma_{ij} = \delta_{ij}$ sont des **catalyseurs** de la $j^{\text{ème}}$ réaction. Les catalyseurs sont des espèces dont la présence est nécessaire pour que la réaction ait lieu mais qui n'augmente pas en quantité. Lorsque $\gamma_{ij} \neq 0$ et $\gamma_{ij} < \delta_{ij}$ on parle d'**autocatalyseur** : l'espèce est à la fois catalyseur et produit. Sa présence est nécessaire pour que la réaction ait lieu, et en plus sa concentration augmente. Il est important de définir ce dernier type d'espèce comme nous le verrons dans la suite.

On peut alors déduire de ce schéma réactionnel une équation différentielle ordinaire qui régit l'évolution de la quantité de la $i^{\text{ème}}$ espèce X_i dans un domaine de **volume** V supposé homogène. Cette équation est donnée par :

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

où $x_i(t)$ est la **concentration de l'espèce** X_i au temps t dans le domaine (on notera $x = (x_1, \dots, x_n)^T$), $x_i^0(t)$ est la **concentration en entrée** (i.e. dans le milieu d'alimentation) de X_i au temps t , et Q_{in} et Q_{out} sont les **débits entrant et sortant**.

En rajoutant l'équation de la dynamique du volume V du domaine et en écrivant les autres équations matriciellement, le modèle s'écrit :

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = Cr(x) + \frac{Q_{in}}{V} (x^0 - x) \\ \frac{dV}{dt} = Q_{in} - Q_{out} \end{cases}$$

où :

- C est la **matrice stœchiométrique** : $C = [\delta_{ij} - \gamma_{ij}]_{i,j}$

- $(x, V)^T = (x_1, \dots, x_n, V)^T$ est le vecteur des **variables d'état**
- $r(x) = (r_1(x), \dots, r_n(x))^T$ est le vecteur des **vitesse de réaction**
- $(x^0)^T = (x_1^0, \dots, x_n^0)^T$ est le vecteur des **concentrations en entrée**.

L'avantage de cette démarche est qu'elle peut être aussi utilisée pour représenter des processus biologiques, et notamment les dynamiques de population qui sont essentielles dans les écosystèmes. La croissance d'une population d'organismes vivants X se nourrissant sur Y (qui peut être un nutriment ou un autre organisme vivant dans le cas de la prédation) peut en effet être représentée comme une réaction chimique :



où X est autocatalyseur et activateur de la réaction de croissance.

Cette démarche permet au final d'accéder à une structure de modèle qui respecte les principes de conservation de la matière notamment. Tout l'enjeu réside ensuite en la détermination des expressions des vitesses des réactions r_i qui peuvent être fortement non linéaires et peuvent varier beaucoup d'un processus à l'autre.

1.3 Modèle complexe versus modèle minimaliste

Le niveau de complexité à choisir pour un modèle est un sujet qui fait débat depuis longtemps. Certains louent la simplicité des "modèles théoriques" (Berryman 1991), aussi appelés "modèles dynamiques minimalistes" (Van Nes et al. 2005), modèles "stratégiques" (Levins 1966) ou "conceptuels" (Grimm 1994). D'autres ont pris la plume pour défendre les "modèles complexes" ou "modèles de simulation", ces "big ugly models" comme les appellent Logan (J. Logan 1994). Généralement, il est admis que les deux types de modèles ont leur avantages et leur inconvénients (Van Nes et al. 2005).

Le passage d'un type de modèles à l'autre est aussi souvent discuté. Certains préconisent de partir d'un modèle "théorique" et de le complexifier : c'est le cas par exemple de Liebholt (Liebholt 1994). Logan (J. A. Logan 1989) propose au contraire de partir d'un modèle complexe et d'appliquer des méthodes de simplification et/ou d'agrégation pour obtenir un modèle plus simple qui pourra être analysé analytiquement. Dans (Van Nes et al. 2005), les auteurs proposent une procédure en trois étapes (scruter, simplifier et synthétiser) pour mieux comprendre les résultats issus des modèles complexes et tirer profit des différentes approches (modèles théoriques et complexes).

D'après Levins (Levins 1966), il semble finalement qu'on soit obligés de faire un compromis entre généralité, réalisme et précision (voir figure 1.5). D'après lui, les modèles sacrifient toujours une propriété au profit des deux autres.

Dans mes travaux, j'ai travaillé parfois avec des modèles théoriques, parfois avec des modèles complexes ou des modèles de simulation. Le choix se fait généralement en fonction de l'objectif des travaux. Je suis convaincue que les petits modèles peuvent nourrir les plus complexes et qu'il est nécessaire de faire un travail d'analyse sur les petits modèles pour mieux comprendre les processus qui interagissent. La simplification de modèles, par agrégation notamment (Auger, La Parra et al. 2008), est un sujet que je n'ai pas abordé pour le moment mais qui me paraît essentiel pour mieux comprendre les écosystèmes.

1.4 Modèles de Volterra

Je ne pouvais pas finir ce chapitre sans mentionner les modèles de Volterra. J'ai commencé à travailler sur ces modèles pendant ma thèse durant laquelle je manipulais des opérateurs de convolution, que j'appelais à l'époque "opérateurs de Volterra" sans savoir d'où venait ce nom. Ce n'est

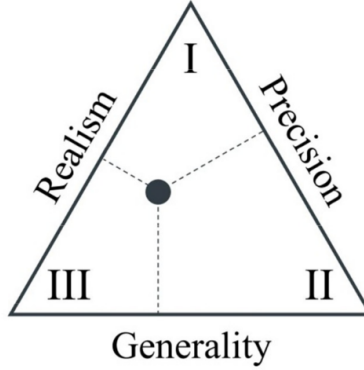


FIGURE 1.5 – Schéma représentatif des trois stratégies mentionnées par Levins (Levins 1966). Figure issue de (Bullock 2014)

qu’à mon arrivée à l’INRA que j’ai appris que Vito Volterra avait travaillé sur la dynamique de population, et que c’est lui qui avait introduit les opérateurs que je manipulais. Il cherchait avec ces opérateurs à rendre compte du fait que le taux de croissance d’une population de taille N à un instant t ne répond pas instantanément à un changement de la taille de la population mais est impacté par l’ensemble des valeurs prises par cette population aux temps précédents $s < t$. Pour rendre compte de cela, il a donc utilisé des termes intégraux de la forme suivante :

$$\int_{-\infty}^t k(t-s)N(s)ds \quad (1.3)$$

qui sont les opérateurs de Volterra que je manipulais durant ma thèse.

Dans son livre intitulé “Leçons sur la Théorie Mathématique de la Lutte par la Vie” (Volterra 1931), Volterra a ainsi par exemple introduit le modèle de proie-prédateur avec retard distribué :

$$\frac{dN_1}{dt} = N_1(t) [b_1 - a_{12}N_2(t)] \quad (1.4)$$

$$\frac{dN_2}{dt} = N_2(t) \left[-b_2 + a_{21} \int_{-\infty}^t N_1(s)k(t-s)ds \right] \quad (1.5)$$

que j’ai personnellement découvert dans le livre de Cushing (Cushing 2013).

Durant ma thèse, j’ai travaillé sur des modèles impliquant des opérateurs de Volterra et ai utilisé l’approche de “représentation diffusive” (Casenave et Gérard Montseny 2010 ; G. Montseny 2005) (voir paragraphe 4.2.2) pour reformuler le terme intégral de ces modèles au moyen d’une représentation d’état de dimension infinie. Je n’ai pour l’instant encore jamais appliqué cette approche sur les modèles d’écosystèmes mais il me semblerait intéressant de le faire dans le futur.

“L’objectif de la *recherche finalisée* est au contraire de répondre à des besoins précis, exprimés par la société dans des domaines où les bases conceptuelles disponibles sont encore insuffisantes. Il s’agit donc d’une forme de recherche hybride. Elle se propose à la fois de faire progresser la connaissance tout en restant ciblée sur des objectifs bien définis.”

Pierre Joliot (Joliot 2001)

C’est au travers de trois applications principales qui ont guidé mes recherches tout au long de ces dernières années que je vais illustrer mes différents travaux. Ces applications portent sur :

- l’optimisation des systèmes agro-sylvo-pastoraux, en collaboration avec l’UMR Eco&Sols ;
- la modélisation des blooms cyanobactériens dans les lacs, en collaboration avec le LEESU (ENPC), LEMON (INRIA), et le NIGLAS (Chine) en particulier ;
- le contrôle de la fermentation alcoolique du vin, en collaboration avec l’UMR SPO.

Sommaire

2.1 Optimisation des systèmes agro-sylvo-pastoraux	21
2.2 Modélisation des blooms cyanobactériens dans les lacs	22
2.3 Contrôle de la fermentation alcoolique	23

2.1 Optimisation des systèmes agro-sylvo-pastoraux



(a) Auréole de savane.

(b) Bétail.

FIGURE 2.1 – *Système agro-sylvo-pastoral en Haute Casamance, Sénégal. Photos prises par Anne Bisson lors de son séjour au Sénégal en avril 2017, dans le cadre de sa thèse.*

Les systèmes agricoles qui combinent culture et élevage sur un même territoire sont présents dans de nombreuses régions du monde et nourrissent aujourd’hui les deux tiers de la population mondiale (Herrero et al. 2010). Dans ces systèmes, qui sont qualifiés de “mixtes”, la fertilité du sol qui soutient la production végétale dépend de plusieurs facteurs : de la pratique de la jachère, de la présence de plantes fixatrices dans les pâturages, et du fumier produit par le bétail (Powell et al. 1996) qui est recyclé dans l’ensemble du système. Les systèmes agricoles mixtes présentent plusieurs avantages agronomiques, économiques et environnementaux (Bos et al. 1999 ; Lantinga et al. 1996 ; Schut et al. 2021). Ils améliorent la qualité des sols (Schut et al. 2021), facilitent la gestion des mauvaises herbes (MacLaren et al. 2019), et augmentent l’efficacité d’utilisation des nutriments (Lantinga et al. 1996) ce qui permet de réduire l’utilisation d’intrants externes (engrais chimiques, biocides, etc.). En outre, lorsqu’ils sont gérés de manière appropriée, les systèmes agricoles mixtes peuvent conduire à des rendements plus élevés (Bos et al. 1999), ce qui explique l’intérêt de la communauté scientifique pour ces systèmes.

Dans l’agriculture occidentale, cultures et élevage sont souvent au contraire séparés. Le bétail est nourri avec du fourrage qui a été produit sur des parcelles dédiées, sur lesquelles le bétail ne vient pas pâturer. Par conséquent, il n’y a pas de recyclage des nutriments dans les pâturages comme dans les systèmes agricoles mixtes et le bétail a perdu son rôle de vecteur de nutriments qui permettait de soutenir la fertilité du système agricole. Parallèlement, la gestion des effluents d’élevage, qui contribuent à la pollution des plans d’eau et des sols, constitue un grave problème écologique. Pourtant, s’ils étaient correctement répartis, ces derniers pourraient être utilisés pour fertiliser les cultures fourragères et alimentaires.

Reconnecter les élevages et les cultures (fourragères et vivrières) via l’utilisation du fumier produit par le bétail comme engrais est un défi pour les pays occidentaux. L’objectif est de recréer le cercle vertueux des systèmes traditionnels mixtes à l’échelle d’un territoire (Schut et al. 2021) et de combiner les “avantages économiques de la spécialisation au niveau de l’exploitation et les avantages environnementaux de l’intégration des systèmes de culture et d’élevage au niveau régional” (Bos et al. 1999). Dans la littérature, de tels systèmes sont appelés “systèmes intégrés de culture et d’élevage” (G. Lemaire et al. 2014) (ICLS en anglais pour “Integrated Crop Livestock System”);

dans Kumar et al. 2019, un ICLS est défini comme “an agricultural system that manages crop and livestock production on a single farm or among farms such that products are used to support each other”. Plusieurs articles proposent des stratégies optimales pour gérer de tels systèmes, en tenant compte de plusieurs contraintes telles que le coût des déplacements par exemple (Kamilaris et al. 2020 ; Paudel et al. 2009).

Dans un contexte marqué par une augmentation de la demande alimentaire et un besoin urgent de diminuer notre impact écologique, il est important de chercher à optimiser la production des cultures (vivrières en particulier) tout en préservant l’environnement. Dans le cas des systèmes agricoles mixtes traditionnels, l’enjeu est d’anticiper l’impact des modifications des pratiques agricoles et de l’organisation spatio-temporelle des exploitations qui doivent faire face à des pressions socio-économiques et démographiques de plus en plus importantes. Dans le cas des systèmes agricoles occidentaux, l’objectif est plutôt de s’inspirer des systèmes agricoles mixtes pour réduire l’impact environnemental des exploitations tout en maintenant une production importante.

2.2 Modélisation des blooms cyanobactériens dans les lacs



(a) Lac Tai (Taihu) en mai 2017 lors du kickoff meeting du projet franco chinois ANSWER.



(b) Lac Champs-sur-Marne, lac dont la qualité d’eau est suivie par le LEESU.

FIGURE 2.2 – *Blooms cyanobactériens dans deux lacs étudiés dans le cadre du projet ANSWER.*

L’eau est une ressource essentielle pour les êtres humains. Aujourd’hui, on estime que plus de la moitié des lacs et rivières d’eau douce du monde sont pollués (Nitti 2011). L’Organisation mondiale de la santé (OMS) a publié des “Directives de qualité pour l’eau de boisson” (WHO 2011), dont la première édition date de 1983, dans lesquelles les aspects chimiques et microbiens de la qualité de l’eau sont examinés en détail. Parmi les risques microbiens, les cyanobactéries toxiques (également appelées algues bleues) sont considérées comme “importantes pour la santé publique”.

La croissance de la population mondiale a conduit à l’intensification de l’industrialisation, de l’urbanisation et de l’exploitation des terres, ce qui a entraîné la production d’énormes quantités de polluants. Ces polluants sont déversés dans des écosystèmes tels que les rivières et les lacs, souvent sans traitement, ce qui entraîne une eutrophisation des plans d’eau douce. Une des conséquences de l’eutrophisation est la prolifération des cyanobactéries dont les épisodes de croissance rapide, les efflorescences algales (aussi appelés blooms), sont de plus en plus fréquents en France et dans le monde

entier. Les cyanobactéries sont des bactéries photosynthétiques qui jouent un rôle clé dans le cycle de vie ; cependant, leur prolifération peut également être néfaste pour les écosystèmes aquatiques. Lors des épisodes de blooms, les cyanobactéries s'agglomèrent et forment une épaisse écume verte, disgracieuse et nauséabonde, qui flotte à la surface de l'eau et qui peut avoir des conséquences économiques, écologiques et sanitaires importantes. Les blooms cyanobactériens ont en effet un impact sur la biodiversité aquatique en limitant l'accès à la lumière aux autres organismes photosynthétiques, en modifiant le réseau trophique (Granéli et al. 2006), ou en diminuant la concentration en oxygène, ce qui entraîne une hypoxie ou une anoxie et, par conséquent, la mort des poissons (Diaz et al. 1999). En raison de la production de composés odorants et/ou toxiques (cyanotoxines), les efflorescences cyanobactériennes affectent également l'utilisation des masses d'eau, en particulier pour la production d'eau potable et pour les activités de loisirs telles que la baignade (Diaz et al. 1999). Des études montrent également que l'arrosage des cultures par des eaux de surface présentant des efflorescences cyanobactériennes, ou l'élevage de poissons dans les plans d'eau touchés par les blooms cyanobactériens, peuvent amener à une bioaccumulation de cyanotoxine dans les aliments (production végétale ou animale) et donc présenter un risque pour les consommateurs.

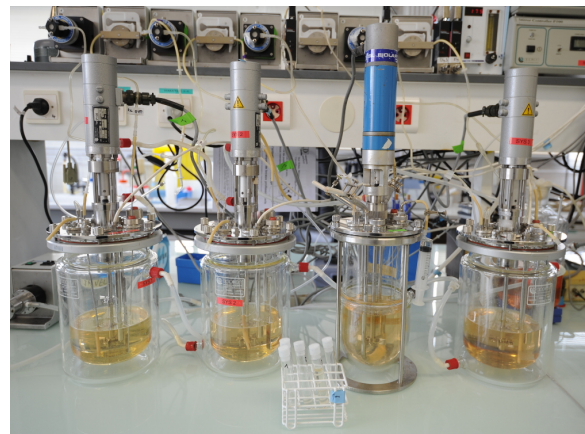
De nombreux grands lacs à travers le monde connaissent fréquemment des épisodes de blooms cyanobactériens comme c'est le cas du lac Victoria (Afrique), du lac Erie (USA-Canada), du lac Taihu (Chine) et dans une moindre mesure du lac de Zurich (Suisse) ou du lac du Bourget (France). Mais les grands lacs ne sont pas les seuls concernés par ce problème : des plans d'eau plus petits tels que des réservoirs, des rivières ou des estuaires souffrent également de blooms cyanobactériens dont la fréquence augmente au fil du temps (Taranu et al. 2015), du fait en partie de l'eutrophisation mais également du réchauffement climatique (Huisman et al. 2005 ; Paerl et al. 2008).

Afin d'anticiper, de contrôler et à plus long terme de supprimer les blooms cyanobactériens, il est important de comprendre la dynamique de population cyanobactérienne et de trouver les mécanismes clé à l'origine des blooms. Les modèles mathématiques des écosystèmes sont des outils pouvant être utilisés à ces fins. Mon objectif est ici de développer des modèles 3D couplant hydrodynamique et écologie permettant de simuler de manière réaliste la dynamique des cyanobactéries.

2.3 Contrôle de la fermentation alcoolique



(a) Suivi de fermentations en réacteurs batch.



(b) Fermenteur Continu Multi-Étagé

FIGURE 2.3 – Systèmes expérimentaux développés par l'UMR SPO (Montpellier) pour l'étude de la fermentation alcoolique.

La fermentation alcoolique est une étape cruciale de la vinification. Généralement réalisée en réacteur batch¹, elle consiste principalement en la bioconversion du sucre (issu du raisin) en éthanol et CO₂. Ce sont les levures qui effectuent cette conversion, dont elles tirent de l'énergie pour leur croissance. Elles jouent donc un rôle central ce qui explique l'importance de bien les étudier pour maîtriser la fermentation.

Lors de la bioconversion du sucre en éthanol, d'autres métabolites (glycérol, acides organiques, composés d'arômes, etc) sont également synthétisés dont certains contribuent au profil aromatique du vin. Parmi eux, on peut citer les esters - et les alcools supérieurs dans une moindre mesure - qui participent à l'arôme fruité des vins (Torrea et al. 2011). Les consommateurs étrangers étant de plus en plus attirés par ces arômes, il y a une volonté de la part des viticulteurs français de mettre en place des stratégies visant à augmenter la concentration en esters des vins pour maintenir leur part de marché à l'exportation. De manière plus générale, l'enjeu est de contrôler la synthèse des arômes en cours de fermentation pour obtenir un profil aromatique cible et ainsi produire des vins personnalisés, qui répondent aux différents goûts des consommateurs.

Jusqu'à présent, les pratiques industrielles sont essentiellement dictées par des considérations pratiques de gestion de la cave (Sablayrolles et al. 1996). L'objectif est généralement l'accélération des fermentations, c'est à dire l'accélération de la conversion du sucre résiduel qui est plus lente en fin de fermentation (lorsque le stress éthanolique est maximal pour les levures). Pour atteindre cet objectif, deux pratiques sont couramment utilisées : l'ajout d'azote au début ou en cours de fermentation, et la gestion anisotherme de la fermentation, qui consiste généralement à augmenter la température en fin de processus.

Or il a été montré que ces pratiques influent également sur la teneur finale en arômes du vin, et de manière différente en fonction de l'arôme. Par exemple, les concentrations finales d'alcools supérieurs et d'esters dépendent principalement de la quantité initiale d'azote (Garde-Cerdán et al. 2008 ; Mouret et al. 2014 ; Rollero et al. 2015 ; Torrea et al. 2011 ; Vilanova et al. 2012). Mais alors que les alcools supérieurs sont généralement produits à des températures élevées, les concentrations liquides finales d'esters sont plus faibles à haute température, principalement en raison de l'évaporation (Beltran et al. 2008 ; Molina et al. 2007 ; Mouret et al. 2014 ; Rollero et al. 2015).

En jouant sur la quantité d'azote ajoutée, sur le moment de l'ajout, et sur le profil de température anisotherme, on peut donc espérer pouvoir contrôler la synthèse d'arômes et atteindre une cible aromatique prédéfinie.

C'est dans ce contexte que s'inscrivent mes travaux de recherche sur le contrôle de la fermentation alcoolique pour lesquels des étapes de modélisation et de calibration de modèles sont indispensables.

1. Un réacteur batch est un réacteur fermé, aussi qualifié de "discontinu" dans lequel il n'y a ni entrée ni sortie, et dont le volume reste donc constant au cours du temps.

Modélisation et analyse de dynamiques de processus agro-bio-écologiques

“Like static models, minimal dynamic models are very simple. The difference with static models is that they describe changes through time and consist of a few differential or difference equations that focus on a single aspect of a system, based on clear assumptions (Van Nes et al. 2005). These kinds of models are also called ‘strategic’ (Levins 1966) or sometimes ‘conceptual’ (Grimm 1994).”

(Mooij et al. 2010)

Sommaire

3.1	Introduction	27
3.2	Transfert de nutriments par le bétail dans les agro-écosystèmes mixtes	27
3.2.1	Contexte : les agro-écosystèmes mixtes	27
3.2.2	Modélisation d’un système agricole mixte	28
3.2.3	Maximisation de la production par une gestion optimisée du bétail	28
3.3	Fixation de l’azote atmosphérique par les plantes dans les pâturages	30
3.3.1	Motivation : recherche d’alternatives aux engrais chimiques	30
3.3.2	Modélisation de la fixation d’azote dans les pâturages	30
3.3.3	Impact de la fixation de l’azote sur la production	30
3.4	Synthèse de phosphatase alcaline par les cyanobactéries	32
3.4.1	Contexte : les cyanobactéries et le phosphore	32
3.4.2	Modélisation de la synthèse de phosphatase alcaline par les cyanobactéries	32
3.4.3	Impact sur la dynamique cyanobactérienne	34
3.5	Dégradation du sucre en alcool par les levures lors de la fermentation alcoolique	35
3.5.1	Motivation : contrôle de la fermentation alcoolique	35
3.5.2	Modélisation de la cinétique principale d’une fermentation alcoolique avec ajout d’azote	36
3.5.3	Simulation d’une fermentation avec ajout d’azote	37

3.1 Introduction

Les travaux que j’ai regroupés dans ce chapitre portent sur la modélisation de processus spécifiques, qu’ils soient biologiques, écologiques ou agronomiques, dont on pense (grâce aux données expérimentales notamment) qu’ils jouent un rôle important dans un écosystème donné. Mon objectif est à chaque fois de représenter le processus au moyen d’une ou de plusieurs expressions mathématiques, qui ne sont pas nécessairement compliquées, et d’étudier l’impact de l’ajout de ce processus sur la dynamique de l’écosystème. Le système considéré est toujours représenté de manière minimale, au sens où je ne cherche à représenter dans le modèle que les éléments essentiels, en termes de variables et de processus (de stocks et de flux). On obtient ainsi des modèles dynamiques que l’on peut qualifier de “minimaux” et sur lesquels on peut espérer pouvoir faire une analyse mathématique (notamment des équilibres, de la stabilité), et/ou résoudre analytiquement des problèmes d’optimisation permettant de mettre au jour des configurations optimales pour le système.

Ce qui guide également mes recherches est la volonté d’amélioration des modèles au niveau des processus même. Trop souvent, la complexité des modèles d’écosystèmes vient du nombre de variables, de processus et de paramètres. Mais si l’on regarde au niveau du processus même, on retombe souvent sur les mêmes fonctions, comme si à partir de quelques briques de bases, on cherchait en les assemblant à représenter n’importe quel écosystème. Il est certain qu’en faisant cela, on gagne en complexité, ce qui peut permettre de représenter des dynamiques de systèmes eux même complexes. Néanmoins, je reste persuadée que cela ne peut suffire et que pour obtenir des modèles plus réalistes, donc plus proches de la réalité, on ne peut s’affranchir de la richesse amenée par les fonctions non linéaires. Pour s’en convaincre, il suffit d’ailleurs d’étudier la dynamique de croissance d’une population d’organismes se nourrissant sur un substrat donné dans un bioréacteur. En fonction de la forme considérée pour la fonction de croissance (fonction de Monod, ou bien de Haldane par exemple), le nombre de points d’équilibre est différent, tout comme la dynamique obtenue.

C’est donc dans cet objectif d’amélioration des modèles que j’aborde la question de la modélisation dans ce chapitre. Dans les trois applications principales de mes recherches qui ont été présentées précédemment, à savoir les agro-écosystèmes mixtes, les blooms cyanobactériens et la fermentation alcoolique, s’est à un moment donné posée la question de l’amélioration de la représentation d’un processus. Dans ce chapitre, je vais donc vous présenter les résultats de travaux qui concernent la représentation des processus suivants :

- le transfert de nutriments par le bétail dans les agro-écosystèmes mixtes,
- la fixation de l’azote atmosphérique par les plantes fixatrices dans les pâturages,
- la sécrétion de phosphatase alcaline par les cyanobactéries,
- la dégradation du sucre en alcool par les levures lors de la fermentation alcoolique.

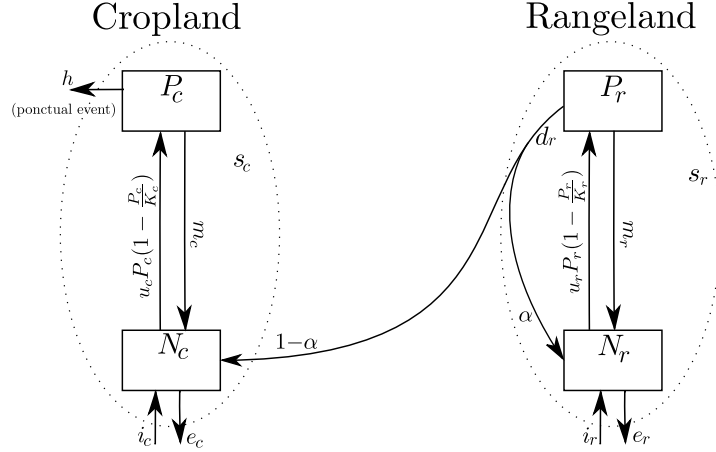
3.2 Transfert de nutriments par le bétail dans les agro-écosystèmes mixtes

3.2.1 Contexte : les agro-écosystèmes mixtes

Pour répondre à la demande alimentaire mondiale, l’optimisation de la production des cultures vivrières est essentielle. Dans les systèmes agricoles mixtes, (i.e. qui combinent culture et élevage sur un même territoire, voir paragraphe 2.1), le bétail joue un rôle important sur la production. Il transfère une partie des nutriments qu’il broute sur les pâturages, vers les terres cultivées où il dépose ses excréments et son urine. Il participe ainsi à la fertilisation des terres cultivées en jouant le rôle de vecteur de nutriments. Pour maximiser la production végétale dans les systèmes agricoles mixtes, il est donc essentiel d’optimiser la gestion du bétail (Rufino et al. 2006), et donc le dépôt de fumier, à la fois dans le temps et dans l’espace.

3.2.2 Modélisation d'un système agricole mixte

Pour répondre à cette question, nous avons considéré un modèle simplifié d'agro-écosystème mixte, composé d'une zone de pâturages et d'une zone de champs cultivés connectées l'une à l'autre via le transfert de nutriments par le bétail (le bétail n'étant pas représenté de manière explicite dans le modèle). Le modèle est donc constitué de deux sous-systèmes interconnectés comme montré sur la figure 3.1a. Chaque sous-système est caractérisé par deux variables : le stock d'azote dans le sol N , et le stock de plantes P , lui aussi exprimé en concentration d'azote équivalente.



(a) Schéma conceptuel issu de (Bisson, Casenave et al. 2019).

$$\begin{cases} \dot{P}_r &= u_r P_r N_r \left(1 - \frac{P_r}{K_r}\right) - m_r P_r - d_r P_r \\ \dot{N}_r &= -u_r P_r N_r \left(1 - \frac{P_r}{K_r}\right) - e_r N_r + i_r + m_r P_r + \alpha d_r P_r \\ \dot{P}_c &= u_c P_c N_c \left(1 - \frac{P_c}{K_c}\right) - m_c P_c \\ \dot{N}_c &= -u_c P_c N_c \left(1 - \frac{P_c}{K_c}\right) - e_c N_c + i_c + m_c P_c + \underbrace{(1 - \alpha) d_r P_r}_{T} \frac{s_r}{s_c} \end{cases}$$

(b) Modèle associé

FIGURE 3.1 – Modélisation d'un agro-écosystème mixte.

Le flux de nutriments prélevé par le bétail sur la zone de pâturages est simplement représenté dans le modèle par une quantité $d_r P_r$ proportionnelle à la concentration P_r de plantes dans les pâturages, et à la pression d'herbivorie représentée par le paramètre d_r . Comme le bétail se déplace sur l'ensemble de l'agro-écosystème, c'est à dire sur les deux sous-systèmes qui le composent, seule une fraction $1 - \alpha$ de ce flux est ensuite exportée sous forme de fèces et d'urine vers les cultures. Le reste (fraction α) est directement recyclé dans le compartiment d'azote du sol dans les pâturages. Finalement le flux de nutriments transférés par le bétail de la zone de pâturages vers la zone cultivée est donné par :

$$T = (1 - \alpha) d_r P_r \quad (3.1)$$

3.2.3 Maximisation de la production par une gestion optimisée du bétail

A partir de ce modèle, nous avons fait une analyse mathématique des points d'équilibre et de leur stabilité et nous avons déterminé les configurations optimales (en termes de ratio de surfaces allouées aux pâturages et aux cultures, de pression d'herbivorie d_r et de pourcentage α de fumier transféré depuis les pâturages vers les cultures) menant à un maximum de production.

Nous avons pu montrer que :

- pour maximiser la production végétale, il faut maximiser le flux T de nutriments exportés par le bétail des pâturages vers les terres cultivées ;
- pour maximiser le flux de nutriments exportés, il faut exporter tous les nutriments prélevés par le bétail, quelle que soit la valeur de la pression d’herbivorie (c’est à dire prendre $\alpha = 0$).

Nous avons ensuite appliqué des techniques simples de la théorie du contrôle afin de tenir compte de la variabilité dans le temps des pratiques agricoles. Nous avons ainsi montré qu’en faisant varier la pression d’herbivorie dans le temps de manière adéquate, un gain supplémentaire de production est possible (par rapport à une pression d’herbivorie constante) pour une même quantité de nutriments transférée annuellement des pâturages vers les cultures (voir figure 3.2).

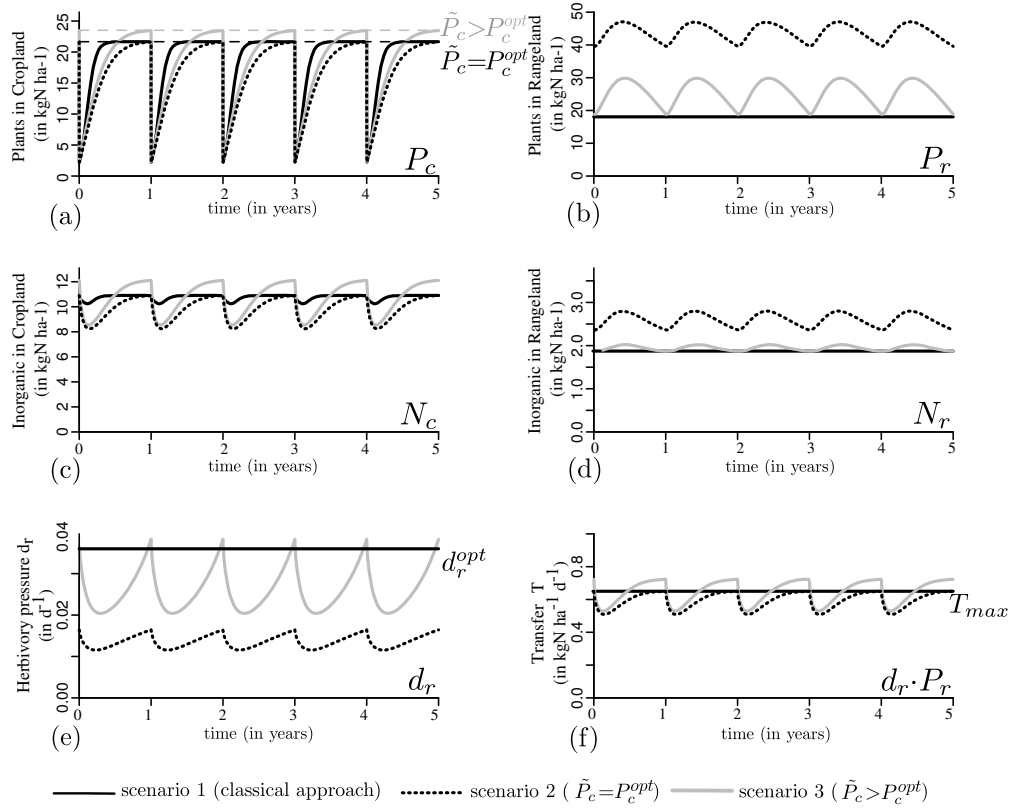


FIGURE 3.2 – Comparaison des dynamiques de l’agro-écosystème mixte soumis à une pression d’herbivorie constante (pointillés noir) ou variable (trait plein noir et gris). Le scénario 3 permet d’atteindre, au moment de la récolte, une quantité de plantes \tilde{P}_c plus grande que la valeur maximale P_c^{opt} obtenue avec une pression d’herbivorie constante dans l’année. Figure issue de (Bisson, Casenave et al. 2019).

Collaborations

Ces travaux ont été publiés dans Journal of Theoretical Biology (Bisson, Casenave et al. 2019) dans le cadre de la thèse de Anne Bisson, en collaboration avec Tanguy Daufresne, Simon Boudsocq et Dominique Masse de l’UMR Eco&Sols.

3.3 Fixation de l'azote atmosphérique par les plantes dans les pâturages

3.3.1 Motivation : recherche d'alternatives aux engrais chimiques

Augmenter la production des cultures vivrières dans les systèmes agricoles mixtes est un enjeu important. Cependant, cet objectif doit être couplé à la préservation des ressources et à la protection de l'environnement, ce qui implique de réduire l'utilisation des engrais chimiques, d'optimiser leur utilisation et de trouver des alternatives durables (Tilman et al. 2002).

Comme expliqué précédemment, le bon fonctionnement des systèmes agricoles mixtes dépend du transfert de nutriments par le bétail. Mais la présence de plantes fixatrices d'azote dans les pâturages est toute aussi importante. Ces plantes sont naturellement présentes dans les pâturages, surtout dans les sols pauvres en azote. Elles assurent l'essentiel des apports en azote (Powell et al. 1996) lorsque les autres sources (dépôts atmosphériques, altération des roches) sont faibles (Cleveland et al. 1999; Pieri 1992), et ne doivent donc pas être négligées. Il est au contraire intéressant de les exploiter au maximum puisqu'elles fournissent une source économique et écologique de nutriments pouvant se substituer aux engrais chimiques.

3.3.2 Modélisation de la fixation d'azote dans les pâturages

Dans le modèle considéré dans la première étude (voir paragraphe 3.2), les plantes considérées dans les pâturages ne sont pas capables de fixer l'azote atmosphérique. Nous avons donc construit un nouveau modèle en ajoutant le processus de fixation de l'azote atmosphérique par les plantes dans la zone de pâturage (voir schéma 3.3a). La fonction de fixation que nous avons choisie est une fonction décroissante discontinue caractérisée par deux paramètres : un seuil de fixation N_b défini comme une valeur de concentration en azote dans le sol en deçà de laquelle les plantes se mettent à fixer, et un taux de fixation f constant correspondant au niveau de fixation des plantes lorsqu'elles se mettent à fixer :

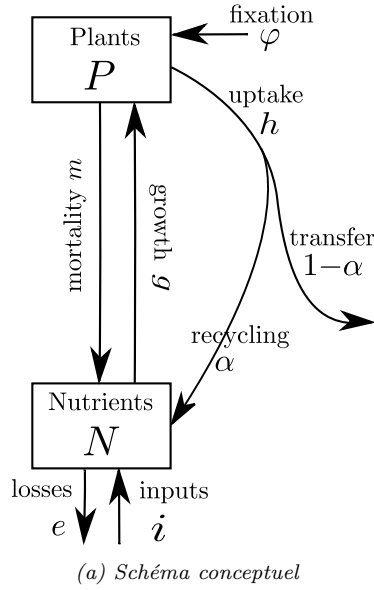
$$\varphi(N) = \begin{cases} f & \text{if } 0 \leq N < N_b \\ 0 & \text{if } N_b \leq N \end{cases} \quad (3.2)$$

Sur la base des résultats de l'étude menée dans le cas sans plantes fixatrices (voir paragraphe 3.2), nous avons cherché à évaluer comment la présence de plantes fixatrices dans les pâturages pouvait augmenter le flux de nutriments exportés par le bétail $T = (1 - \alpha)dP$ et donc la production végétale à l'échelle de l'agro-écosystème. L'objectif est, comme dans la première étude, de trouver la gestion optimale du bétail (en termes de pression d'herbivorie d et de pourcentage α de fumier transféré depuis les pâturages vers les cultures) qui maximise le flux de nutriments exportés par le bétail vers les terres cultivées.

3.3.3 Impact de la fixation de l'azote sur la production

Dans un premier temps, nous avons donc étudié l'impact des paramètres N_b et f de la fonction de fixation sur l'équilibre et la stabilité des points d'équilibre du système. Nous avons ainsi pu mettre en évidence que la présence de plantes fixatrices d'azote dans les pâturages augmente la valeur maximale de la production végétale pouvant être atteinte.

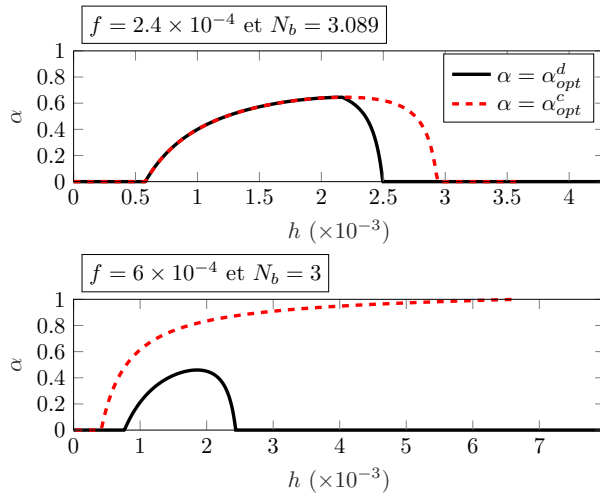
Nous avons ensuite montré que dans certains cas (e.g. lorsque la pression d'herbivorie est élevée et que la capacité des plantes à fixer l'azote est importante), il est nécessaire de recycler une partie du fumier produit par le bétail dans les pâturages ($\alpha \neq 0$) pour maximiser le flux de nutriments exportés vers les terres cultivées (voir figure 3.4a). Ce résultat était faux dans le cas sans fixation d'azote.



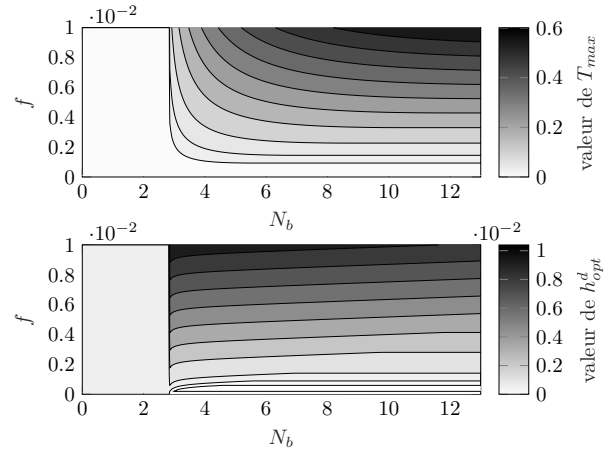
$$\begin{cases} \frac{dN}{dt} = -g(N, P)P - eN + i + mP + \alpha hP \\ \frac{dP}{dt} = g(N, P)P + \varphi(N)P - mP - hP \end{cases}$$

(b) Modèle associé

FIGURE 3.3 – Modélisation de la zone de pâturages d’un système agricole mixte avec présence de plantes fixatrices d’azote.



(a) Valeur optimale de α en fonction de la valeur de h pour une fonction de fixation constante (α_{opt}^c) ou discontinue (α_{opt}^d) pour différentes valeurs de f , et de f et N_b .



(b) Optimisation de α et h . Valeurs optimales h_{opt} de h et T_{max} de T pour une fonction de fixation discontinue en fonction des valeurs de f et N_b . La valeur optimale de α est toujours égale à 0 (résultat non montré sur la figure).

FIGURE 3.4 – Résultats de l’optimisation de la gestion du bétail en fonction des caractéristiques de fixation des plantes. Les valeurs des paramètres du modèle sont les suivantes : $r = 0.004$, $m = 0.01$, $e = 0.006$, $K = 80$, $i = 0.02$. Figures issues de (Casenave, Bisson et al. 2022).

En revanche, si l’on optimise à la fois la pression d’herbivorie et le pourcentage de recyclage du fumier (voir figure 3.4b), il est préférable de transférer tout le fumier produit et d’adapter la pression d’herbivorie en conséquence pour minimiser les pertes d’azote du sol.

Enfin, pour maximiser le flux de nutriments exportés, il est intéressant de noter qu’il est nécessaire d’amener le système à un état dans lequel les plantes fixent l’azote. De cette façon, le système peut bénéficier de la fixation de l’azote atmosphérique par les plantes qui fournit un apport supplémentaire important pour la croissance des cultures et qui constitue une alternative écologique aux engrais

chimiques.

Collaborations

Ces travaux font suite à la thèse de Anne Bisson lors de laquelle ils avaient été initiés et ont été faits en collaboration avec Tanguy Daufresne et Simon Boudsocq de l'UMR Eco&Sols. Un article a été publié dans *Journal of Theoretical Biology* (Casenave, Bisson et al. 2022).

3.4 Synthèse de phosphatase alcaline par les cyanobactéries

3.4.1 Contexte : les cyanobactéries et le phosphore

Les cyanobactéries, comme beaucoup d'organismes photosynthétiques, ont besoin pour croître de consommer des nutriments, principalement de l'azote et du phosphore. Elles ne peuvent néanmoins les consommer que sous une forme assimilable, la forme inorganique qui est obtenue par le processus de minéralisation de la forme organique du nutriment.

Les cyanobactéries ont développé plusieurs stratégies leur permettant de se développer dans des milieux pauvres en nutriments. Parmi ces stratégies, on peut citer la "consommation de luxe" (Sigeo 2005), qui fait référence à la capacité des cyanobactéries à consommer plus de phosphore que ce dont elles ont besoin lorsque le milieu est riche et de le stocker pour le consommer plus tard, en cas de pénurie. Mais les cyanobactéries sont également capables de sécréter une enzyme, appelée "phosphatase alcaline", qui est l'enzyme responsable de la minéralisation du phosphore organique. Cette enzyme est généralement sécrétée par les bactéries. Cependant, lorsque le milieu est pauvre en phosphore inorganique, les cyanobactéries en synthétisent aussi. Elles cherchent ainsi à augmenter la concentration en phosphore inorganique dont elles ont besoin pour croître.

Le phosphore a longtemps été considéré comme le nutriment limitant de la croissance des cyanobactéries, notamment parce que certaines cyanobactéries sont capables de fixer l'azote atmosphérique. Cependant la capacité des cyanobactéries à renforcer le processus de minéralisation lorsqu'elles ont besoin de phosphore inorganique tend plutôt vers l'hypothèse inverse, à savoir que, sous réserve d'un stock d'azote organique suffisant, les besoins en phosphore inorganique des cyanobactéries seront toujours comblés.

Cela soulève également la question de l'importance relative des apports externes (par les rivières, la déposition atmosphérique, la pluie) par rapport aux apports internes (via les sédiments) en phosphore. En effet, une part importante du phosphore inorganique étant stocké dans les sédiments, on peut se demander si la resuspension des sédiments (notamment dans les lacs peu profonds exposés au vent) couplée à la capacité des cyanobactéries à sécréter de la phosphatase alcaline ne sont pas suffisantes pour entretenir les blooms cyanobactériens. Dans ce cas une réduction des apports externes en phosphore ne serait malheureusement pas suffisante (en tous cas à court terme) pour faire disparaître les blooms.

3.4.2 Modélisation de la synthèse de phosphatase alcaline par les cyanobactéries

La capacité des cyanobactéries à synthétiser de la phosphatase alcaline n'est pas prise en compte dans les modèles de dynamique de population des cyanobactéries. Pour étudier ce phénomène et son impact sur la formation des blooms cyanobactériens, nous avons proposé un nouveau modèle de dynamique des cyanobactéries, dans lequel seul le cycle du phosphore est représenté. Ce modèle est composé de 3 variables qui sont : C_{cyano} pour les cyanobactéries, C_{ip} pour le phosphore inorganique, et C_{op} pour le phosphore organique. Ces variables sont liées entre elles par les processus suivants (voir schéma figure 3.5a) :

- croissance des cyanobactéries qui consomment du phosphore inorganique ;
- mortalité des cyanobactéries, une partie étant recyclée dans le compartiment du phosphore inorganique et l'autre partie dans le compartiment du phosphore organique ;
- synthèse de phosphatase alcaline par les cyanobactéries ;
- minéralisation du phosphore organique en phosphore inorganique.

A ces processus, nous avons ajouté des flux externes pour les entrées et les sorties de nutriments, tant pour le phosphore organique que pour le phosphore inorganique.

C'est la modélisation du terme de minéralisation qui est au cœur de ces travaux. Contrairement à ce qui est fait dans la littérature, ce flux est composé ici de deux termes : la minéralisation bactérienne, et la minéralisation cyanobactérienne.

$$M(C_{op}, C_{ip}, C_{cyano}) = \underbrace{M_{bact}(C_{op})}_{\text{minéralisation bactérienne}} + \underbrace{M_{cyano}(C_{op}, C_{ip}, C_{cyano})}_{\text{minéralisation cyanobactérienne}} \quad (3.3)$$

Minéralisation bactérienne :

Dans notre modèle, nous avons choisi de ne pas représenter les bactéries explicitement, ce qui est souvent le cas dans la littérature. Ainsi, la quantité d'enzyme produite par les bactéries E_0 est considérée constante. De plus, aucune inhibition par le phosphore inorganique n'a été ajoutée dans la minéralisation bactérienne, comme cela a été observé expérimentalement (Chróst et al. 1987). On obtient donc une équation classique de Michaelis-Menten de la forme :

$$M_{bact}(C_{op}) = \underbrace{m_{max}^b \left(\frac{C_{op}}{K_m^b + C_{op}} \right)}_{\text{activité enzymatique bactérienne}} E_0 \quad (3.4)$$

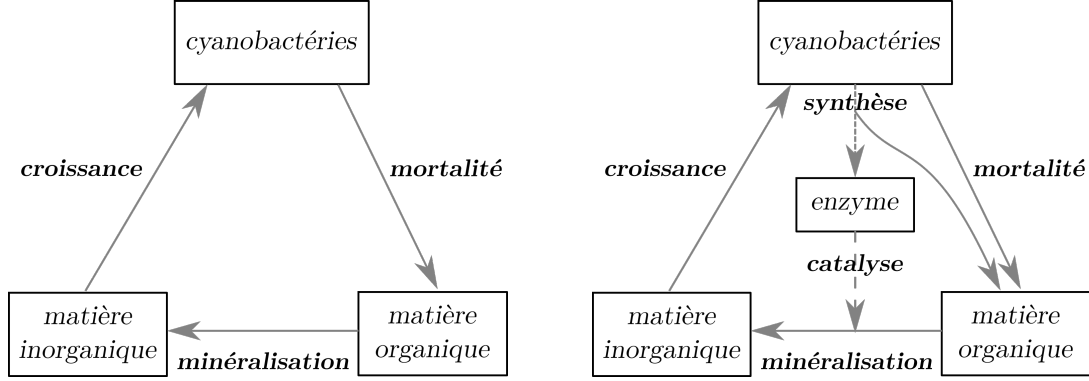
Minéralisation cyanobactérienne :

L'activité de l'enzyme synthétisée par les cyanobactéries étant quant à elle fortement inhibée par la présence de phosphore inorganique, cette inhibition est prise en compte dans le terme de minéralisation cyanobactérienne qui prend la forme d'une équation de Michaelis-Menten avec inhibition par le produit :

$$M_{cyano}(C_{op}, C_{ip}, C_{cyano}) = \underbrace{m_{max}^c \left(\frac{C_{op}}{K_m^c \left(1 + \frac{C_{ip}}{K_i} \right) + C_{op}} \right)}_{\text{activité enzymatique cyanobactérienne}} E \quad (3.5)$$

où E est la concentration d'enzyme sécrétée par les cyanobactéries. Cette quantité pouvant varier dans le temps, nous avons d'abord vérifié que l'expression de la cinétique enzymatique de Michaelis-Menten avec inhibition par le produit pouvait bien s'appliquer dans ce cas là, ce qui est bien le cas. La quantité d'enzyme sécrétée par les cyanobactéries dépend de la quantité de cyanobactéries et de phosphore inorganique dans le milieu. Nous savons que les cyanobactéries synthétisent des enzymes uniquement lorsqu'elles en ont besoin, c'est-à-dire lorsqu'il n'y a pas assez de phosphore inorganique dans l'environnement. Le taux de synthèse des enzymes doit donc être décroissant avec C_{ip} . L'existence d'une valeur seuil pour C_{ip} est même mentionnée dans la littérature (Qin 2008) : les cyanobactéries synthétisent de l'enzyme uniquement lorsque la valeur de C_{ip} est inférieure à ce seuil. Par contre, même si ce sont les cyanobactéries qui sécrètent l'enzyme, l'activité enzymatique cyanobactérienne n'est pas fonction de la biomasse (Chróst et al. 1987). Au final, nous avons donc choisi pour E l'expression mathématique suivante :

$$E = \frac{k_E}{1 + e^{s_c(C_{ip} - K_{IE})}} \frac{C_{cyano}}{K_{cyano} + C_{cyano}} \quad (3.6)$$



(a) Schéma conceptuel sans (gauche) et avec (droite) sécrétion de phosphatase alcaline par les cyanobactéries.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_{cyano}}{dt} = \underbrace{G(C_{ip})C_{cyano}}_{\text{croissance}} - \underbrace{m_c C_{cyano}}_{\text{mortalité}} \\ \frac{dC_{ip}}{dt} = \underbrace{a_{pc} m_c (1 - f_{op}) C_{cyano}}_{\text{mortalité des cyano}} + \underbrace{M(C_{op}, C_{ip}, C_{cyano})}_{\text{P minéralisation}} - \underbrace{a_{pc} G(C_{ip}) C_{cyano}}_{\text{croissance}} + \underbrace{I_{ip} - o_{ip} C_{ip}}_{\text{entrées/sorties}} \\ \frac{dC_{op}}{dt} = \varepsilon \left(\underbrace{a_{pc} m_c f_{op} C_{cyano}}_{\text{mortalité des cyano}} - \underbrace{M(C_{op}, C_{ip}, C_{cyano})}_{\text{P minéralisation}} + \underbrace{I_{op} - o_{op} C_{op}}_{\text{entrées/sorties}} \right) \end{array} \right.$$

(b) Modèle associé

FIGURE 3.5 – Modélisation de la dynamique des cyanobactéries dans les lacs.

3.4.3 Impact sur la dynamique cyanobactérienne

Avec ce modèle, notre objectif est d’analyser la dynamique des cyanobactéries et de comparer 2 cas :

- le cas où la minéralisation du phosphore organique en phosphore inorganique est uniquement due à l’activité bactérienne ;
- le cas où les cyanobactéries sont également capables de produire l’enzyme qui participe à la minéralisation du phosphore organique.

Nous souhaitons évaluer la contribution relative des apports externes et internes (apports en phosphore) à l’intensité et à la dynamique de formation des blooms cyanobactériens. Nous avons pour l’instant montré qu’à l’équilibre, la concentration en cyanobactéries dans le milieu lorsqu’elles synthétisent de la phosphatase alcaline est toujours plus important que dans le cas où seules les bactéries sont responsables de la minéralisation du phosphore organique. Ceci est vrai qu’il y ait ou non des apports externes en phosphore.

Nous souhaitons également comprendre ce qui amène à la chute de la concentration de cyanobactéries et déterminer si c’est uniquement la baisse de température ou le manque temporaire de nutriments (phosphore dans notre cas). Pour cela, un forçage externe par la température dans le terme de croissance des cyanobactéries a été rajouté. Des premières simulations ont été réalisées pour comparer les cas avec et sans synthèse de phosphatase alcaline. On constate (voir figure 3.6) que la synthèse de phosphatase alcaline permet de soutenir la prolifération des cyanobactéries sur une période importante comparé au cas où les cyanobactéries ne participent pas à la minéralisation du phosphore organique.

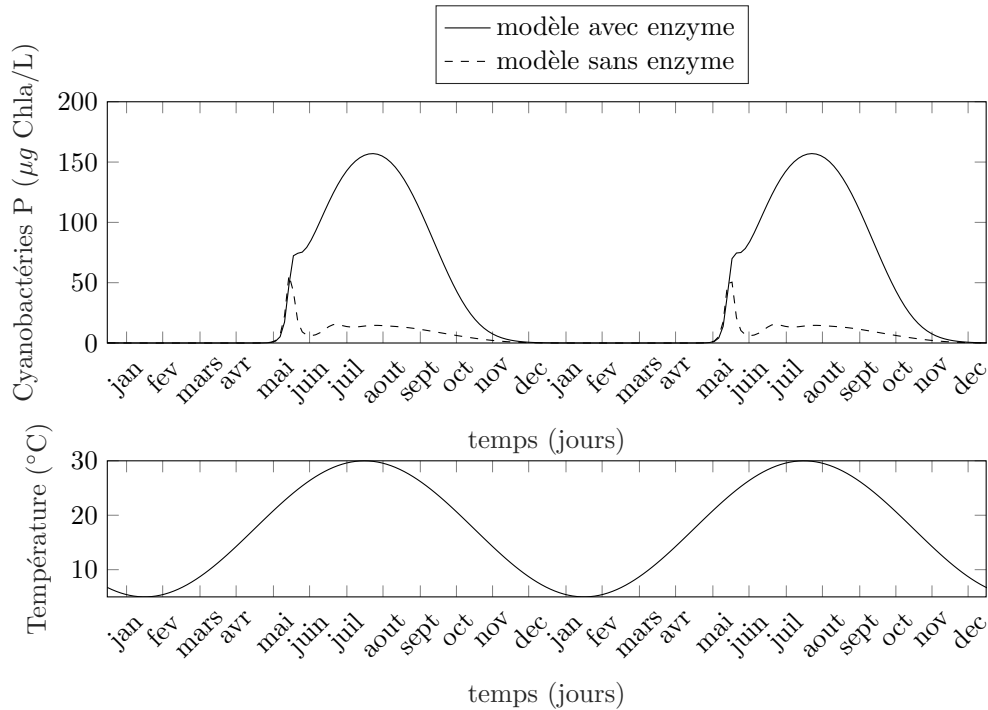


FIGURE 3.6 – Exemple de simulations de la dynamique de population des cyanobactéries obtenues avec les modèles avec et sans sécrétion d’enzyme par les cyanobactéries, dans le cas où une température périodique est appliquée.

Collaborations

Ces travaux ont été initiés dans le cadre de la thèse de Joseph Luis Kahn Casapia en collaboration avec Antoine Rousseau (LEMON, INRIA) et sont en cours de finalisation. Les travaux préliminaires ont été présentés en congrès par Joseph Luis Kahn Casapia (Kahn Casapia et al. 2020).

3.5 Dégradation du sucre en alcool par les levures lors de la fermentation alcoolique

3.5.1 Motivation : contrôle de la fermentation alcoolique

Pour piloter le procédé de fermentation alcoolique, il est nécessaire d’avoir un modèle suffisamment fiable et robuste à partir duquel il sera ensuite possible de synthétiser une loi de commande adaptée. Dans l’objectif d’atteindre une cible aromatique donnée en fin de fermentation (voir paragraphe 2.3), il est notamment nécessaire d’avoir construit un modèle de la dynamique de synthèse des arômes au cours de la fermentation. Pour atteindre cet objectif, une première étape consiste en la modélisation de la cinétique principale, qui correspond à la bioconversion du sucre en éthanol par les levures, dont la croissance de population est également importante à représenter dans le modèle. L’enjeu est en particulier d’avoir un modèle qui permet de bien représenter l’impact d’un ajout d’azote en cours de fermentation sur la dynamique du procédé, et notamment sur l’évolution de la biomasse, du sucre et du CO_2 . En effet, cet ajout d’azote est un des leviers utilisé par les industriels pour accélérer la fermentation, levier dont on a également montré l’effet sur la quantité d’arômes produits (voir paragraphe 2.3).

Plusieurs modèles représentant la cinétique principale de la fermentation alcoolique existent dans la littérature (Casenave, Perez et al. 2020 ; David et al. 2013 ; Malherbe et al. 2004), chacun ayant

une plage de validité bien définie. Cependant aucun d’entre eux n’est parfaitement adapté à la synthèse d’une loi de commande, soit parce qu’ils sont trop simples (Casenave, Perez et al. 2020), qu’ils négligent des mécanismes importants (Malherbe et al. 2004) ou qu’ils sont partiellement basés sur des relations empiriques (David et al. 2013) et donc non robustes.

L’objectif de ces travaux était donc d’élaborer un nouveau modèle, basé sur ceux existants dans la littérature, dans l’optique de l’utiliser ensuite pour la synthèse d’une stratégie de contrôle de la synthèse d’arômes.

3.5.2 Modélisation de la cinétique principale d’une fermentation alcoolique avec ajout d’azote

Nous sommes donc repartis du modèle de Malherbe et al. (Malherbe et al. 2004) dans lequel les auteurs ont introduit une variable représentant le nombre de transporteurs de sucre par cellule de levure, les transporteurs étant des protéines situées sur la membrane de la cellule permettant au sucre de pénétrer à l’intérieur de la cellule de la levure. La dynamique de bioconversion du sucre en éthanol est donc gouvernée par l’activité des transporteurs, processus également représenté dans le modèle.

Pour adapter ce modèle en vue de son utilisation pour la synthèse d’une loi de commande, il était nécessaire de le modifier sur trois aspects en particulier : (1) le modèle existant ne permettait pas de représenter la recroissance de la biomasse (levures) après un ajout d’azote en cours de fermentation ; (2) la valeur finale de la biomasse atteinte était fonction de la valeur initiale de la quantité d’azote dans le milieu ; (3) la quantité de transporteurs dans les levures était une expression empirique dépendant des variables du milieu.

J’ai donc modifié le modèle de la manière suivante :

- une nouvelle variable d’état T_r représentant le nombre de transporteurs de sucre par cellule de levures est introduite. $T_r X$ est donc le nombre total de transporteurs dans la population de cellules de levures. Il existe en fait plusieurs types de transporteurs, qui ne sont pas synthétisés au même moment durant la fermentation. En fonction de la concentration en éthanol, et de la concentration en sucre dans le milieu, la cellule va préférer synthétiser un type ou un autre de transporteurs pour s’adapter aux conditions environnementales. Nous aurions donc pu introduire plusieurs variables d’état représentant chacune un type de transporteurs. Dans un premier temps cependant, nous avons choisi de n’en introduire qu’une seule (T_r) qui, comme dans le modèle de Malherbe, va varier au cours de la fermentation.
- le flux d’azote consommé par les levures est séparé en deux : une partie est allouée à la croissance de la biomasse des levures, et l’autre partie est utilisée pour la synthèse des transporteurs. La répartition entre les deux fonctions (croissance ou synthèse de transporteurs) dépend de la concentration en éthanol et/ou en sucre du milieu.
- les transporteurs étant dégradés par l’éthanol, on rajoute une fonction de “mortalité” dans l’équation des transporteurs. Le taux de mortalité d dépend de la concentration en éthanol dans le milieu.
- Au cours de la fermentation, la cellule va “réparer” les transporteurs dégradés pour qu’ils soient de nouveau opérationnels. Nous avons donc introduit une nouvelle variable d’état notée N_{T_r} représentant le stock d’azote par cellule de levure issu de la dégradation des transporteurs et qui peut être réutilisé par la cellule pour réparer/transformer les transporteurs. La fonction de “réparation” des transporteurs par les cellules de levures est quant à elle notée $t(N_{T_r}, S)$, et dépend de la concentration en sucre dans le milieu.

On obtient au final un modèle composé des 6 équations différentielles ordinaires décrites en Figure 3.7b, dans lequel le taux de croissance des levures est donné par $\mu_N(N, E) = \frac{k_3 N}{N + K_n + K_{ni} N E^{\alpha_N}}$, alors que les fonctions f (fonction d'allocation de l'azote), ν_{ST} (fonction d'activité des transporteurs), d (fonction de dégradation des transporteurs) et t (fonction de réparation des transporteurs) sont à identifier à partir des données expérimentales (voir paragraphe 5.3).

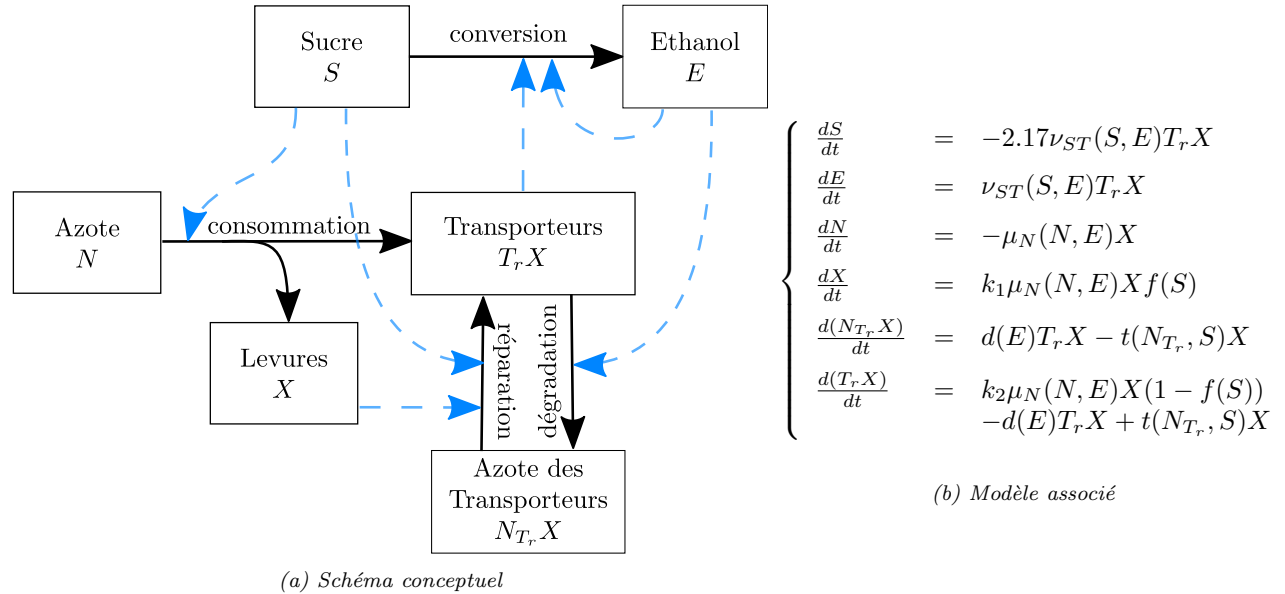


FIGURE 3.7 – Modélisation de la cinétique principale lors de la fermentation alcoolique avec ajout d'azote.

3.5.3 Simulation d'une fermentation avec ajout d'azote

Les simulations issues du modèle présenté en figure 3.7b ont été comparées avec celles du modèle de Malherbe ainsi qu'avec les données disponibles. Les résultats montrent que le nouveau modèle permet de mieux représenter la dynamique observée que le modèle de Malherbe (voir figure 3.8) et que la recroissance de la population de levures après l'ajout d'azote est également bien simulée. L'obtention de ces simulations a nécessité une étape de calibration et d'identification des fonctions f , ν_{ST} , d et t qui est décrite au paragraphe 5.3.

Collaborations

Ces travaux ont été faits en collaboration avec l'UMR SPO, et en particulier avec Marc Pérez et Jean-Roch Mouret. Trois stages de master (Souad Sekkat en 2013, Noémie Barillot en 2017 et Carlos Santana en 2018) ont permis d'avancer sur le sujet. Après l'acceptation du projet ANR STARWINE, cette modélisation a été reprise par le TBI-INSA, partenaire du projet chargé de la modélisation de la synthèse des arômes.

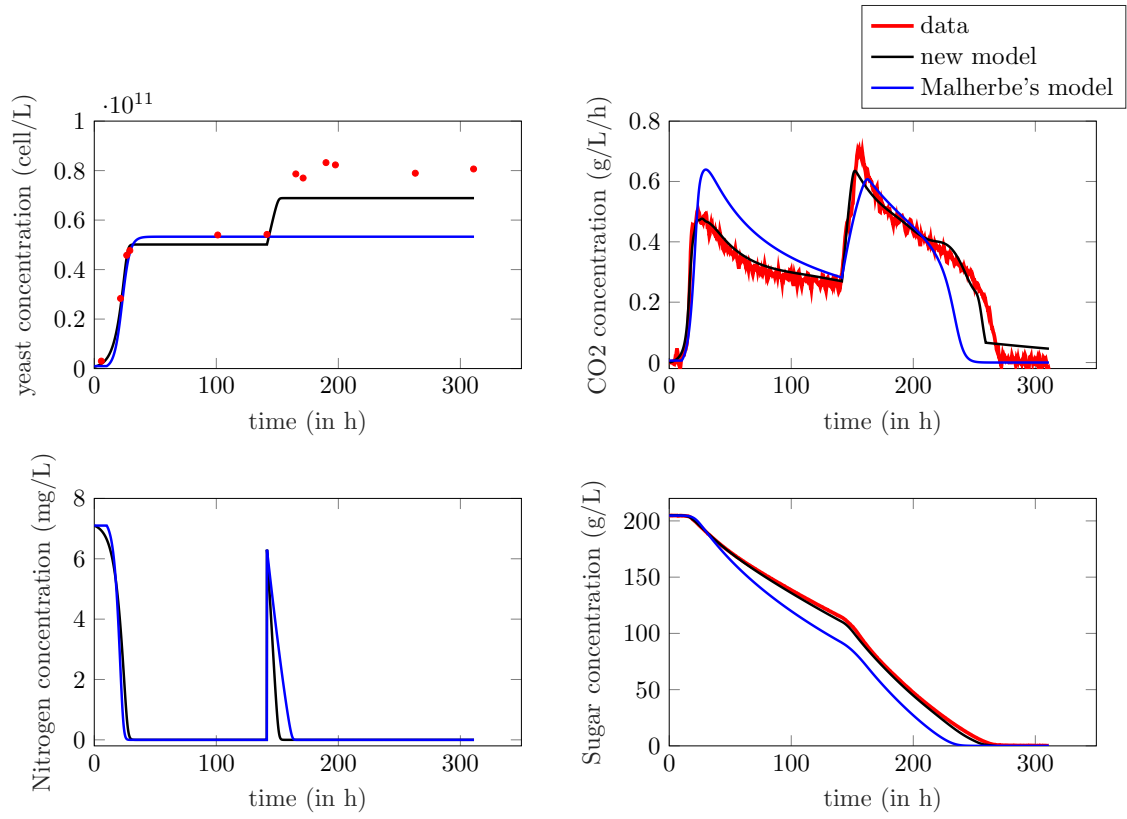


FIGURE 3.8 – Comparaison du modèle de Malherbe, du nouveau modèle de la cinétique principale (équations données en Figure 3.7b) et des données expérimentales d'une fermentation alcoolique avec ajout d'azote en cours de fermentation.

Vers des modèles plus complexes

“The other path has followed the route of computational power provided by digital computers. In this approach, there is neither the need nor the motivation for parsimony, and the objective is to provide a mechanistically detailed representation of the modeled system. Models developed through this approach generally are referred to as simulations models. In contrast to the elegant models that are the goal of theoretical ecology, these biologically explicit models tend to be complex mathematical description - the big ugly models that are the topic of this article.”

Jesse Logan (J. Logan 1994)

Sommaire

4.1	Introduction	41
4.2	Modèles intégrro-différentiels de Volterra	42
4.2.1	Une classe de modèles pseudo-différentiels	42
4.2.2	La représentation diffusive	42
4.2.3	Schémas numériques pour la simulation d'équations intégrro-différentielles	43
4.3	Modèles compartimentaux de sols fracturés	44
4.3.1	Comment simuler les écoulements dans les sols	44
4.3.2	Modèles MINC, SINC et MRMT	45
4.3.3	Résultats d'équivalence entre modèles MRMT et SINC	46
4.4	Méta-écosystèmes	47
4.4.1	Les systèmes agro-sylvo-pastoraux d'Afrique de l'Ouest	47
4.4.2	Un modèle de méta-écosystème	48
4.4.3	Impact du bétail et de l'organisation spatio temporelle sur la production	49
4.5	Modèles thermo-hydro-écologiques des lacs	49
4.5.1	Simulation des blooms cyanobactériens	49
4.5.2	Logiciels de simulation hydro-thermo-écologique	50
4.5.3	Développement et simulations de modèles sur deux cas d'étude	51

4.1 Introduction

Les travaux que j’ai regroupés dans ce chapitre contribuent tous au développement ou à la simulation de modèles dynamiques biologiques qui soient plus proches de la réalité, et donc plus complexes. Ce qui m’intéresse est de simuler la dynamique globale de l’écosystème et non plus celle d’un processus particulier, et d’obtenir des simulations d’ordre quantitatif.

Il existe plusieurs façons d’obtenir des simulations plus réalistes. La première consiste à considérer un grand nombre de variables et de processus dans le modèle de l’écosystème. Les modèles d’écosystèmes dits minimaux que j’ai présentés dans le chapitre 3 sont constitués de quelques équations différentielles ordinaires uniquement et sont beaucoup utilisés notamment en écologie théorique, pour comprendre la dynamique et l’impact de certains processus. Néanmoins, du fait de leur simplicité, ces modèles ne permettent souvent pas de rendre compte de la complexité et de la richesse de la dynamique des écosystèmes. De ce fait, les simulations issues de ces modèles, d’ordre qualitatif uniquement, n’ont généralement pas vocation à être confrontées aux données. Augmenter le nombre de variables et de processus dans le modèle peut donc permettre de mieux décrire la dynamique globale de l’écosystème et ainsi générer des simulations plus proches de la réalité. La question du compromis entre nombre de variables/paramètres, précision des simulations et temps de calcul reste néanmoins centrale. En effet on peut rapidement parvenir à des modèles complexes constitués de plusieurs dizaines de variables et plusieurs centaines de paramètres qui demandent beaucoup de ressources de calcul et ne sont pas adaptés à certaines problématiques de simulation temps réel ou qui vont être difficile à calibrer. De plus, les sorties de ces modèles peuvent être parfois difficiles à analyser et interpréter.

La dynamique des organismes vivants mais également des éléments physico-chimiques présents dans les écosystèmes est dépendante de l’environnement dans lequel ils évoluent et avec lequel ils interagissent. Pour rendre les simulations plus réalistes, l’hétérogénéité spatiale de ces environnements doit donc aussi être prise en compte dans les modèles. Dans certains de mes travaux, je me suis intéressée à la question de la représentation des hétérogénéités spatiales de l’environnement et au couplage avec les modèles écologiques. Les modèles que je considère sont généralement issus du couplage entre un système d’équations différentielles ordinaires non linéaires représentant les interactions entre les différents éléments de l’écosystème (organismes, nutriments, etc.) et un modèle représentant la dynamique de l’environnement dans lequel évolue l’écosystème (écoulement dans des sols fracturés, hydrodynamique d’un lac, etc.). Cela m’a donc amenée à travailler parfois séparément sur l’un ou l’autre des sous-modèles, ou sur le modèle couplé. Pendant ma thèse, j’ai également travaillé sur des modèles intégro-différentiels qui permettent de représenter des phénomènes de mémoire qui peuvent être présents dans les écosystèmes. Si à l’époque mes domaines d’application n’étaient pas les écosystèmes, il me semble intéressant de mentionner mes travaux de thèse ici puisqu’ils pourraient être appliqués aux modèles intégro-différentiels proposés par Volterra pour représenter des dynamiques de population. Ce type de modèles contribuent donc également à la simulation de modèles plus réalistes dans lesquels sont représentés des phénomènes que les systèmes d’EDOs seuls ne permettent pas de simuler.

Dans ce chapitre, je vais présenter les différents travaux auxquels j’ai contribué dans cet objectif :

- Simulation de systèmes intégro-différentiels via l’approche de “représentation diffusive”
- Analyse et réduction de modèles compartimentaux de sols fracturés
- Développement d’un modèle de méta-écosystèmes pour les systèmes agro-sylvo-pastoraux
- Développement et simulation de modèles thermo-hydro-écologiques des lacs

4.2 Modèles intégro-différentiels de Volterra

4.2.1 Une classe de modèles pseudo-différentiels

De nombreux modèles font intervenir, outre des opérateurs différentiels, des opérateurs dynamiques intégraux, de la forme :

$$u \mapsto \mathcal{H}u, (\mathcal{H}u)(t) = \int_0^t \mathbf{h}(t, s)u(s) ds. \quad (4.1)$$

Ces opérateurs sont fréquemment de nature convolutive, c'est-à-dire : $\mathbf{h}(t, s) = h(t - s)$, et on note alors de façon naturelle : $\mathcal{H} = H(\partial_t)$, où H est appelée fonction de transfert ou symbole. Par ailleurs, au sens des distributions et grâce au théorème des noyaux de Schwartz, les opérateurs différentiels (voire aux différences finies) sont également représentables par (4.1), ce qui confère à cette formulation une portée étendue.

De tels modèles sont souvent de la forme “explicite” (ou de Volterra) :

$$H(\partial_t)X = f(X, u), \quad (4.2)$$

où f est une fonction non linéaire, $H(\partial_t)$ est un opérateur en général matriciel, défini par une matrice de transfert (ou symbole) H non nécessairement rationnelle. Sous hypothèses de régularité sur H , en pratique peu restrictives, les modèles (4.2) sont de type “pseudo-différentiel”, du fait de certaines analogies de l'opérateur $H(\partial_t)$ avec les opérateurs différentiels.

Les problèmes (d'analyse, de simulation, d'estimation d'état, de commande, etc...) relatifs à de tels modèles posent en général de nombreuses difficultés, directement liées à la non localité dans le temps des opérateurs $H(\partial_t)$, les outils habituels de l'analyse des systèmes dynamiques étant pour la plupart dédiés au cas différentiel $H(\partial_t) = \partial_t$. L'expression de $H(\partial_t)X$ sous forme d'un produit de convolution est en effet de manipulation délicate et l'approximation numérique par quadrature directe de l'intégrale est coûteuse, sinon irréalisable. Dans le cas linéaire, le passage au domaine fréquentiel reste, bien sûr, envisageable dans certains cas ; cependant, même dans le cas linéaire, l'approche fréquentielle classique n'est pas adaptée aux problèmes temps-réels (identification, poursuite, contrôle, etc).

4.2.2 La représentation diffusive

L'approche dénommée “représentation diffusive” (G. Montseny 2005) s'inscrit dans cette problématique : elle permet la reformulation d'opérateurs dynamiques intégraux $H(\partial_t)$ au moyen d'une réalisation d'état, basée sur le “symbole diffusif” (ou γ -symbole), objet mathématique de nature en général distributionnelle, associé à l'opérateur, et souvent noté μ :

$$\begin{cases} \partial_t \psi(t, \xi) = \gamma(\xi) \psi(t, \xi) + X(t), \quad \psi(0, \cdot) = 0, \quad \xi \in \mathbb{R}, \\ [H(\partial_t)X](t) = \int \mu(\xi) \psi(t, \xi) d\xi. \end{cases} \quad (4.3)$$

Cette réalisation d'état est de dimension infinie, mais locale en temps, ce qui rend la manipulation des opérateurs ainsi réalisés beaucoup plus aisée, tant pour l'analyse que pour l'approximation numérique. L'inconvénient de la dimension infinie de la réalisation est en effet pallié par la nature diffusive de l'équation d'état, ce qui assure, notamment, la possibilité d'approximations numériques à la fois précises et peut coûteuses.

Parmi les nombreux problèmes où cette théorie a été appliquée avec succès, on peut citer par exemple l'étude des systèmes et signaux stochastiques, tels que les mouvements Browniens fractionnaires (Carmona et al. 1998), la simulation d'opérateurs d'impédance sur une frontière circulaire pour l'équation des ondes 2D (Levadoux et al. 2003), l'analyse d'un modèle singulier d'évolution d'une flamme sphérique (Audounet et Roquejoffre 1998; Audounet, Roquejoffre et Rouzaud 2002), la modélisation et identification de comportements dynamiques complexes dans certains composants du génie électrique (A. Rumeau 2009; A. Rumeau et al. 2006), ou encore divers autres travaux en traitement du signal (Degerli et al. 1999), identification (Garcia et al. 1998; Laudebat 2003; Mouyon et al. 2002), contrôle de systèmes dynamiques (Audounet, Devy-Vareta et al. 2000; Devy-Vareta et al. 2000), etc.

4.2.3 Schémas numériques pour la simulation d'équations intégrô-différentielles

Les méthodes standards de résolution numérique d'équations intégrô-différentielles sont basées sur des quadratures directes des intégrales et nécessitent généralement une discrétisation temporelle coûteuse, particulièrement en présence d'opérateurs intégraux à mémoire longue. De plus, la stabilité des schémas numériques est en général difficile à obtenir, car les techniques standards dédiées aux équations différentielles ordinaires (dissipation d'énergie par exemple) sont difficilement utilisables dans le cas d'équations intégrô-différentielles. La construction de schémas numériques stables et peu coûteux reste donc un problème important pour lequel les méthodes spécifiques dédiées à l'analyse et l'approximation des opérateurs convolutifs, telle la représentation diffusive, peuvent être utiles.

On considère l'équation intégrô-différentielle de la forme abstraite :

$$\mathbf{H}(\partial_t)\Phi = \mathbf{G}(\nabla)\Phi + f \quad \text{sur } (t, z) \in \mathbb{R}_t^{+*} \times \mathbb{R}_z^n, \quad (4.4)$$

où $\mathbf{H}(\partial_t)$ est un opérateur convolutif inversible et diagonal, et $\mathbf{G}(\nabla)$ est un opérateur linéaire différentiel anti auto-adjoint. Au moyen de la représentation diffusive, on a établi puis étudié une nouvelle formulation, à la fois équivalente à (4.4) et temps-locale, écrite sous forme de problème de Cauchy :

$$\partial_t \Psi = \mathcal{A}\Psi + \mathcal{B}f \quad \text{avec } (t, z, \xi) \in \mathbb{R}_t^{+*} \times \mathbb{R}_z^n \times \mathbb{R}_\xi, \quad \Psi(0, \dots) = 0, \quad (4.5)$$

de telle sorte que la solution de (4.4) s'exprime $\Phi = \mathcal{C}\Psi$.

En particulier, il a été établi que, sous des hypothèses naturelles sur le symbole $\mathbf{H}(p)$, la formulation (4.5) est dissipative au sens d'une fonctionnelle énergie dérivée de celle de l'équation standard : $\partial_t \Phi = \mathbf{G}(\nabla)\Phi$. Cette propriété essentielle a permis d'envisager la discrétisation en ξ de (4.5), qui aboutit sur une équation dissipative approchée à partir de laquelle on peut construire des schémas numériques par discrétisation des variables t, z . Différentes classes de schémas ainsi obtenus ont été étudiées, et on a établi leur stabilité au sens d'une fonctionnelle énergie adaptée, héritée du modèle continu (4.4).

Ces schémas ont ensuite été mis en œuvre sur un modèle de paroi poreuse établi par S. Gasser (Gasser 2003) dans le domaine fréquentiel. Ce modèle, qui décrit la propagation d'ondes acoustiques à l'intérieur du milieu poreux d'interface $\Gamma = \{z = 0\} \times]0, X[$ avec le milieu fluide, est donné sur $(\omega, z, x) \in \mathbb{R} \times]0, 1[\times]0, X[$ par :

$$\begin{cases} e(x) i\omega \rho_{\text{eff}}(i\omega) \hat{u} + \partial_z \hat{P} = 0 \\ e(x) i\omega \chi_{\text{eff}}(i\omega) \hat{P} + \partial_z \hat{u} = 0 \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \rho_{\text{eff}}(i\omega) = \rho \left(1 + a \frac{\sqrt{1+b i\omega}}{i\omega}\right) \\ \chi_{\text{eff}}(i\omega) = \chi \left(1 - c \frac{i\omega}{i\omega + a' \sqrt{1+b' i\omega}}\right), \end{cases} \quad (4.6)$$

où u et P représentent la vitesse et la pression dans le milieu poreux et $e(x)$ est l'épaisseur de la paroi. Le modèle (4.6) est complété par les conditions aux limites $u|_{z=1} = 0$ (réflexion totale en

$z = 1$) et $u|_{z=0} = w$. Ce modèle peut s'écrire sous la forme (4.4) où :

$$\Phi = \begin{pmatrix} u \\ P \end{pmatrix}, \mathbf{G}(\nabla) = \begin{bmatrix} 0 & -\partial_z \\ -\partial_z & 0 \end{bmatrix} \text{ et } \mathbf{H}(\partial_t) = \begin{bmatrix} H_1(\partial_t) & 0 \\ 0 & H_2(\partial_t) \end{bmatrix}, \quad (4.7)$$

avec $H_1(\partial_t)$ et $H_2(\partial_t)$ opérateurs de symboles $H_1(p) = kp + a\sqrt{1+bp}$ et $H_2(p) = k'p + \frac{cp^2}{p+a'\sqrt{1+b'p}}$. Sur cet exemple, les conditions suffisantes de stabilité des schémas se sont avérées être quasiment nécessaires. Une interprétation physique de ces conditions a été établie en terme de vitesse de propagation numérique haute fréquence.

Collaborations

Ces travaux ont été faits dans le cadre de ma thèse, sous la direction et donc en collaboration avec Gérard Montseny. Une papier d'introduction à la représentation diffusive a été présenté en conférence (Casenave et Gérard Montseny 2010). Les travaux portant sur les schémas numériques ont été publié dans SIAM Journal on Applied Mathematics (Casenave et E. Montseny 2008b). J'ai également travaillé sur l'analyse et la simulation du modèle de paroi absorbante présenté ci-dessus comme exemple à l'aide de la représentation diffusive. Ces travaux n'étant ni générique ni en lien avec les écosystèmes, je ne les ai pas présentés dans ce manuscrit. Ces travaux ont été présentés en conférence (Casenave et E. Montseny 2008a) et publiés dans les Comptes Rendus de l'Académie des Sciences (CRAS) (Casenave, E. Montseny et Séguier 2008) et dans Journal of Vibration and Control (E. Montseny et al. 2015).

4.3 Modèles compartimentaux de sols fracturés

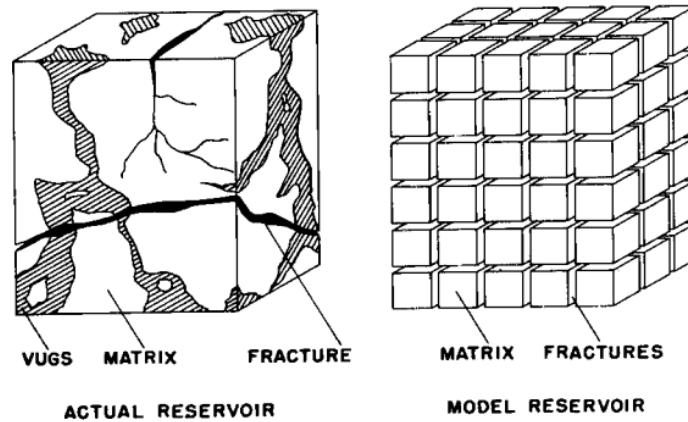
4.3.1 Comment simuler les écoulements dans les sols

Les sols, ou milieux souterrains, sont très hétérogènes et de ce fait complexes à modéliser. Pour simuler les écoulements et le transport de composants chimiques ou biologiques dans ces milieux, des modèles basés sur les lois fondamentales de la mécanique ont été proposés. Ces modèles sont souvent complexes et sur-paramétrés au regard des données disponibles pour la calibration. Des modèles parcimonieux ont donc été construits dans l'objectif d'adapter la complexité du modèle aux mesures de terrain. Ces modèles sont particulièrement intéressants lorsque l'échelle d'observation s'éloigne de celle des équations fondamentales.

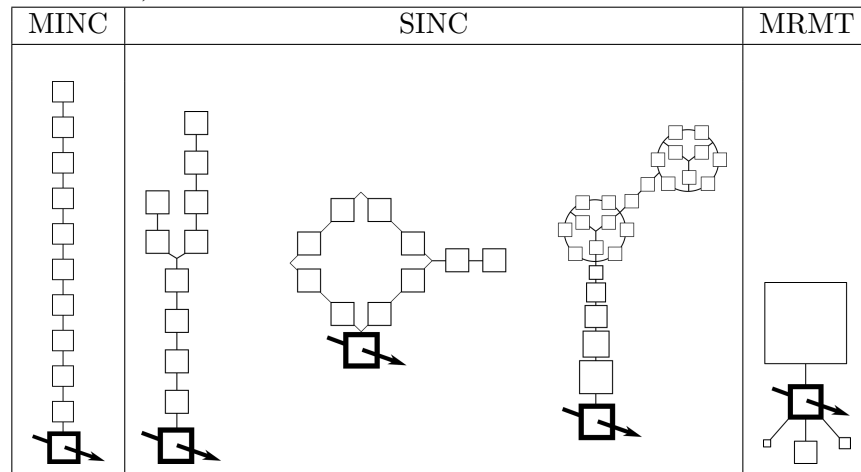
Parmi ces modèles parcimonieux, on peut citer le modèle à double porosité (Barenblatt et al. 1960 ; Warren et al. 1963). Ce modèle repose sur une idéalisation de la structure d'un milieu poreux hétérogène (voir figure 4.1a), supposée comprendre deux zones aux porosités différentes : (1) une zone "mobile" (niveaux sableux, fractures...), perméable et bien connectée, où le transport, rapide, est essentiellement dû à la convection et la dispersion ; (2) une zone "immobile" (niveaux argileux, matrice rocheuse ...), peu perméable et mal connectée, où le transport, plus lent, est essentiellement diffusif. Cette structure est représentative des milieux poreux très hétérogènes, comme les sols fracturés, fissurés ou agrégés. Dans le modèle à double porosité, l'écoulement et le transport dans chaque zone sont décrits par des équations continues couplées par un terme source/puits qui représente le taux de transfert de masse entre les deux zones. Plusieurs modèles proposent de décomposer la zone immobile en plusieurs zones interconnectées de plus petites tailles, ce qui permet de rendre compte de la structure spatiale de la zone immobile. C'est le cas du modèle MINC (Multiple INteracting Continua, Pruess 1985) obtenu par approximation par différences finies du modèle à double porosité dans lequel les zones immobiles sont connectées en série (voir figure 4.1b). Dans le modèle MRMT (Mutli-Rate Mass Transfert, Haggerty et al. 1995), la structure est différente puisque chaque zone

immobile est directement connectée à la zone immobile (structure en étoile voir figure 4.1b). Pour représenter des structures plus complexes, le modèle SINC (Structured INteracting Continua) a été introduit dans (Babey, De Dreuzy et Casenave 2015).

Dans nos travaux, nous nous sommes intéressés à la question de l'existence d'un modèle équivalent de type MRMT pour tout modèle SINC. L'intérêt vient de la simplicité de la structure MRMT tant sur le plan de l'écriture mathématique que de l'implémentation numérique. Nous n'avons considéré que le cas du transport d'une substance abiotique dans le milieu.



(a) Idéalisation à la base du modèle à double porosité (Warren et al. 1963)



(b) Comparaison des structures des zones immobiles dans les modèles MINC, SINC et MRMT. Les structures sont représentées selon une coupe transverse à la zone mobile, représentée en gras avec une flèche. (Babey, De Dreuzy et Casenave 2015)

FIGURE 4.1 – Modélisation d'un milieu poreux hétérogène.

4.3.2 Modèles MINC, SINC et MRMT

Les modèles MINC, SINC et MRMT s'écrivent tous sous la forme :

$$\frac{\partial U}{\partial t} - AU = L(R_m U) \quad (4.8)$$

où :

- $U = [c_m(x, t), c_{im}^1(x, t) \dots c_{im}^N(x, t)]$ est un vecteur de dimension $N + 1$ composé des concentrations de la substance abiotique dans la zone mobile $c_m(x, t)$ et dans les N zones immobiles $c_{im}^i(x, t)$, $i = 1 : N$.
- A est la matrice d'interaction entre les différentes zones,
- $R_m U = [c_m, 0, \dots, 0]$,
- et L est l'opérateur de transport dans la zone mobile défini par :

$$L(c_m) = -\frac{q}{\phi_m} \frac{\partial c}{\partial x} + d_m \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}. \quad (4.9)$$

C'est la structure et les valeurs des coefficients de la matrice A qui diffèrent d'un modèle à l'autre. Pour le modèle MINC, la matrice sera par exemple tridiagonale, alors qu'elle aura une forme de flèche (première colonne, première ligne et diagonale non nulles uniquement) dans le cas du modèle MRMT.

4.3.3 Résultats d'équivalence entre modèles MRMT et SINC

Nous avons tout d'abord montré que quelle que soit la structure de la zone immobile du modèle SINC (voir exemples en figure 4.1b), il existe un modèle MRMT équivalent en termes de concentration dans la zone mobile, et ce quelles que soient la condition initiale et les conditions aux limites. Ce modèle possède le même nombre de zones immobiles que le modèle SINC original. Chaque zone immobile est caractérisée par un taux α_i de transfert vers la zone mobile et une porosité ϕ_{im}^i . Nous avons montré que les taux de transfert α_i correspondent à l'opposé des valeurs propres de la sous-matrice \bar{A} , matrice obtenue à partir de la matrice d'interaction A en supprimant la première ligne et la première colonne (ligne et colonne correspondants à la zone mobile). Une expression analytique issue de la diagonalisation de \bar{A} permet également de calculer les valeurs des porosités ϕ_{im}^i .

L'application de ces formules sur les 4 exemples de modèles (structure MINC + 3 structures SINC de la figure 4.1b) a en outre montré que seul un petit nombre de zones immobiles (et de taux de transfert associés) du modèle MRMT équivalent synthétise l'information de la structure de la zone immobile du modèle SINC. Nous avons donc cherché à identifier des modèles MRMT de tailles restreintes permettant d'approximer les modèles SINC.

Nous avons proposé des méthodes numériques (développées dans le domaine temporel et fréquentiel) pour cela. A partir de la courbe d'évolution temporelle de la concentration dans la zone mobile (courbe obtenue en sortie d'un modèle SINC ou à partir des données réelles d'un essai de traçage), ces méthodes permettent d'identifier un modèle MRMT avec un nombre de zones immobiles fixé par l'utilisateur. Nous avons ainsi montré que des modèles MRMT réduits composés de 3 à 5 zones immobiles seulement permettent de reproduire les sorties d'un modèle SINC avec une erreur de quelques pourcents seulement (voir figure 4.2).

Collaborations

Ce travail s'inscrit dans le cadre de la thèse de Tristan Babey (soutenue en décembre 2016), dirigée par Jean-Raynald de Dreuzy (UMR Géosciences, Université de Rennes I). Les résultats ont fait l'objet d'une communication orale dans une conférence (Babey, De Dreuzy, Rapaport et al. 2013) (présentée par Tristan Babey) et ont été publiés dans *Advances in Water Resources* (Babey, De Dreuzy et Casenave 2015) en 2015.

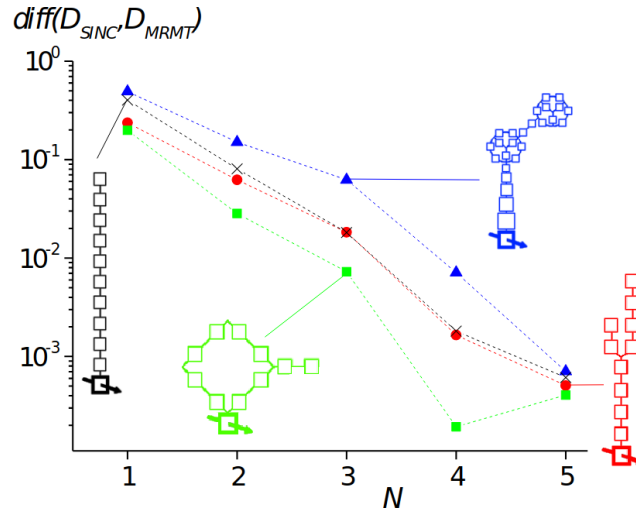


FIGURE 4.2 – Différence entre la dispersion obtenue avec le modèle SINC (D_{SINC}) et celle obtenue avec un modèle MRMT (D_{MRMT}) réduit en fonction du nombre N de zones immobiles du modèle MRMT pour les quatre structures présentées en figure 4.1b. Figure issue de (Babey, De Dreuzy et Casenave 2015).

4.4 Méta-écosystèmes

4.4.1 Les systèmes agro-sylvo-pastoraux d’Afrique de l’Ouest

Les systèmes agro-sylvo-pastoraux sont des agro-écosystèmes mixtes, c’est à dire combinant élevage (production animale) et cultures (production végétale) sur un même territoire (voir paragraphe 3.2.1), et qui incluent en plus une zone arborée sur laquelle le bétail vient pâturer. C’est le cas des systèmes agro-sylvo-pastoraux d’Afrique de l’Ouest (SASP-AO) qui sont généralement composés de plusieurs auréoles concentriques organisées autour du village, avec dans l’ordre d’éloignement (voir figure 4.3) : l’auréole de case dédiée aux cultures vivrières, l’auréole de brousse dédiée aux cultures de rente et l’auréole de savane, non cultivée, qui est utilisée comme lieu de pâturage par le bétail.

Comme nous avons pu le voir dans le chapitre précédent (voir en particulier les paragraphes 3.2 et 3.3), la fertilité dans les agro-écosystèmes mixtes repose en partie sur le transfert de nutriments par le bétail via les fèces et l’urine. Cependant la pratique de la jachère joue également un rôle important dans la dynamique globale de l’écosystème puisque elle permet aux stocks de nutriments des terres cultivées de se reformer.

Les systèmes agro-sylvo-pastoraux d’Afrique de l’Ouest sont donc caractérisés à la fois par une forte hétérogénéité spatiale (du fait de la présence des différentes auréoles), mais aussi par une variation temporelle des pratiques, que ce soit au niveau annuel (gestion du bétail en fonction des saisons) ou pluri-annuel (rotation des jachères).

Du fait de pressions socio-économiques et démographiques, l’organisation spatio-temporelle des SASP-AO (répartition des surfaces et durées de rotation des jachères) ainsi que les pratiques agricoles (notamment celles relatives à l’élevage) connaissent d’importantes modifications. Notamment la surface allouée aux cultures augmente au détriment de la savane et de la jachère, amenant à une diminution de la fertilité et au recours aux engrais chimiques. Dans ce contexte, il est donc intéressant d’étudier l’impact de ces modifications sur la production végétale et animale à l’échelle de l’agro-écosystème et d’identifier des configurations optimales en termes de production.

4.4.2 Un modèle de méta-écosystème

Pour représenter les systèmes agro-sylvo-pastoraux d’Afrique de l’Ouest et tenir compte de leur organisation spatio-temporelle, nous avons proposé un modèle de méta-écosystème, c’est à dire un réseau d’écosystèmes inter-connectés. Un schéma de ce modèle est donné en figure 4.3.

Dans ce modèle, on retrouve les différentes auréoles (zones concentriques) qui composent l’agro-écosystème : le village au centre, l’auréole de case composée des champs cultivés qui sont situés autour du village, l’auréole de brousse correspondant aux champs laissés en jachère, et la savane. Les auréoles de case et de brousse ont été divisées en plusieurs parcelles. Un même modèle générique de type EDO est utilisé pour chaque parcelle ; ce modèle comprend 4 variables : les plantes, les racines mortes, la matière organique et la matière inorganique du sol de la parcelle. Seule la valeur des paramètres varie d’une parcelle à une autre.

Deux saisons sont prises en compte dans le modèle : la saison sèche, et la saison humide. Les différentes parcelles sont connectées entre elles et avec la savane et le village via des transferts de nutriments, qui peuvent être issus de la rotation des cultures (passage d’une parcelle cultivée à une parcelle de jachère et inversement), de la saisonnalité, ou du bétail qui se déplace sur l’ensemble de l’agro-écosystème avec des variations en fonction des saisons. Le bétail n’est ici représenté que comme un flux de nutriments.

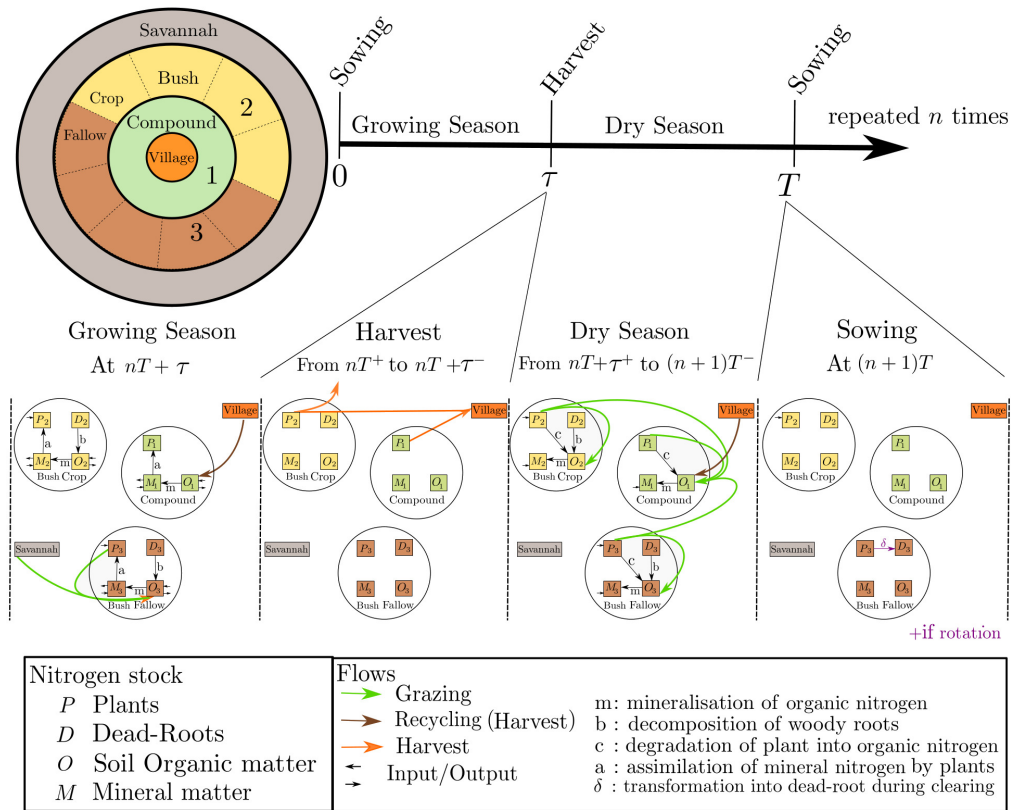


FIGURE 4.3 – Schéma du modèle de méta-écosystème développé dans le cadre de la thèse de Anne Bisson pour représenter les systèmes agro-sylvo-pastoraux d’Afrique de l’Ouest. Figure réalisée par Anne Bisson.

4.4.3 Impact du bétail et de l'organisation spatio temporelle sur la production

Avec ce modèle, nous avons étudié l'influence de la structure des systèmes agro-sylvo-pastoraux d'Afrique de l'Ouest sur la production agricole de ces systèmes. Nous nous sommes intéressés à l'influence de trois leviers :

- la présence / absence du bétail dans l'agro-écosystème,
- la durée de rotation et la durée des jachères dans les rotations,
- la proportion de surface allouée aux différentes zones cultivées (case/brousse) de l'agro-écosystème.

Nos résultats suggèrent que la production végétale dépend fortement de la dynamique source-puits de l'azote. La bétail et la jachère agissent comme des "pompes" à nutriments, absorbant l'azote des "sources" (les pâturages et la savane pour le bétail et la jachère) et le rendant disponible dans les "puits" (les terres cultivées) pour la production végétale. Les deux "pompes" interagissent ensemble, et il existe un régime de jachère particulier qui maximise la production végétale grâce à l'activité du bétail :

- sans bétail, la production végétale maximale est obtenue pour une durée intermédiaire de jachère, mettant en évidence un compromis entre l'espace consacré à la production (terres cultivées) et l'espace consacré à la restauration de la fertilité (jachère).
- en présence de bétail, la production végétale est maximale pour une durée de jachère plus courte ; elle est nettement plus élevée avec que sans bétail.

Collaborations

Ces travaux ont été effectués dans le cadre de la thèse de Anne Bisson, en collaboration avec Tanguy Daufresne, Simon Boudsocq et Dominique Masse de l'UMR Eco&Sols. Ils ont été présentés par Anne B. en conférence à EcoSummit en 2016 (Bisson, Pichon et al. 2016) et ensuite publiés dans le journal Ecological Modelling (Bisson, Boudsocq et al. 2019).

4.5 Modèles thermo-hydro-écologiques des lacs

4.5.1 Simulation des blooms cyanobactériens

La dynamique des cyanobactéries est fortement impactée par la thermique et l'hydrodynamique des lacs dans lesquels elles se développent. Pour reproduire avec précision la dynamique des écosystèmes lacustres, les modèles écologiques sont souvent couplés à un modèle thermo-hydrodynamique. Parfois, seule la température de l'eau est modélisée pour rendre compte de la stratification thermique et des périodes de mélange qui influencent fortement la dynamique cyanobactérienne. Dans ce cas, on utilise généralement des modèles EDO à compartiments, ou des modèles EDP 1D verticaux. Mais il peut être également important de représenter les courants (vitesse et direction), qui peuvent être à l'origine d'une grande hétérogénéité spatiale de la distribution des cyanobactéries dans les lacs. Dans le cas de grands lacs peu profonds pour lesquels la stratification thermique est négligeable, des modèles EDP 2D peuvent alors être utilisés (modèle hydrodynamique shallow water). Mais dans les cas plus complexes, où la stratification thermique et les courants sont aussi importants les uns que les autres, le recours aux modèles EDP 3D est indispensable.

Concernant la partie écologique, plusieurs types de modèles sont utilisés dans la littérature. Parmi les modèles EDO mécanistes, c'est à dire basés sur les processus, toutes les configurations peuvent être considérées, de la plus simple (modèles minimaux) à la plus complexe. Ces modèles représentent les processus biogéochimiques des différents cycles (carbone, phosphore, azote, etc) des

écosystèmes aquatiques et permettent de simuler l'évolution temporelle des organismes vivants et des éléments physico-chimiques de ces écosystèmes. Couplés avec les modèles thermo-hydrodynamiques, ces modèles donnent finalement accès à la distribution spatiale de ces variables.

Je me suis intéressée à deux cas d'étude (voir figure 4.4) : le lac Taihu (Chine) et le lac de Champs-sur-Marne (France), tous deux étudiés et suivis (campagnes de mesure régulières, instruments de mesure in situ, station météo, etc) respectivement par le NIGLAS (Chine) et le LEESU (ENPC).

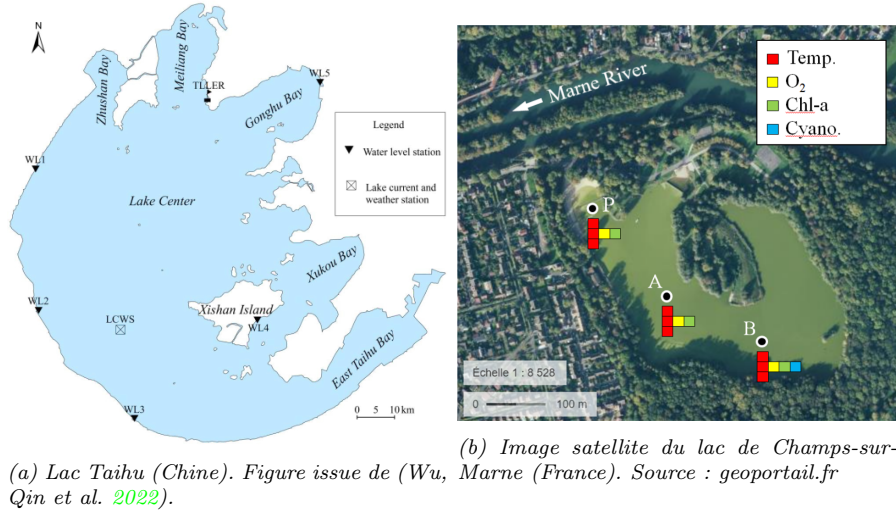


FIGURE 4.4 – Lacs étudiés dans mes travaux.

4.5.2 Logiciels de simulation hydro-thermo-écologique

Plusieurs logiciels sont disponibles pour simuler la thermique et l'hydrodynamique des lacs. J'ai travaillé avec plusieurs d'entre eux :

- FVCOM (Finite Volume Community Ocean Module), logiciel de simulation à l'origine utilisé pour l'océan et développé par l'Université du Massachusetts : <http://fvcom.smast.umassd.edu/fvcom/>
- Delft3D-FLOW qui est le module hydrodynamique de la suite logicielle open-source Delft3D développée par Deltares (Pays-Bas) : <https://oss.deltares.nl/web/delft3d>
- Telemac3D qui est un logiciel d'hydrodynamique 3D développé par EDF : <http://www.opentelemac.org/>
- SW2D (Shallow Water 2D) qui est un logiciel de simulation basée sur les équations shallow water qui est développé par l'équipe de recherche LEMON (INRIA) : <https://sw2d.inria.fr/>

Plusieurs logiciels existent également pour la simulation de la partie écologique. J'ai travaillé avec trois d'entre eux :

- WASP (Water Analysis and Simulation Program), un modèle de qualité d'eau développé par l'EPA (Environmental Protection Agency) aux Etats Unis : <https://www.epa.gov/ceam/water-quality-analysis-simulation-program-wasp>
- Delft3D-BLOOM, le module de la suite logicielle Delft3D dédiée à la simulation des blooms algaux ;

- la librairie open-source AED (Aquatic EcoDynamics) développée par l’UWA (University Western Australia) en Australie :
<https://aed.see.uwa.edu.au/research/models/aed/>

4.5.3 Développement et simulations de modèles sur deux cas d’étude

Travail de revue bibliographique

J’ai participé à un travail de revue bibliographique portant sur la modélisation de l’eutrophisation dans les écosystèmes lacustres avec Brigitte Vinçon-Leite du LEESU (Vinçon-Leite et Casenave 2019).

Modélisation thermo-hydrodynamique

• Lac Taihu

Un modèle, appelé WCCM (pour Wave Current Coupled Model), a été développé pour la simulation thermo-hydrodynamique du lac Taihu (Wu, Qin et al. 2022). Ce modèle est composé d’équations hydrodynamiques (équation de continuité et équations de moments) couplées au modèle de vagues SWAN (Simulating WAVes Nearshore model). Ce couplage permet de rendre compte de l’effet des vagues sur les vitesses des courants et sur la hauteur d’eau au travers d’un terme de contraintes radiatives. Les simulations issues du modèle WCCM ont été validées par comparaison avec les données d’hauteur d’eau et de courant relevées en plusieurs points du lac (voir figure 4.5).

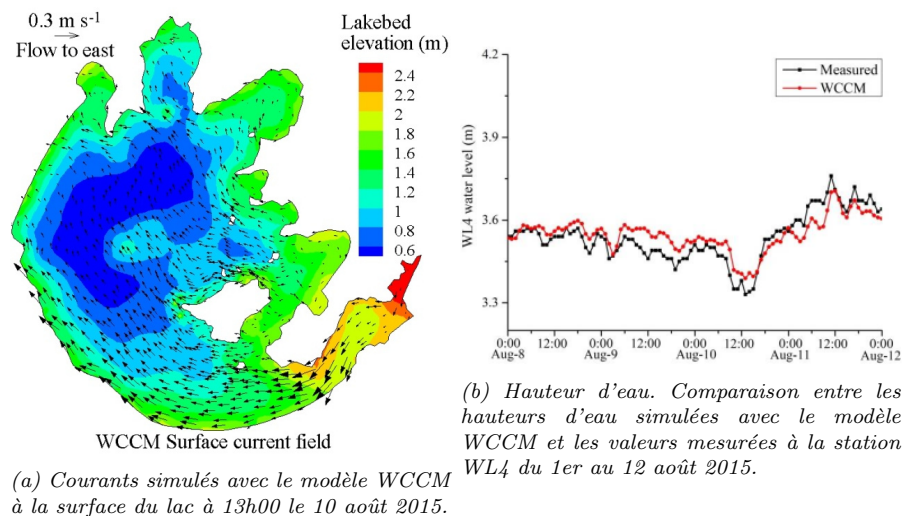


FIGURE 4.5 – Lac Taihu. Simulation thermo-hydrodynamique obtenue avec le modèle WCCM (Wave Current Coupled Model). Figures issues de (Wu, Qin et al. 2022).

Le modèle WCCM a ensuite été couplé avec une équation de transport des sédiments en suspension dans la colonne d’eau. Ce modèle, appelé WCCM-CSTM (pour Cohesive Sediment Transport Model), a été configuré sur le lac Taihu et validé par comparaison avec des données réelles (Wu, Casenave et al. 2022). Il a été montré que le modèle pouvait simuler de manière précise l’évolution de la concentration des sédiments en suspension dans la colonne d’eau, et ce même lors des périodes de forte turbidité (voir figure 4.6).

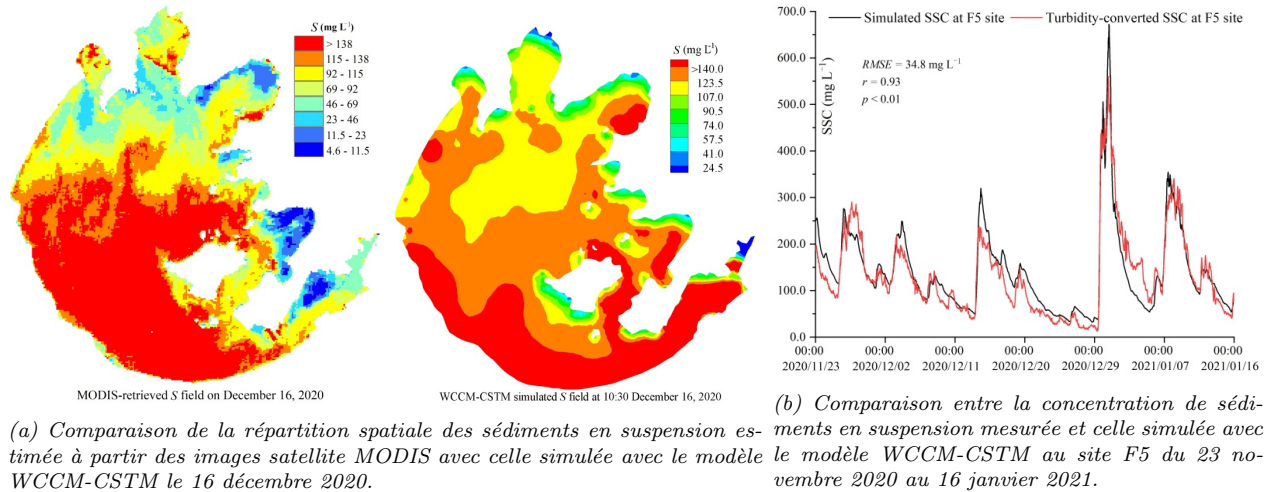


FIGURE 4.6 – Lac Taihu. Simulation de l'évolution spatio-temporelle des sédiments obtenue avec le modèle WCCM-CSTM (Wave Current Coupled Model - Cohesive Sediment Transport Model). Figures issues de (Wu, Casenave et al. 2022).

Un modèle hydrodynamique de type “shallow water” 2D (modèle 3D moyenné dans la direction verticale) a également été configuré sur le cas d'étude du lac Taihu dans le cadre de la thèse de Joseph Luis Kahn Casapia. En effet, le lac Taihu étant très étendu (2338 km²) et de faible profondeur (profondeur maximale de 2.6m), l'approximation “shallow water” est tout à fait adaptée à ce cas d'étude. C'est le logiciel SW2D qui a été utilisé dans ce cas.

• Lac de Champs-sur-Marne

Dans le cadre de la thèse de Francesco Piccioni (Piccioni 2021), les suites logicielles Delft3D (module FLOW) et TELEMAC3D ont été configurées et calibrées (par des méthodes essai-erreur) sur le lac. Les résultats de simulation ont été validés par comparaison avec les données de température relevées en plusieurs points du lac et en plusieurs profondeurs (voir figure 4.7 pour un exemple).

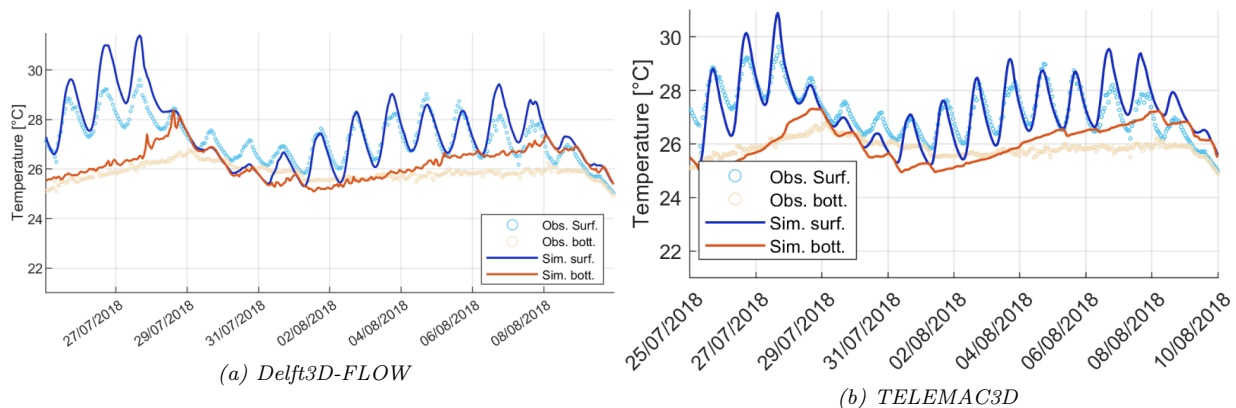


FIGURE 4.7 – Lac de Champs-sur-Marne. Simulation de l'évolution de la température de l'eau en trois profondeurs au point B pendant l'été 2018 obtenue avec deux logiciels différents. Figures issues du manuscrit de thèse de F. Piccioni (Piccioni 2021).

Le modèle Delft3D-FLOW a ensuite été utilisé pour effectuer une simulation rétrospective sur près de 60 ans (de 1960 à 2017) de la température du lac et étudier l'impact du changement climatique sur le régime thermique du lac (voir Piccioni, Casenave, B. Lemaire et al. 2021). Ces travaux ont

confirmé que les écosystèmes lacustres, notamment les petits lacs peu profonds, étaient très sensibles au changement climatique et que les périodes (dans le temps) et les zones (dans l'espace) du lac où les conditions favorables (en termes de régime thermique) à la prolifération des cyanobactéries étaient réunies étaient de plus en plus fréquentes et grandes respectivement (voir figure 4.8).

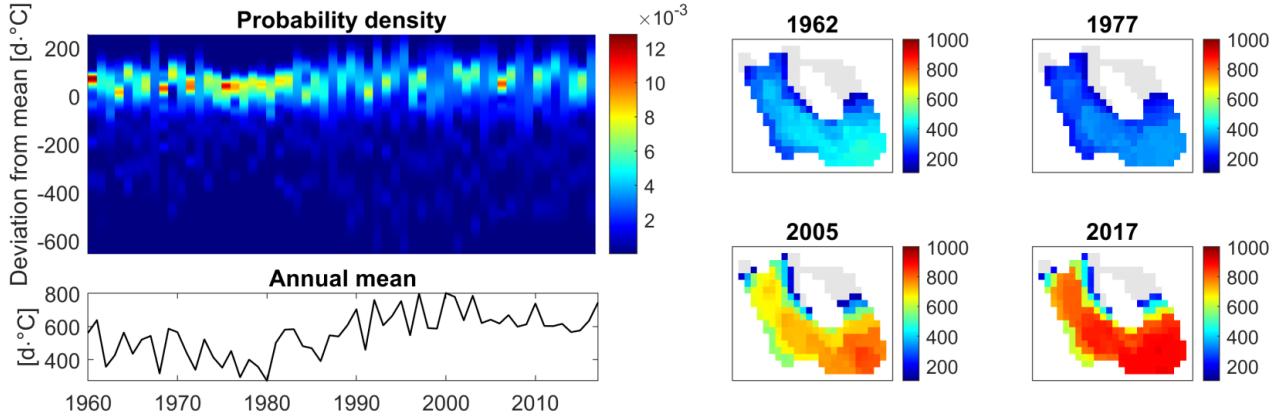


FIGURE 4.8 – Lac de Champs-sur-Marne. Étude rétrospective de 1960 à 2017, à l’aide du modèle Delft3D-FLOW. Analyse spatiale de la stratification. A gauche : Densité de probabilité des “degrés jour de croissance” durant la stratification sur le domaine de simulation au cours du temps. A droite : exemples de distributions spatiales de la moyenne annuelle des “degrés jour de croissance” durant la stratification. Les cellules grises correspondent aux zones où le lac est stratifié moins de 10 jours par an. Les figures sont issues de (Piccioni, Casenave, B. Lemaire et al. 2021).

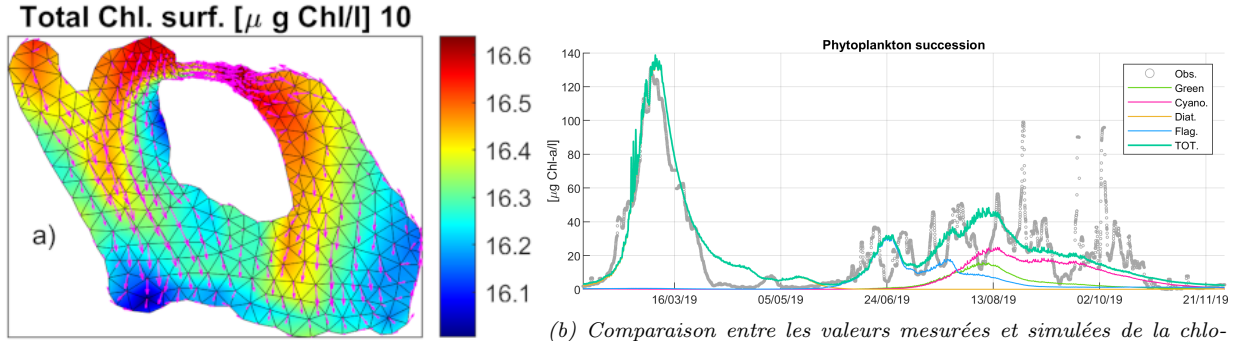
Modélisation de l'écosystème lacustre

• Lac Taihu

Dans le cadre de sa thèse, Joseph Luis Kahn Casapia a contribué à l’écriture du code du logiciel opérationnel SW2D : il a travaillé sur l’implémentation d’un système d’équations d’advection-diffusion-réaction et des conditions aux limites associées au niveau des rivières pour la simulation de traceurs passifs utilisés pour la dynamique de l’écosystème. Les équations implémentées (et notamment le terme de réaction) sont basées sur le modèle WASP (Water Analysis Simulation Program).

• Lac de Champs-sur-Marne

Dans le cadre de la thèse de Francesco Piccioni (Piccioni 2021), deux modèles écologiques ont été configurés et appliqués sur le cas d’étude du lac de Champs-sur-Marne : le modèle couplé Delft3D-FLOW-BLOOM et un modèle configuré à partir de la librairie biogéochimique Aquatic EcoDynamics (AED) couplé avec le modèle thermo-hydrodynamique TELEMAC-3D. Les simulations issues de ces deux modèles ont été comparées les unes aux autres et discutées (figure 4.9). L’enjeu est de parvenir à bien représenter les proliférations cyanobactériennes ainsi que la succession des populations phytoplanctoniques. La calibration essai-erreur ayant donnée des résultats encourageant, une étape de calibration automatique devra être effectuée prochainement.



(a) Répartition spatiale de la chlorophylle totale et de la vitesse des courants à la surface du lac à midi le 6 août 2018.

(b) Comparaison entre les valeurs mesurées et simulées de la chlorophylle totale et de la teneur en chlorophylle des quatre groupes de phytoplancton simulés de février à novembre 2019.

FIGURE 4.9 – Lac de Champs-sur-Marne. Simulation écologique obtenue avec le modèle Telemac3D-AED. Figures issues de (Piccioni 2021).

Collaborations

Mes travaux de recherche portant sur le couplage et la simulation de modèles hydro-écologiques pour l'étude de la dynamique des cyanobactéries ont été initiés lors mon séjour au NIGLAS en Chine. Puis ils se sont poursuivis dans le cadre du projet ANSWER que j'ai coordonné, et des thèses de Francesco Piccioni (Piccioni 2021) et de Joseph Luis Kahn Casapia en collaboration avec le LEESU et LEMON en particulier.

Les travaux de F. Piccioni portant sur l'hydrodynamique ont été présentés dans plusieurs conférences (Piccioni, Hong, Plec et al. 2018; Piccioni, B. Lemaire et al. 2019; Vinçon-Leite, Piccioni et al. 2018). Un premier papier portant sur l'impact du changement climatique sur la thermique du lac Champs-sur-Marne a été publié dans Earth System Dynamics (ESD) (Piccioni, Casenave, B. Lemaire et al. 2021). Quant aux résultats de simulation écologique du lac, ils ont été présentés en conférence (Piccioni, Hong, B. Lemaire et al. 2018; Piccioni, Vinçon-Leite et al. 2018) et plus en détails dans le manuscrit de thèse de F. Piccioni (Piccioni 2021).

Les travaux de J. Kahn Casapia ont été présentés en conférences (Casenave, Rousseau et al. 2018; Guilherme Caldas Steinstraesser et al. 2021; Kahn Casapia et al. 2020).

Mes travaux de modélisation en collaboration avec le NIGLAS ont été publiés dans Geoscientific Model Development (Wu, Qin et al. 2022). Un second article a été soumis dans Water Resources Research (Wu, Casenave et al. 2022).

Identification et calibration de modèles

“However, even if all parameters are known in a model from the literature, calibrating the model is usually required because the biological parameters are only known within ranges. Several sets of parameters are tested by calibration and the various model outputs of state variables are compared with measured or observed values of the same state variables. The parameter set that gives the best agreement between model outputs and measured state variables is chosen.”

(Jorgensen et al. 2001)

Sommaire

5.1 Introduction	56
5.2 Identification de modèles de Volterra	57
5.3 Identification d’un modèle de la cinétique de fermentation alcoolique	60
5.4 Calibration d’un modèle de cristallisation de crème glacée	62
5.5 Calibration du modèle thermo-hydrodynamique FVCOM	64
5.6 Calibration de modèles écologiques avec l’ABC random forest	67

5.1 Introduction

Les travaux que j’ai regroupés dans ce chapitre contribuent tous à l’identification ou à la calibration de modèles. Dans les deux cas, l’objectif est de déduire des données des informations concernant certains éléments d’un modèle dont on a fixé la structure de manière plus ou moins fine.

Dans le cas de l’identification de modèles, l’objectif est d’identifier un ou plusieurs éléments d’un modèle dont on connaît uniquement la nature. Dans les travaux auxquels j’ai contribué, il s’agissait d’identifier des fonctions et/ou des opérateurs de convolution, en se donnant une structure de modèle. Les objectifs de l’identification peuvent être variés. Il peut s’agir d’obtenir un modèle permettant d’aboutir à des simulations proches de la réalité. Mais on peut également vouloir acquérir de la connaissance sur un processus qui est représenté dans le modèle par un terme dont l’expression fait justement l’objet de l’identification (la fonction ou l’opérateur dans mon cas). Enfin, lorsque la

structure du modèle est très générique, l’objectif peut être d’obtenir un modèle approché ayant une structure intéressante (comme dans le cas des régressions pour ne citer qu’un exemple très simple) permettant l’application de méthodes d’intérêt. Dans les travaux que je vais présenter, j’ai cherché à exploiter la structure du modèle et la nature des objets à identifier pour simplifier l’identification qui peut être difficile, du fait du nombre d’éléments à identifier et/ou du manque de connaissance sur le système. Ma démarche consiste plus précisément à décomposer le problème en sous-problèmes plus simples à résoudre. Dans ces travaux, les modèles que je considère sont par contre relativement simples en termes de nombres de variables et ne sont pas spatialisés, ce qui me permet notamment de développer mes propres codes de simulation et de manipuler les modèles librement.

Les modèles que j’ai cherché à calibrer étaient d’une autre nature. Il s’agit de modèles thermo-hydro-écologiques (voir paragraphe 4.5), qui sont spatialisés et dont les simulations sont obtenues à l’aide de logiciels de simulation tels que ceux mentionnés au paragraphe 4.5.2. Même lorsque le code est open-source, il est généralement difficile ou fastidieux de le modifier, comme on pourrait vouloir le faire par exemple pour paramétrer un terme en vue de mieux l’identifier. Généralement le modèle est donc utilisé comme une boîte noire, car même si les équations codées sont documentées, la structure du modèle est difficilement exploitable. L’objectif de la calibration est de trouver des valeurs de paramètres qui vont permettre de se rapprocher aux plus près de données observées. Ce qui m’intéresse alors est d’obtenir un modèle fiable, qui permet d’expliquer les données observées, et, dans le meilleur des cas qui permet de faire de la prédiction. Les modèles que j’ai cherché à calibrer comprennent généralement beaucoup de paramètres, ce qui m’a amené à m’intéresser à l’analyse de sensibilité. Cette étape permet généralement de classer les paramètres par ordre d’importance par rapport à leur impact sur les sorties d’intérêt. En m’appuyant sur ce classement, j’ai pu effectuer la calibration en plusieurs étapes et identifier un nombre réduit de paramètres simultanément à chacune d’entre elles. Vu le nombre de paramètres à calibrer il est en effet illusoire de penser pouvoir s’affranchir de cette étape, même si les méthodes d’identification sont de plus en plus efficaces et la puissance de calcul de plus en plus grande.

Dans ce chapitre, je vais donc vous présenter les travaux auxquels j’ai contribué sur cette thématique :

- l’identification de modèles de Volterra
- l’identification d’un modèle de fermentation alcoolique
- la calibration d’un modèle de cristallisation de crème glacée
- la calibration d’un modèle hydrodynamique de lac
- la calibration d’un modèle écologique de lac

5.2 Identification de modèles de Volterra

Le problème

On considère les modèles dynamiques de la forme générale :

$$H(\partial_t)x = f(x) + u, \tag{5.1}$$

où f est une fonction non linéaire (opérateur statique), $H(\partial_t)$ est un opérateur dynamique linéaire de fonction de transfert H et x , u sont des trajectoires de la variable $t \in [0, T]$ et à valeurs dans \mathbb{R} .

Le problème considéré consiste à identifier les opérateurs $H(\partial_t)$ et f à partir de données potentiellement bruitées \tilde{x} , \tilde{u} , ce que l’on exprimera sous forme d’un problème de minimisation :

$$\min_{H(\partial_t), f} \|H(\partial_t)\tilde{x} - f(\tilde{x}) - \tilde{u}\|^2, \tag{5.2}$$

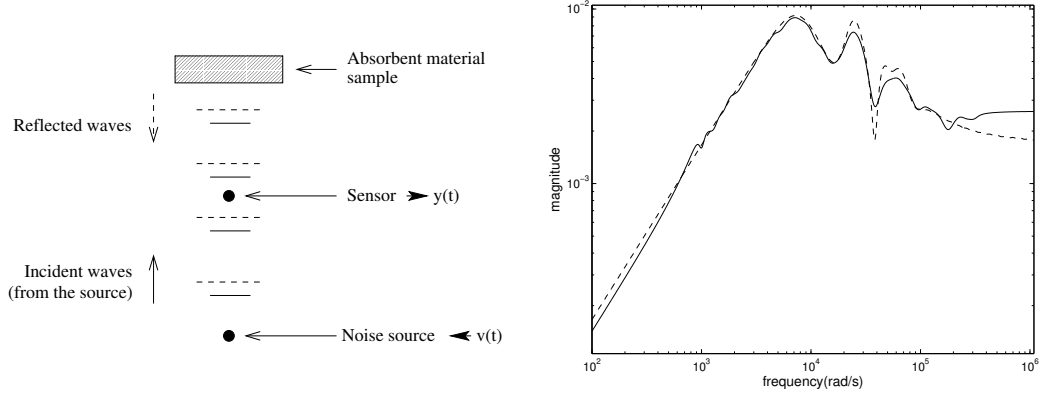


FIGURE 5.1 – A gauche : Processus expérimental de mesure pour l’identification de l’impédance d’un matériau absorbant - A droite : Réponses fréquentielles (gains) des opérateurs d’impédance théorique (- -) et identifié (-) sur 4 décades

avec $\tilde{x} = x + \varepsilon_1$, $\tilde{u} = u + \varepsilon_2$, (x, u) étant solution de (5.1) et ε_i des bruits “suffisamment petits”.

La principale difficulté d’un tel problème provient du couplage entre l’opérateur dynamique $H(\partial_t)$ et l’opérateur statique f via l’équation (5.1). Cette difficulté est renforcée lorsque $H(\partial_t)$ est non rationnel (ce qui est en général le cas), ou lorsque f est fortement non linéaire (par exemple non dérivable) et qu’aucune information n’est disponible la concernant. Sur la base de la représentation diffusive, qui est très vite apparue comme bien adaptée à ce genre de problèmes, nous avons proposé et testé plusieurs méthodes d’identification, toutes basées sur une paramétrisation via le γ -symbole de l’opérateur $H(\partial_t)$.

Les méthodes et résultats

La réalisation diffusive (voir paragraphe 4.2.2) d’un opérateur $H(\partial_t)$ s’écrit linéairement par rapport à son γ -symbole μ ; on a en effet : $H(\partial_t)x = A_x\mu$, où $A_x : \mu \rightarrow \langle \mu, \psi_x \rangle$ est un opérateur linéaire connu. Du fait du caractère diffusif de la représentation d’état, cette formulation peut être approchée au moyen d’un nombre de paramètres qui est raisonnable du point de vue numérique mais qui permet tout de même une réalisation précise de l’opérateur $H(\partial_t)$. En substituant à l’opérateur $H(\partial_t)$ son γ -symbole, on peut donc effectuer une identification directement en domaine temporel d’un nombre réduit de paramètres inconnus, suffisant pour une bonne précision.

Diverses méthodes, variantes les unes des autres, ont ensuite découlé de cette idée de base :

- **Premier cas** : f est connue et on identifie alors uniquement l’opérateur $H(\partial_t)$.

Le problème (5.2) s’écrit alors :

$$\min_{\mu} \|A_{\tilde{x}}\mu - f(\tilde{x}) - \tilde{u}\|^2. \quad (5.3)$$

Via la représentation diffusive, on est donc ramené à un problème de moindres carrés classique que l’on résout par simple pseudo-inversion, la solution étant donnée par $\mu^* = A_{\tilde{x}}^\dagger(f(\tilde{x}) + \tilde{u})$ où $A_{\tilde{x}}^\dagger$ est le pseudo-inverse de $A_{\tilde{x}}$. Après validation sur des exemples “test”, la méthode a été appliquée sur un exemple concret, à savoir l’identification (à partir de données simulées) de l’opérateur d’impédance pour un modèle de paroi poreuse (Gasser 2003) (voir figure 5.1).

- **Deuxième cas** : on identifie simultanément $H(\partial_t)$ et f .

Pour cela, on paramétrise la fonction f au moyen d’une base (\mathbf{f}_i) de fonctions d’un espace $E \supset f$

convenable ; on a alors $f = \sum_i a_i \mathbf{f}_i$. Avec pour paramètres inconnus le γ -symbole μ et les coefficients a_i de décomposition de f dans la base, le problème (5.2) s'écrit :

$$\min_{(\mu, a)} \|G_{\tilde{x}, \tilde{u}}(\mu, a) - \tilde{u}\|^2, \quad (5.4)$$

avec $a = (a_i)$ et $G_{\tilde{x}, \tilde{u}}$ l'opérateur linéaire défini sur tout (μ, a) par : $G_{\tilde{x}, \tilde{u}}(\mu, a) = A_x \mu - \sum_i a_i \mathbf{f}_i$. La solution s'obtient là encore par simple pseudo-inversion, cette fois-ci de l'opérateur $G_{\tilde{x}, \tilde{u}}$. L'identification de f étant ici faite simultanément à celle de $H(\partial_t)$ il est impossible d'adapter sa paramétrisation en fonction de son allure "générale" qui est inconnue. Il est donc souvent nécessaire de prendre un nombre de a_i assez grand, ce qui rend l'estimation sensible aux bruits. Les résultats obtenus sont néanmoins bons, en particulier dans le cas d'une fonction f régulière ou dont on connaît approximativement l'allure. La méthode a été testé sur un exemple d'identification d'un modèle d'un composant électrique (Rumeau et al. 2006) développé au laboratoire LAPLACE à Toulouse (voir figure 5.2 pour les résultats obtenus).

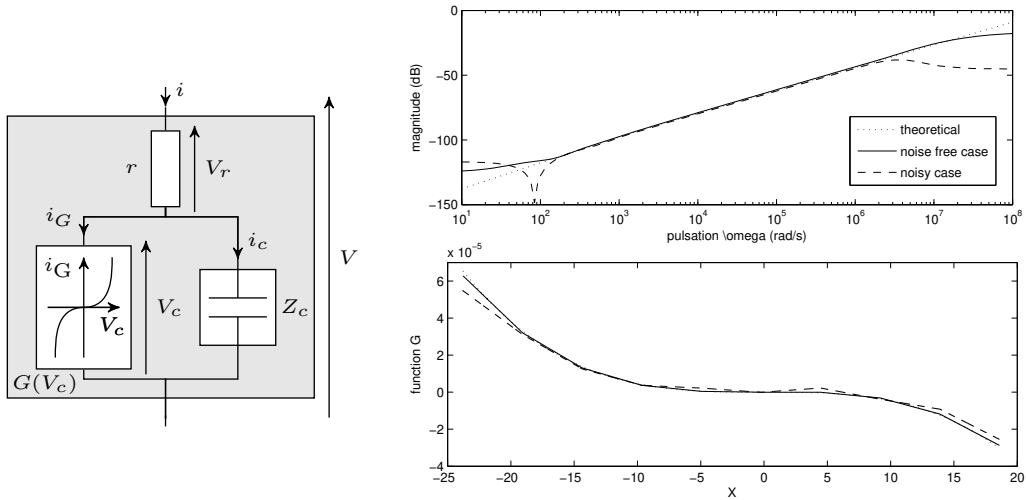


FIGURE 5.2 – A gauche : Structure du modèle d'identification du composant électrique à identifier - En haut à droite : Réponses fréquentielles (gains) de l'opérateur convolutif $Z_c(\partial_t)$ et des opérateurs identifiés - En bas à droite : Fonction non linéaire $G(V_c)$ (second membre du modèle).

- **Troisième cas : on identifie séparément $H(\partial_t)$ et f .**

Afin de découpler l'identification de f de celle de $H(\partial_t)$, j'ai cherché à exploiter la propriété caractéristique des opérateurs statiques, à savoir : $f(x)(t) = f(y)(\tau)$ si $x(t) = y(\tau)$. J'ai donc proposé une transformation opératorielle de l'équation (5.1), basée sur l'application de l'opérateur de différences \mathfrak{D} défini par :

$$\mathfrak{D}(y) : (t, \tau) \rightarrow \mathfrak{D}(y)(t, \tau) = y(t) - y(\tau). \quad (5.5)$$

Cet opérateur permet de supprimer le terme non linéaire $f(x)$ de l'équation transformée, sur le sous ensemble discret $\{(t, \tau) \in [0, T] \times [0, T] \text{ tels que } x(t) \simeq x(\tau)\}$ de couples (t, τ) en lesquels le terme non linéaire prend des valeurs voisines (i.e. $f(x(t)) \simeq f(x(\tau))$). On peut ainsi aisément identifier l'opérateur $H(\partial_t)$ seul (comme dans le premier cas), et ensuite s'intéresser à l'identification de la fonction f . Ainsi, l'allure de f sera connue avant son identification et une expression mathématique adaptée pourra être choisie.

Cette méthode a été appliquée et validée sur deux exemples : un modèle de flamme sphérique (Joulin 1985) et le modèle du composant électrique considéré précédemment (Rumeau et al. 2006).

Collaborations

Ces travaux ont été initiés dans le cadre de ma thèse de doctorat, sous la direction de Gérard Montseny (LAAS-CNRS). J'ai continué ensuite, après mon recrutement à l'INRAE à travailler sur le sujet et ai notamment finalisé les résultats de la troisième méthode d'identification.

La première méthode a été présentée en conférence (Casenave et Gérard Montseny 2007) et ensuite publiés dans un chapitre d'ouvrage (Casenave et Gérard Montseny 2009c). Un article de revue présentant la méthode a été publié dans IET Control Theory & Applications (Casenave et Gérard Montseny 2011). La seconde méthode a été présentée en conférence à l'IFAC World Congress 2008 (Casenave et Gérard Montseny 2008) et ensuite publiée dans Automatica (Casenave 2011). Les résultats obtenus avec la troisième méthode ont été présentés en conférence (Casenave et Gérard Montseny 2009a; Casenave et Gérard Montseny 2009b) et publiés dans International Journal of Robust and Nonlinear Control (Casenave, E. Montseny et Gérard Montseny 2017). Ces trois méthodes ont également été présentées en conférence au 4th IFAC Symposium on System Structure and Control (Casenave 2010).

5.3 Identification d'un modèle de la cinétique de fermentation alcoolique

Le problème

Dans le cadre de mes travaux sur la fermentation alcoolique, un modèle de la cinétique principale du processus a été proposé (voir paragraphe 3.5). Dans ce modèle de 6 équations différentielles ordinaires (décrites en Figure 3.7b), les expressions mathématiques de plusieurs fonctions sont inconnues et doivent donc être identifiées. Il s'agit de la fonction d'allocation de l'azote f , de la fonction d'activité des transporteurs ν_{ST} et des fonctions de dégradation et de réparation des transporteurs d et t . Outre ces fonctions, plusieurs paramètres doivent également être calibrés.

Les données

15 fermentations ont été faites, certaines avec ajout d'azote en cours de fermentation et d'autres sans. Toutes les fermentations ont été réalisées dans des réacteurs de 1L à une température constante (régulée) de 24°C et avec une concentration de sucre initiale S_{init} de 200g.L⁻¹. Les fermentations diffèrent les unes des autres par la quantité d'azote initiale, et le temps auquel l'azote est ajoutée. Lorsqu'il y a ajout d'azote, la quantité d'azote ajoutée est toujours égale à 0.063g.L⁻¹.

On disposait des données de suivi des 15 fermentations, à savoir la mesure de la population de levure et la mesure de la quantité de CO₂ dégagé au cours du temps. Pour une fermentation uniquement, on disposait également de quelques mesures d'azote.

A partir des mesures de CO₂, on déduit des estimations (mesures indirectes) de : (1) la vitesse de dégagement du CO₂, c'est à dire de $\frac{dCO_2}{dt}$, (2) la concentration en sucre : $S(t) = S_{init} - 2.17CO_2(t)$ (basée sur le rendement éthanol), (3) la concentration en éthanol $E(t) = 0.464(S_{init} - S(t))$.

La méthode

Pour identifier l'ensemble des paramètres et fonctions inconnues du modèle, nous avons découpé le problème en sous-problèmes plus simples à résoudre en exploitant la structure du modèle et les données disponibles. Ainsi un nombre restreint de paramètres et/ou fonctions étaient à identifier à chaque étape.

En effet, ayant accès à des mesures indirectes de S et de E , ces variables peuvent être considérées dans un premier temps comme des variables de forçage externes dans le modèle. Le sous-système

composé des équations de N et de X n'étant lié aux autres équations que via la variable E et la fonction $f(S)$, nous pouvons considérer dans un premier temps le sous-système indépendant :

$$\begin{aligned}\frac{dN}{dt} &= -\mu_N(N, E^{mes})X \\ \frac{dX}{dt} &= k_1\mu_N(N, E^{mes})Xf(S^{mes})\end{aligned}\tag{5.6}$$

avec S^{mes} et E^{mes} obtenus par interpolation des mesures "indirectes" de S et de E respectivement. Une première étape consistera alors à identifier les paramètres et la fonction f à partir de ce sous-système plus simple.

Cette démarche nous a finalement amenés à considérer les étapes d'identification suivantes :

- **Étape 1** : identification des paramètres de la fonction μ_N , de la condition initiale X_{init} et de la fonction $f(S)$ à partir du modèle réduit (5.6) et des données des 3 fermentations sans ajout d'azote et celle pour laquelle on a des mesures de N . On cherche à minimiser la différence entre simulations et mesures de population de levures et d'azote quand elles sont disponibles.

- **Étape 2** : identification de l'équation de T_r . Comme cette équation est liée à l'équation en N_{T_r} , nous n'allons pas l'identifier sous sa forme actuelle, mais dans un premier temps sous une forme simplifiée dans laquelle le terme inconnu $-d(E)T_r + t(N_{T_r}, S)$, est remplacé par un terme de la forme $g(E)T_r$. On considère pour cela le sous-système composé des équations de N , X et T_r (avec son équation simplifiée) :

$$\begin{aligned}\frac{dN}{dt} &= -\mu_N(N, E^{mes})X \\ \frac{dX}{dt} &= k_1\mu_N(N, E^{mes})Xf(S^{mes}) \\ \frac{dT_r}{dt} &= \mu_N(N, E^{mes}) [k_2(1 - f(S^{mes})) - k_1T_rf(S^{mes})] + g(E^{mes})T_r\end{aligned}\tag{5.7}$$

A partir de ce système, nous allons chercher à identifier la fonction $g(E)$ sous la forme d'un polynôme de degré 4 ainsi que les paramètres k_1 et k_2 et la valeur initiale de T_r , à savoir $T_{r,init}$. On cherche ici à minimiser la différence entre simulations et mesures de la vitesse de CO_2 dégagé.

- **Étape 3** : : identification de la fonction ν_{ST} à partir des mesures de S et de l'équation de S :

$$\frac{dS}{dt} = -2.17\nu_{ST}(S, E)T_rX \Leftrightarrow \nu_{ST}(S, E(S)) = -\frac{1}{2.17T_rX} \frac{dS}{dt}\tag{5.8}$$

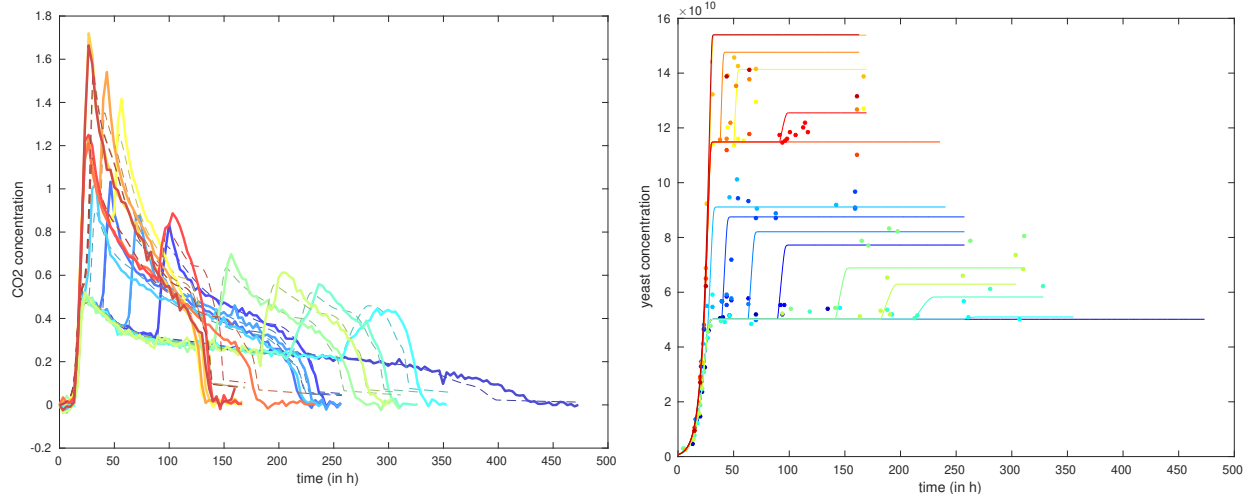
- **Étape 4** : Identification des fonctions d et t telles que $-d(E)T_r + t(N_{T_r}, S) = g(E)T_r$.

Les résultats

Le modèle identifié a été simulé pour les 15 fermentations et les simulations ont été comparées avec les données. Les résultats (voir figure 5.3) sont bons dans le sens où le modèle permet de bien représenter la recroissance des levures et la reprise d'activité après l'ajout d'azote. De plus le modèle se comporte bien sur l'ensemble des fermentations, quel que soit la valeur de l'azote initial ou le temps de l'ajout, ce qui n'était pas le cas des modèles précédemment publiés dans la littérature.

Collaborations

Ces travaux ont été faits en collaboration avec l'UMR SPO, et en particulier avec Marc Pérez et Jean-Roch Mouret. Trois stages de master (Souad Sekkat en 2013, Noémie Barillot en 2017 et Carlos Santana en 2018) ont permis d'avancer sur le sujet. Après l'acceptation du projet ANR STARWINE, cette modélisation a été reprise par le TBI-INSA, partenaire du projet chargé de la modélisation de la synthèse des arômes.



(a) Vitesse de dégagement du CO_2 : données en trait plein, et simulations avec les tirets. (b) Concentration de la population de levures : données représentées par les points et simulations en trait plein.

FIGURE 5.3 – Calibration du modèle de la cinétique principale de la fermentation alcoolique avec ajout d’azote. Comparaison entre données et simulations.

5.4 Calibration d’un modèle de cristallisation de crème glacée

Le problème

On s’intéresse ici à la calibration d’un modèle de procédé industriel de cristallisation de crème glacée. L’objectif est d’obtenir un modèle calibré robuste et le plus simple possible pouvant ensuite être utilisé pour faire de la commande (voir paragraphe 6.2.1). En effet, un enjeu important consiste à contrôler la qualité (dureté, texture) et les propriétés (viscosité) de la crème glacée, qui dépendent de la distribution de taille des cristaux de glace (CSD pour “cristal size distribution”).

Ce qui nous intéresse est le comportement entrée-sortie du système, la commande considérée étant la température d’évaporation T_e et la sortie à contrôler la température de saturation T_{sat} . La calibration est donc effectuée avec cet objectif en tête, et sera considérée satisfaisante si ce comportement entrée-sortie est bien simulé par le modèle.

Le modèle

Le procédé de cristallisation considéré est un réfrigérateur cylindrique qui se comporte globalement comme un réacteur de type piston (voir figure 5.4). L’évolution de la CSD peut être décrite au moyen d’une équation de bilan de population (Costa et al. 2007 ; Randolph 1971) prenant en compte les phénomènes de nucléation, croissance et cassure des cristaux :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \underbrace{-D\Psi}_{\text{transport}} - \underbrace{\frac{\partial(G\Psi)}{\partial L}}_{\text{croissance}} + \underbrace{N\delta_{(L-L_c)}}_{\text{nucléation}} + \underbrace{B}_{\text{cassure}} \quad (5.9)$$

avec Ψ le nombre de cristaux par mètre (de réfrigérateur) par mètre cube de solution à la sortie du réfrigérateur, L la variable de taille des cristaux, L_c la taille des cristaux initiale (après nucléation), D le taux de dilution, G le taux de croissance, N le terme de nucléation et B celui de “cassure” des cristaux.

Un modèle réduit de cette EDP a ensuite été considéré, afin de faciliter la synthèse de la loi de commande. Pour l’obtenir, nous avons appliqué la méthode des moments. Cette méthode (Chris-

tofides 2002) consiste à multiplier l'équation de bilan de population (5.9) par L^j pour $j = 1 : n$ et à l'intégrer ensuite entre $L = 0$ et $L = \infty$ ce qui permet d'obtenir un ensemble d'équations différentielles ordinaires, les équations des moments. Il faut ensuite choisir un nombre fini de moments de sorte que le système considéré soit fermé, c'est à dire qu'il ne dépende pas des moments d'ordre supérieur. Dans notre cas, les équations des quatre premiers moments sont indépendantes des équations d'ordre supérieur de sorte que le système que nous considérons est finalement réduit à un ensemble de 4 EDOs :

$$\begin{aligned}
 \frac{dM_0}{dt} &= -DM_0 + N + BM_1 \\
 \frac{dM_1}{dt} &= -DM_1 + GM_0 + NL_c + c_1BM_2 \\
 \frac{dM_2}{dt} &= -DM_2 + 2GM_1 + NL_c^2 + c_2BM_3 \\
 \frac{dM_3}{dt} &= -DM_3 + 3GM_2 + NL_c^3
 \end{aligned}
 \tag{5.10}$$

où $M_j(t) = \int_0^\infty L^j \Psi(L, t) dL$ est le moment d'ordre j de la CSD, $\mu = \mu(M_3, T, N_{\text{scrap}})$, $G = G(M_3, T)$, $N = N(M_3, T_e)$, $B = B(N_{\text{scrap}})$ et les constantes $c_1 = 2^{\frac{2}{3}} - 1$ et $c_2 = 2^{\frac{1}{3}} - 1$.

A ce système, une équation additionnelle de bilan énergétique a été ajoutée dans laquelle seuls les moments d'ordre 3 ou moins sont impliqués :

$$\frac{dT}{dt} = D(T_0 - T) + K_2(T_e - T) + N_{\text{scrap}}^2 K_3 \mu + K_1(3GM_2 + NL_c^3),
 \tag{5.11}$$

où T et T_0 sont les températures dans le réfrigérateur et à l'entrée du réfrigérateur respectivement, T_e la température d'évaporation et N_{scrap} la vitesse de rotation du racleur.

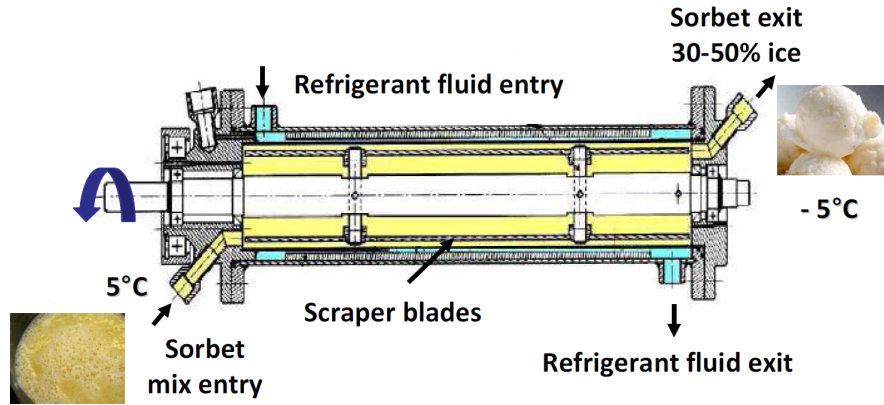


FIGURE 5.4 – Schéma représentant le procédé de cristallisation de la crème glacée.

La calibration

Un ensemble de 7 paramètres a été considéré pour la calibration du modèle. Une analyse de sensibilité a été réalisée. Deux paramètres parmi les 7 ont été identifiés comme influant majoritairement sur la valeur de la température de saturation. Il s'agit du coefficient de transfert de chaleur par convection h_e , et du coefficient de dissipation visqueuse χ .

Ces paramètres ont ensuite été calibrés à partir d'un ensemble de données issues de 12 expérimentations. Une calibration a été faite sur chacun des jeux de données séparément. En effet, certains paramètres du modèle dépendent de phénomènes ou de conditions environnementales qui ne sont pas pris en compte dans le modèle et peuvent donc varier d'une expérience à l'autre. Les résultats obtenus ont permis de conclure que seule la calibration des paramètres h_e et χ était nécessaire pour

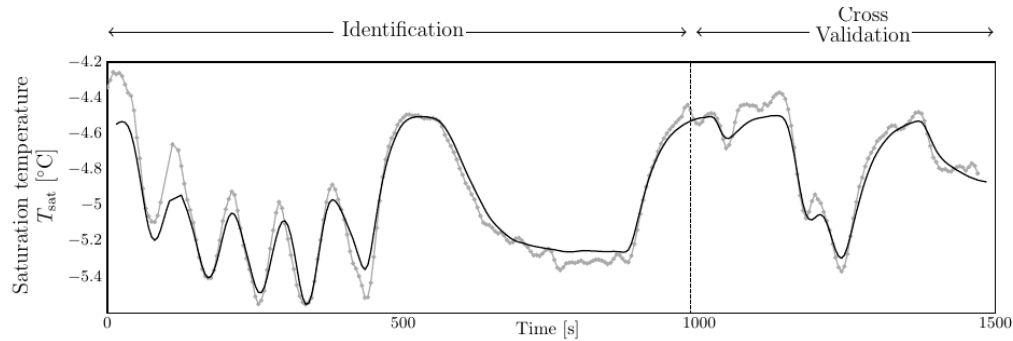


FIGURE 5.5 – Calibration du modèle réduit de cristallisation de crème glacée : comparaison des mesures avec les valeurs de température de saturation simulées le modèle (cas où $m_{fr} = 50 \text{ kg.h}^{-1}$ et $N_{scrap} = 750 \text{ rpm}$). Figure issue de (Casenave, Dochain, Alvarez, Arellano et al. 2014).

obtenir de bonnes simulations de la température de saturation (voir figure 5.5). Les valeurs de ces paramètres varient par contre d’une expérience à l’autre, ce qui devra être pris en compte dans la synthèse de la loi de commande, en utilisant par exemple des techniques de commande adaptative.

Sur la base d’hypothèses physiques, une deuxième réduction du modèle a ensuite été proposée, conduisant au final à un nouveau modèle composé uniquement de 2 EDOs. Il a en effet été montré que, pour décrire avec précision le comportement entrée-sortie du système (les variables d’entrée et de sortie étant respectivement la température d’évaporation et la température de saturation) quelles que soient les conditions, il est suffisant de considérer un modèle d’ordre réduit composé des équations de M_3 , le moment d’ordre 3 et de la température T uniquement.

Collaborations

Ces travaux ont été réalisés dans le cadre du projet européen CAFÉ et initiés lors de mon post-doctorat au CESAME sous la direction de Denis Dochain (UCL, Belgique). Ils ont été réalisés en collaboration avec des chercheurs de IRSTEA Antony (Graciela Alvarez, Denis Leducq, Marcela Arellano) et de AgroParisTech (Hayat Benkhelifa, Denis Flick) qui m’ont aidé pour la compréhension du procédé (phénomènes physico-chimiques) et sur tous les aspects expérimentaux (données, mesures, conduite des expérimentations). Ces travaux ont été présentés en conférence (Casenave, Dochain, Alvarez, Benkhelifa et al. 2012) et publiés dans le journal Control Engineering Science (Casenave, Dochain, Alvarez, Arellano et al. 2014). Ces travaux ont également été détaillés dans un livrable du projet européen CAFE (Van Der Sman et al. 2013).

A noter que, bien qu’il ne soit pas question dans ces travaux de micro-organismes, les modèles utilisés sont très proches. En effet, le modèle décrivant la cristallisation de la crème glacée est une équation de bilan de population qui régit l’évolution de la densité de population de cristaux dans la glace.

5.5 Calibration du modèle thermo-hydrodynamique FVCOM

Le problème

On s’intéresse ici à la calibration du modèle thermo-hydrodynamique 3D FVCOM sur le cas d’étude du lac Taihu. L’objectif est de trouver les valeurs des paramètres du modèle qui permettent d’obtenir des simulations proches des données thermo-hydrodynamiques observées.

Dans le modèle, nous avons identifié 10 paramètres à calibrer : la constante de Smagorinsky C_s , la viscosité de turbulence K_m , le coefficient de mélange au fond, le nombre de Prandtl horizontal

Pr^h , le nombre de Prandtl vertical Pr^v , le coefficient de rugosité du fond z_0 , les coefficients du rayonnement solaire incident de courte longueur d'onde R , a et b et le coefficient de transfert à la surface C_d^w .

Les données

Nous disposons de deux jeux de données pour effectuer la calibration :

- un jeu de données collecté pendant 1 année (de mai 2001 à avril 2002) qui comprend des mesures de hauteur d'eau et de température à la surface en plusieurs points du lacs (14 stations), des mesures de débits des rivières entrantes et sortantes et des données météorologiques
- un jeu de données collecté pendant 1 mois (du 6 au 31 août 1997) lors du passage d'un typhon qui comprend des mesures de hauteur d'eau et de courants en plusieurs points du lac et des données météorologiques

L'analyse de sensibilité

Nous avons appliqué la méthode de Morris pour effectuer une analyse de sensibilité globale du modèle FVCOM. Nous avons ainsi étudié l'influence des 10 paramètres énumérés précédemment sur les différentes sorties d'intérêt du modèle, à savoir : l'élévation de la surface de l'eau, la température de surface et les trois composantes de la vitesse des courants à la surface. A partir des résultats de l'analyse de sensibilité (voir figure 5.6) nous avons proposé une stratégie de calibration composée de 4 étapes :

1. Identification de z_0 et C_d^w à partir des données d'élévation du niveau de l'eau de 2001-2002 ;
2. Identification du coefficient de mélange au fond à partir des mesures des composantes horizontales du courant en août 1997 ;
3. Identification des paramètres a , b et R à partir des données de température de 2001-2002 ;
4. Identification de Pr^h , Pr^v et C_s à partir de toutes les données disponibles

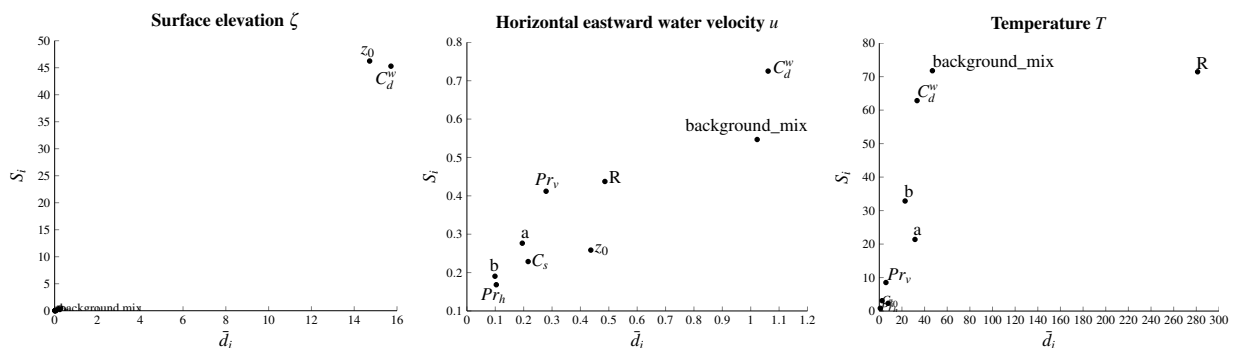


FIGURE 5.6 – Résultats de l'analyse de sensibilité globale du modèle FVCOM réalisée avec la méthode de Morris. Graphe de l'écart-type des effets élémentaires (S_i) en fonction de la moyenne de la valeur absolue des effets élémentaires (\bar{d}_i) pour trois variables de sorties : l'élévation du niveau de l'eau, la composant vers l'est de la vitesse de courant horizontale et la température de l'eau.

La calibration

Dans FVCOM, le coefficient de transfert à la surface C_d^w (qui intervient dans l'expression des tensions de cisaillement à la surface) est calculé suivant une formule issue de (Large et al. 1980).

Cependant cette formule n'est pas adaptée au cas du lac Taihu. C'est en effet une formule qui a été développée pour l'océan dans le cas de vents modérés ou forts alors que la vitesse du vent dans le lac Taihu est la plupart du temps inférieure à 11m.s^{-1} . Pendant le typhon de 1997 par exemple, la valeur maximale était d'environ $12,6\text{m.s}^{-1}$. De plus, il a été montré dans (Xiao et al. 2013) que la valeur du coefficient de transfert donnée par cette formule était sous-estimée dans le cas du lac Taihu, notamment pour les petites valeurs de vitesse de vent. A partir des données de (Xiao et al. 2013), j'ai donc cherché une expression différente que j'ai finalement choisie (après plusieurs essais) comme suit :

$$C_d^w = 10^{-3} \times \begin{cases} c_3(W - w_{lim})^3 + c_2(W - w_{lim})^2 + c_1(W - w_{lim})^1 + c_0 & \text{if } W \leq w_{lim} \\ c_0 & \text{si } w_{lim} \leq W \end{cases} \quad (5.12)$$

avec c_0, c_1, c_2, c_3 et w_{lim} des paramètres à calibrer (à l'étape 1).

Pour chacune des 4 étapes de la calibration, nous avons utilisé la méthode numérique d'optimisation de Nelder-Mead pour minimiser la somme des écarts entre les sorties simulées de FVCOM et les données au carré, en prenant soin de ne pas utiliser toutes les données et d'en garder pour la validation. Après application des 4 étapes de calibration, nous avons obtenu un jeu de paramètres à partir duquel nous avons réalisé des simulations correspondants aux périodes auxquelles nous disposons de données : 2001-2002 et 1997. Les simulations ont été comparées aux données (voir figure 5.7) : une bonne adéquation a été constatée.

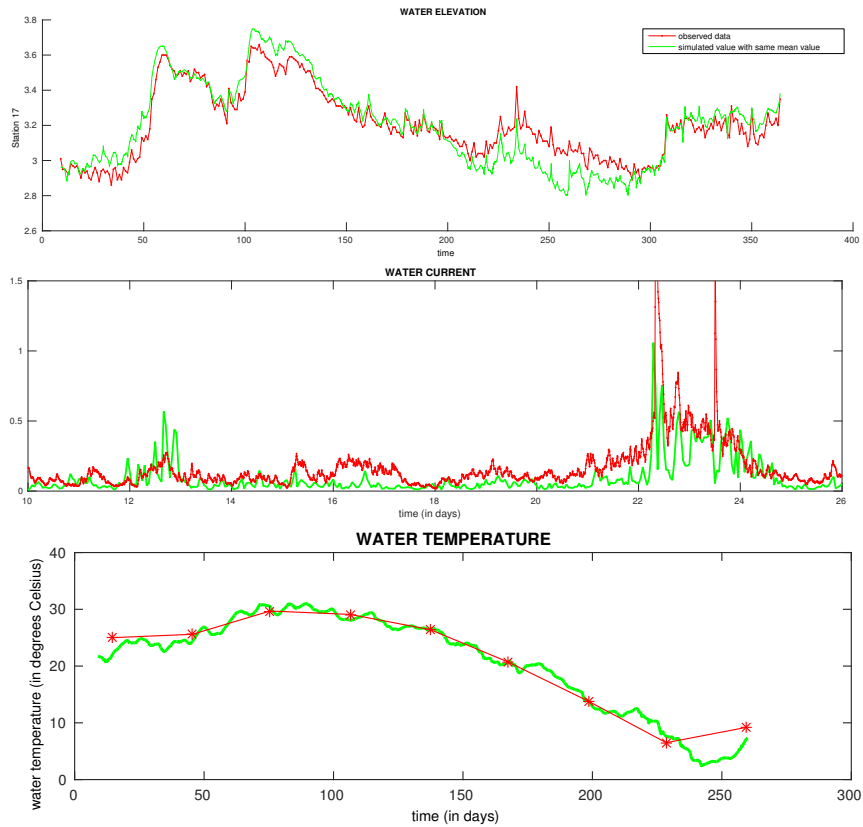


FIGURE 5.7 – Exemples de comparaison de simulations du modèle FVCOM après calibration avec les données observées d'élévation du niveau de l'eau (haut), de vitesse de courant (milieu) et de température (bas).

Collaborations

Ces travaux ont été réalisés lors de ma mission longue durée au NIGLAS (Nanjing, Chine), en collaboration avec Boqiang Qin, Tingfeng Wu, Wei Ling et Huiyun Li. Ils n’ont pour l’instant pas été publiés.

5.6 Calibration de modèles écologiques avec l’ABC random forest

Le problème

On s’intéresse ici à la calibration du modèle thermo-hydro-écologique 3D Delft3D-BLOOM sur le cas d’étude du lac de Champs-sur-Marne, un petit lac urbain peu profond de la région parisienne (en France). L’objectif est de trouver les valeurs des paramètres du modèle qui permettent d’obtenir des simulations proches des données biochimiques observées. La partie thermo-hydrodynamique a été préalablement calibrée à partir des données de température disponibles par des méthodes essai-erreur : seuls les paramètres biochimiques relatifs à la partie écologique restent à calibrer.

Ces paramètres sont au nombre de 133, et comprennent 114 paramètres liés aux processus biochimiques et 19 conditions initiales.

Les données

Une période de calibration de 16 jours (25 juillet au 10 août 2018) a été choisie ce qui correspond à un temps de simulation avec Delft3D-BLOOM raisonnable (autour de 5 minutes environ). Les variables d’intérêt considérées pour la calibration sont la chlorophylle totale, la phycocyanine et l’oxygène dissous pour lesquelles on dispose de mesures haute fréquence (toutes les 5 minutes) en un point du lac sur cette période.

La méthode ABC random forest

Nous avons choisi d’appliquer la méthode ABC random forest (Raynal et al. 2019) pour estimer les paramètres du modèle. Les méthodes ABC (Approximate Bayesian Computation) sont des méthodes d’inférence de paramètres issues des statistiques bayésiennes qui présentent l’avantage de contourner le calcul de la fonction de vraisemblance. Un jeu de simulations (souvent de grande taille) est généré à partir du modèle en échantillonnant de manière aléatoire les valeurs des paramètres selon les distributions a priori des paramètres qui ont été choisies par l’utilisateur. Ces simulations sont ensuite utilisées comme données d’apprentissage afin d’obtenir une approximation des distributions de probabilité a posteriori des différents paramètres. Cette approximation peut être obtenue de différentes façons. Dans sa version classique, la méthode ABC utilise un algorithme d’acceptation/rejet, ce qui nécessite de choisir un seuil d’acceptation souvent difficile à calibrer. Les simulations et observations doivent également être résumées en un ensemble de mesures appelées “statistiques résumées” de plus petite taille. Dans la méthode ABC random forest (Raynal et al. 2019) que nous avons choisie, une forêt aléatoire est utilisée à la place. Au prix de l’introduction de quelques paramètres définissant la structure de la forêt aléatoire, cette méthode permet de contourner le problème de définition du seuil d’acceptation et de considérer un grand nombre de statistiques résumées alors que celui-ci est limité dans le cas de la méthode ABC classique.

La calibration

La méthode ABC random forest a donc été appliquée pour calibrer le modèle 3D Delft3D-BLOOM sur la période de 16 jours mentionnée précédemment. Pour la calibration, 30000 simulations

ont été réalisées. Nous avons d’abord testé la méthode ABC standard et la méthode ABC random forest en l’appliquant de manière indépendante sur chacun des paramètres. Puis, pour prendre en compte la dépendance entre les paramètres, nous avons couplé la méthode ABC random Forest à une analyse de sensibilité réalisée en amont à partir du jeu de 30000 simulations. Une fois les paramètres à identifier triés en fonction de leur indice de sensibilité, la méthode ABC random forest a été appliquée pour chacun des paramètres, les uns après les autres, en rajoutant à chaque itération la valeur des paramètres précédemment identifiés comme statistiques résumées.

Plusieurs tests préliminaires ont été effectués pour tester l’influence des différents paramètres de la méthode sur la qualité de la calibration. Au final seule la méthode ABC random forest couplée avec l’analyse de sensibilité a permis de calibrer le modèle de manière satisfaisante, les simulations étant proches des observations. La méthode a été appliquée sur données simulées dans un premier temps puis sur les données réelles (voir figure 5.8).

A noter que pour effectuer la calibration, les statistiques résumées qui ont été proposées ont la particularité de dépendre des observations. Les 30000 simulations réalisées étant dépendantes du forçage météorologique spécifique à la période de calibration et à la localisation du lac de Champs-sur-Marne, la forêt aléatoire construite par l’ABC random forest ne pouvait de toutes façons pas être utilisée avec un autre jeu d’observations.

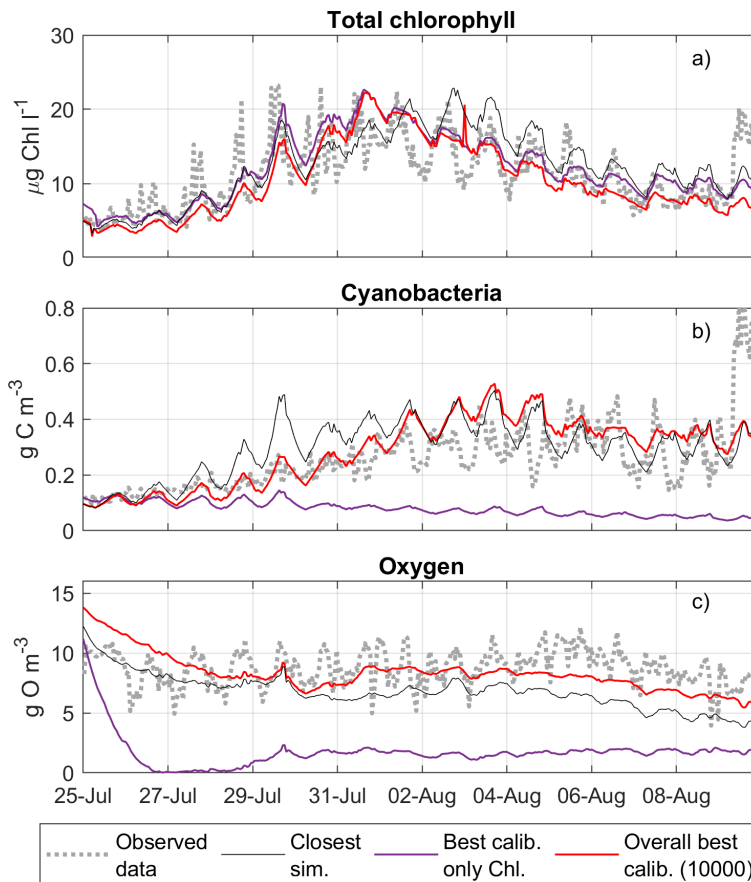


FIGURE 5.8 – Séries temporelles des concentrations en chlorophylle totale (a), en cyanobactéries (b) et en oxygène dissous (c) : données observées (lignes en pointillées grises), simulation la plus proche des données (lignes noires), meilleure simulation après calibration (lignes rouges), et meilleure simulation après calibration à partir des données de chlorophylle totale uniquement (lignes violettes). Figure issue de (Piccioni, Casenave, Baragatti, Cloez et Vinçon-Leite 2022).

Collaborations

Ces travaux ont été réalisés dans le cadre du projet ANR Franco-Chinois ANSWER en collaboration avec mes collègues de MISTEA, Meili Baragatti et Bertrand Cloez. L'application de la méthode ABC Random Forest à la calibration d'un modèle écologique (WASP) a d'abord été étudiée lors du stage de master 2 de Max Zinsou Debaly (2018). Durant ce stage, une première version de scripts a été produite. Les travaux de Max Zinsou Debaly ont ensuite été repris dans la thèse de Francesco Piccioni (co-dirigée avec Brigitte Vinçon-Leite du LEESU) qui a appliqué la méthode ABC Random Forest au modèle couplé Delft3D-BLOOM. Ces travaux ont donné des résultats satisfaisants qui ont été présentés en conférence (Piccioni, Casenave, Baragatti, Cloez, Hong et al. 2019). Un article de revue a été soumis pour publication dans le journal Ecological Informatics (Piccioni, Casenave, Baragatti, Cloez et Vinçon-Leite 2022).

Quelques problèmes de commande

“L’automatique des bioprocédés, ..., a pour but d’augmenter le rendement et/ou la productivité en développant des méthodes de surveillance et de commande automatisées permettant l’optimisation en temps réel du fonctionnement des bioprocédés.”

Denis Dochain (Dochain 2001)

Sommaire

6.1 Introduction	70
6.2 Commande de procédés	71
6.2.1 Commande d’un procédé de cristallisation de crème glacée	71
6.2.2 Commande d’un fermenteur multi-étagé	73
6.3 Synthèse de loi de commande sous contraintes de positivité sur les entrées	76
6.3.1 Résultat de Antonelli et Astolfi	76
6.3.2 Systèmes en cascade	78
6.3.3 Contraintes de positivité générales	79
6.3.4 Utilisation du changement de temps	80

6.1 Introduction

La théorie de la commande peut être appliquée sur différents types de modèles, qu’ils soient plutôt théoriques et qualitatifs, ou plus opérationnels et quantitatifs voire prédictifs.

Je suis persuadée qu’il serait intéressant d’utiliser davantage les outils de la théorie de la commande en écologie, ne serait que pour montrer comment certains écosystèmes (notamment les agro-écosystèmes) pourraient être mieux gérés en faisant varier certains paramètres dans le temps, de manière intelligente et adaptative, ce que permet justement la théorie de la commande. C’est dans ce sens d’ailleurs que nous avons écrit un article dans le cadre de la thèse de Anne Bisson pour montrer comment la gestion variable dans le temps du bétail pouvait amener à une meilleure production au moment de la récolte (Bisson, Casenave et al. 2019). Un des enjeux importants serait également d’appliquer les méthodes de la théorie de la commande à l’agriculture, pour optimiser les traitements ainsi que la production.

Les travaux que je présente dans ce chapitre portent sur un autre domaine d'application : la commande des (bio)procédés. Je m'intéresse ainsi au cas particulier des écosystèmes contrôlés (et plus précisément des écosystèmes microbiens) pour lesquels des modèles prédictifs peuvent être obtenus. Dans les procédés que j'étudie, plusieurs conditions expérimentales peuvent être modifiées, comme par exemple la température, les débits d'entrées dans les bioréacteurs, les ajouts de certains nutriments, etc. Ces conditions apparaissent comme autant de leviers, de "commandes", sur lesquels on peut jouer pour contrôler la dynamique du procédé et atteindre la cible que l'on se fixe. L'application sur le procédé réel est un objectif important pour moi, qui me permet de me rendre compte des problèmes concrets que l'on peut rencontrer en pratique, comme les problèmes de retard ou de biais sur les mesures, ou de bornes sur la valeur des commandes. C'est à cette dernière problématique que j'ai consacré quelques travaux plus théoriques de synthèse de lois de commande. Les modèles considérés sont non linéaires et le plus génériques possible. L'objectif est d'atteindre une valeur cible tout en respectant les contraintes de positivité sur les commandes. Le fait que ces travaux répondent à une problématique concrète issue d'une application réelle donne tout son sens pour moi à ces travaux.

Dans ce chapitre, je vais présenter les différents travaux de commande auxquels j'ai contribué :

- Commande d'un procédé de cristallisation de crème glacée
- Commande d'un fermenteur continu multi-étagé
- Méthodes de synthèse de lois de commande sous contraintes de positivité sur les commandes : (1) méthode adaptée au cas d'un système en cascade, (2) généralisation au cas de contraintes de positivité générale, (3) méthode basée sur un changement de temps.

6.2 Commande de procédés

6.2.1 Commande d'un procédé de cristallisation de crème glacée

Problématique

On s'intéresse ici au problème de commande d'un procédé industriel de cristallisation de crème glacée, exprimé en terme d'asservissement de la viscosité de la glace à une valeur donnée. En effet, en fonction du type de produits que l'on souhaite obtenir (glace en bacs, ou bien en bâtonnets), la glace doit être plus ou moins visqueuse, pour bien s'étaler dans les bacs, ou au contraire rester compacte autour du bâtonnet.

Modèle

Le modèle considéré est celui présenté en section 5.4, qui est composé de 5 équations différentielles ordinaires non linéaires auxquelles on ajoute une équation pour décrire la dynamique du compresseur au moyen d'un système du premier ordre avec un gain non linéaire (Gonzalez 2012). Les équations sont les suivantes :

$$\begin{aligned}
\frac{dM_0}{dt} &= -DM_0 + N + BM_1 \\
\frac{dM_1}{dt} &= -DM_1 + GM_0 + NL_c + c_1BM_2 \\
\frac{dM_2}{dt} &= -DM_2 + 2GM_1 + NL_c^2 + c_2BM_3 \\
\frac{dM_3}{dt} &= -DM_3 + 3GM_2 + NL_c^3 \\
\frac{dT}{dt} &= D(T_0 - T) + K_2(T_e - T) + \mu N_{\text{scrap}}^2 K_3 + K_1(3GM_2 + NL_c^3) \\
\frac{dT_e}{dt} &= -\frac{1}{\tau_c}T_e + \frac{1}{\tau_c}G^c
\end{aligned} \tag{6.1}$$

où M_i est le moment d'ordre i de la distribution de taille des cristaux, L est la variable de taille des cristaux, T (respectivement T_0) est la température de la glace en sortie (respectivement à l'en-

trée) du réfrigérateur, T_e est la température d'évaporation, D est le taux de dilution, μ est la viscosité de la glace, N_{scrap} est la vitesse de rotation du racleur, V_{comp} est la vitesse de rotation du compresseur, $T_{\text{sat}} = T_{\text{sat}}(M_3)$ est la température de saturation, $G = G(M_3, T)$ est le taux de croissance des cristaux, $N = N(M_3, T_e)$ est le taux de nucléation, B est la constante de cassure, $G^c = G^c(V_{\text{comp}}, m_{\text{fr}}, N_{\text{scrap}})$ et τ_c sont le gain non linéaire et la constante de temps de la dynamique de T_e , et K_1, K_2, K_3, c_1 et c_2 des constantes.

A la sortie du réfrigérateur, la viscosité de la glace, que l'on cherche à contrôler, est supposée ne dépendre que de M_3 . Comme on ne dispose que de la mesure de la température de saturation, c'est finalement cette variable que nous avons choisie comme sortie à contrôler, chaque valeur de température de saturation correspondant à une et une seule valeur de viscosité.

Finalement, le problème de commande est donc exprimée comme l'asservissement de la valeur de la température de saturation T_{sat} en sortie de réfrigérateur en utilisant la vitesse de rotation du compresseur V_{comp} comme commande.

Stratégie de commande

La stratégie de commande qui a été retenue est basée sur deux lois de commande adaptatives de type "backstepping" en cascade : une boucle primaire pour contrôler T_{sat} avec T_e , et une boucle secondaire pour contrôler T_e avec V_{comp} . Du fait de la présence d'un retard sur la mesure de la température de saturation, les lois de commande ont été couplées à une version non linéaire du prédicteur de Smith qui permet de compenser le retard sur la mesure. Le schéma de cette stratégie de commande est donné en figure 6.1.

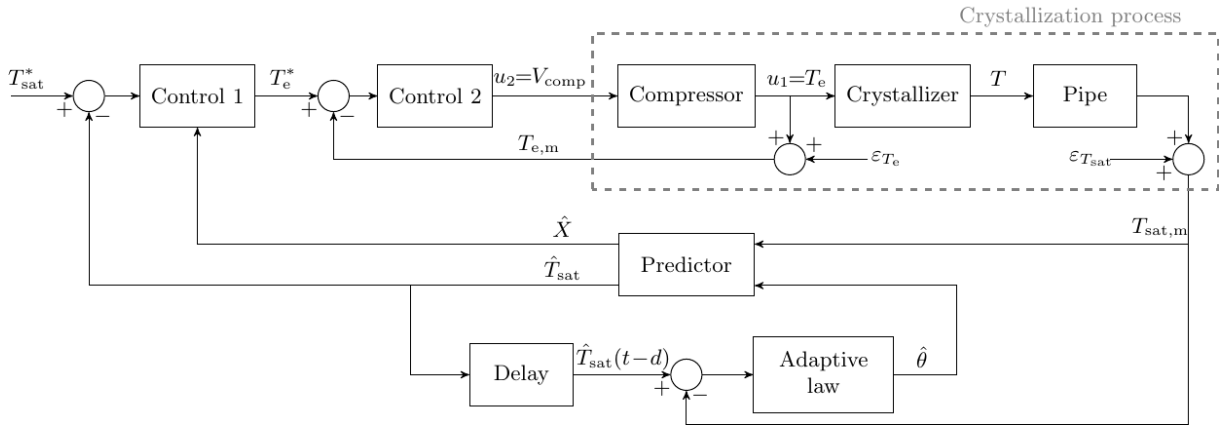


FIGURE 6.1 – Schéma de la stratégie adoptée pour la commande du procédé de cristallisation de crème glacée. Figure issue de (Casenave, Dochain, Alvarez, Arellano et al. 2013).

Cette stratégie de contrôle a été validée d'abord en simulation puis sur le procédé réel. Un exemple de résultats obtenus est montré en figure 6.2.

Collaborations

Ces travaux ont été effectués dans le cadre du projet européen CAFE, en collaboration avec Denis Dochain (UCL, Belgique), et avec des chercheurs de IRSTEA Antony (Graciela Alvarez, Denis Leducq, Marcela Arellano) et de AgroParisTech (Hayat Benkhelifa, Denis Flick). Ils ont été publiés dans un article de conférence (Casenave, Dochain, Alvarez, Arellano et al. 2013) et détaillés dans les livrables du projet européen CAFE (Casenave et Dochain 2013; Casenave, Trelea et al. 2013). A la fin du projet européen CAFE, une conférence industrielle a été organisée à IRSTEA

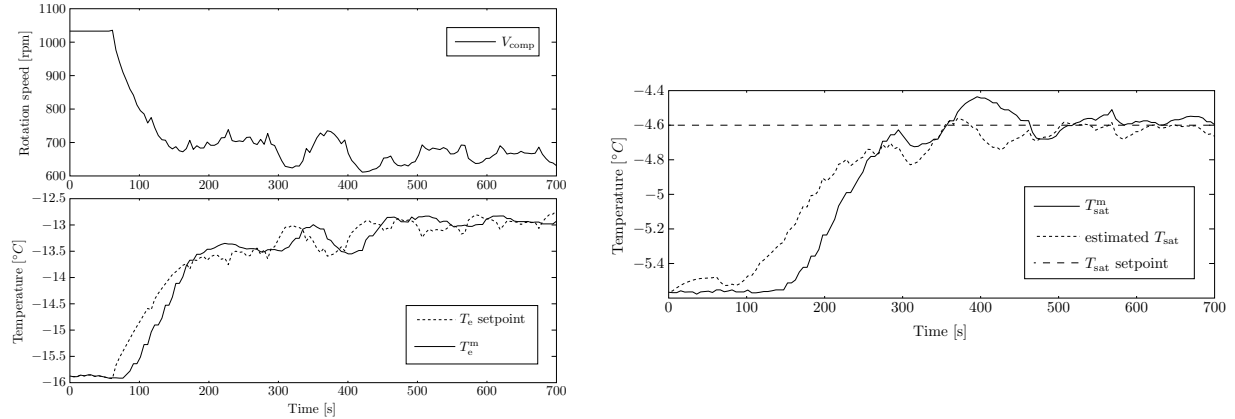


FIGURE 6.2 – Résultats expérimentaux obtenus après application de la stratégie de contrôle sur le procédé de cristallisation de crème glacée. En haut à gauche : vitesse de rotation du compresseur. En bas à gauche : mesure et valeur de consigne de la température d'évaporation. A droite : mesure, valeur de consigne et estimation (avec le prédicteur de Smith) de la valeur de la température de saturation. Figure issue de (Casenave, Dochain, Alvarez, Arellano et al. 2013).

Antony, le 27 février 2013, pour présenter devant des industriels les résultats obtenus dans le cadre du projet. Une démonstration “live” de la loi de commande du procédé de cristallisation de crème glacée a clôturé cette conférence.

6.2.2 Commande d'un fermenteur multi-étagé

Problématique

La fermentation alcoolique repose essentiellement sur l'action des levures (voir paragraphe 2.3). La maîtrise de ce processus implique donc une bonne connaissance des levures et de leur physiologie. C'est dans cette optique, que des chercheurs de l'UMR SPO (Sciences pour l'Oenologie) ont mis au point un fermenteur continu multi-étagé (FCME) à quatre étages (voir figure 6.3). Il s'agit d'un procédé constitué de 4 bioréacteurs en cascade alimentés en continu et dans lesquels on réalise des fermentations alcooliques (une par réacteur). Les chercheurs de l'UMR SPO ont montré qu'en régime permanent, ce système permettait d'une part d'obtenir des levures dans des états physiologiquement stables, et d'autre part de mimer, dans chacun des réacteurs, des stades successifs du régime transitoire de la fermentation alcoolique du vin (obtenue en batch). En effet, le FCME permet de passer d'une échelle temporelle à une échelle spatiale avec la possibilité, par exemple, d'obtenir simultanément, dans les différents réacteurs, des levures en phase de croissance et en phase stationnaire, dans un environnement et un état physiologique stable dans le temps. Via ce procédé, il est ainsi possible de tester l'impact de certaines actions (changement de température, ajout d'azote, etc.) à un stade donné de la fermentation.

Les chercheurs de l'UMR SPO ont montré expérimentalement qu'il était possible, en faisant varier les débits d'entrée de chacun des réacteurs, de “choisir” la concentration en sucre atteinte, en régime permanent, dans chacun des réacteurs. Ce contrôle se faisait jusqu'alors de manière manuelle. Le but est maintenant d'automatiser ce contrôle. Plus précisément, l'objectif est de proposer une loi de commande en débits (les 4 entrées du système étant les débits d'entrée des 4 réacteurs) qui permet de stabiliser le système autour d'un point d'équilibre donné, exprimé en concentration en sucre dans chacun des réacteurs.

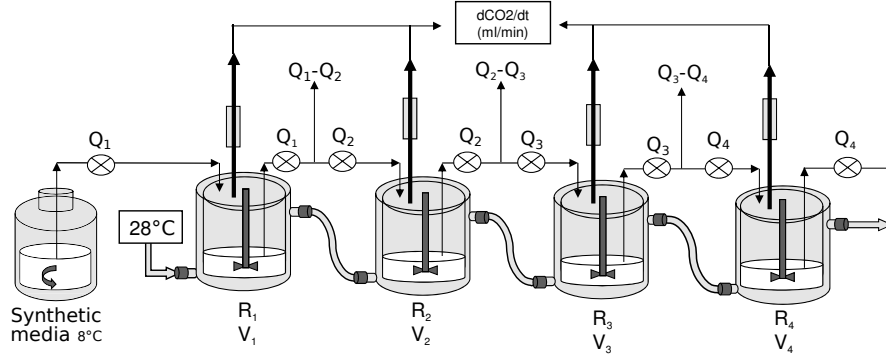


FIGURE 6.3 – Représentation schématique du Fermenteur Continu Multi-Étagé

Modèle du Fermenteur Continu Multi-Étage

La fermentation alcoolique consiste en la conversion par des levures du sucre issu du raisin en alcool. Les 4 composants principaux de cette réaction sont donc le sucre S , l'azote N , les levures X et l'éthanol E . Le FCME que l'on considère est composé de 4 réacteurs, mais la méthode est évidemment applicable pour un nombre de réacteurs différent, que l'on notera donc n dans la suite. Dans le réacteur i , on notera, X_i la biomasse (les levures), N_i l'azote, E_i l'éthanol, S_i le sucre, C_i la vitesse de dégagement du CO_2 , Q_i le débit d'entrée (et de sortie pour garder un volume constant) du réacteur i , V_i le volume du réacteur i et $D_i = \frac{Q_i}{V_i}$ le taux de dilution du réacteur i . Le mélange qui alimente le premier réacteur est un moût de raisin synthétique qui ne contient que du sucre et de l'azote. Chacun des 4 réacteurs est inoculé séparément avec des levures.

Le modèle du FCME est obtenu à partir des équations de la fermentation alcoolique en rajoutant les entrées et sorties de chaque réacteur. On obtient le modèle suivant :

$$\dot{z}_i = f_i(z) + g_i(z)u_i, \quad i = 1 : n \quad (6.2)$$

avec $n = 4$ et $\forall i = 1 : 4$:

$$z_i = (X_i, N_i, E_i, S_i)^T, \quad u_i = D_i, \quad (6.3)$$

$$f_i(z) = \begin{bmatrix} \mu_1(N_i)X_i \\ -k_1\mu_1(N_i)X_i \\ \mu_2(E_i, S_i)X_i \\ -k_2\mu_1(E_i, S_i)X_i \end{bmatrix}, \quad g_i(z) = \begin{bmatrix} X_{i-1} - X_i \\ N_{i-1} - N_i \\ E_{i-1} - E_i \\ S_{i-1} - S_i \end{bmatrix}. \quad (6.4)$$

avec $\mu_1(N_i) = \mu_1^{max} \frac{N_i}{K_N + N_i}$ le taux de croissance des levures, $\mu_2(E_i, S_i) = \mu_2^{max} \frac{S_i}{K_S + S_i} \frac{K_E}{K_E + E_i}$ le taux de dégradation du sucre en éthanol, et k_1 et k_2 des taux de conversion.

La vitesse de dégagement en CO_2 , notée C_i , est donnée par $C_i = \mu_2(E_i, S_i)X_i$. C'est la seule mesure en ligne disponible pour le contrôle. Le sucre en particulier, n'est pas mesuré en ligne.

On ajoute à ce système la contrainte d'ordonnement des entrées suivante :

$$\underline{u} < u_n < u_{n-1} < \dots < u_1 < \bar{u}. \quad (6.5)$$

avec $\underline{u} = 0$ et $\bar{u} = D_{max}$, D_{max} étant le débit maximal autorisé par la pompe.

En effet, pour que le FCME fonctionne correctement, le débit d'entrée de chaque réacteur doit nécessairement être plus petit que le débit de sortie du réacteur précédent. Sans perte de généralité, on a supposé ici que tous les réacteurs avaient le même volume V , de sorte que, l'ordonnement des débits Q_i des 4 réacteurs est équivalente à l'ordonnement des taux de dilutions D_i .

Stratégie de commande

L'objectif est ici de proposer une loi de commande en débits (les 4 entrées du système étant les débits d'entrée des 4 réacteurs) qui permet de stabiliser le système autour d'un point d'équilibre donné, exprimé en concentration en sucre dans chacun des réacteurs, tout en vérifiant la contrainte d'ordonnancement.

La commande de systèmes (qu'ils soient linéaires ou non) soumis à une saturation sur la commande a fait l'objet de nombreux travaux. Cependant, les techniques proposées ne sont généralement adaptées qu'au cas de saturations avec des bornes constantes. Lorsque les bornes sont variables, il est possible d'effectuer un changement de variable de commande, de sorte que la contrainte sur la nouvelle variable de commande soit une saturation avec des bornes constantes. Par exemple, la contrainte $0 \leq Q_2 \leq Q_1 \leq Q_{max}$ peut être remplacée par $0 \leq Q_1 \leq Q_{max}$ et $0 \leq \alpha \leq 1$ où α est tel que $Q_2 = \alpha Q_1$. Cependant, en procédant ainsi, la structure du modèle est modifiée et n'est souvent plus adaptée aux techniques de contrôle classiques qui sont dédiées à des formes particulières de systèmes tels que les systèmes affines en la commande.

Finalement, il n'est donc pas évident de trouver des techniques de synthèse de loi de commande qui soient adaptées aux systèmes non linéaires avec des saturations à bornes variables. La méthode proposée par Doyle dans (Doyle III 1999) fait partie des rares exceptions. Elle consiste à linéariser le système via une commande linéarisante et à ensuite appliquer la méthode anti-windup développée par Zheng et présentée dans (Zheng et al. 1994), méthode qui fonctionne dans le cas linéaire uniquement, mais avec des saturations dont les bornes peuvent varier dans le temps. Cette dernière caractéristique est importante car, si l'on utilise la commande linéarisante, on va effectuer un changement de variables, notamment sur la variable de commande. Même si les bornes de saturation sur la variable de commande initiale sont constantes, les bornes de la saturation sur la nouvelle variable de commande ont très peu de chance elles de l'être.

C'est cette stratégie de contrôle que j'ai couplée à un observateur d'état (qui estime la valeur non mesurée de la concentration en sucre) que j'ai appliquée sur le modèle du FCME. Le schéma de cette stratégie de contrôle est donné en figure 6.4.

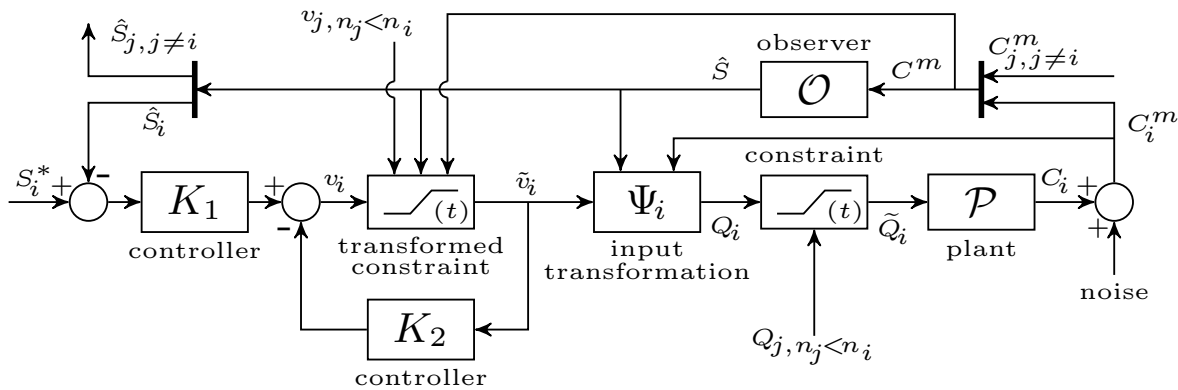


FIGURE 6.4 – Schéma de la stratégie adoptée pour la commande du FCME. Figure issue de (Casenave, Perez et al. 2020).

La loi de commande obtenue a été d'abord validée en simulation puis appliquée avec succès sur le procédé réel. Un exemple de résultats obtenus est montré en figure 6.5.

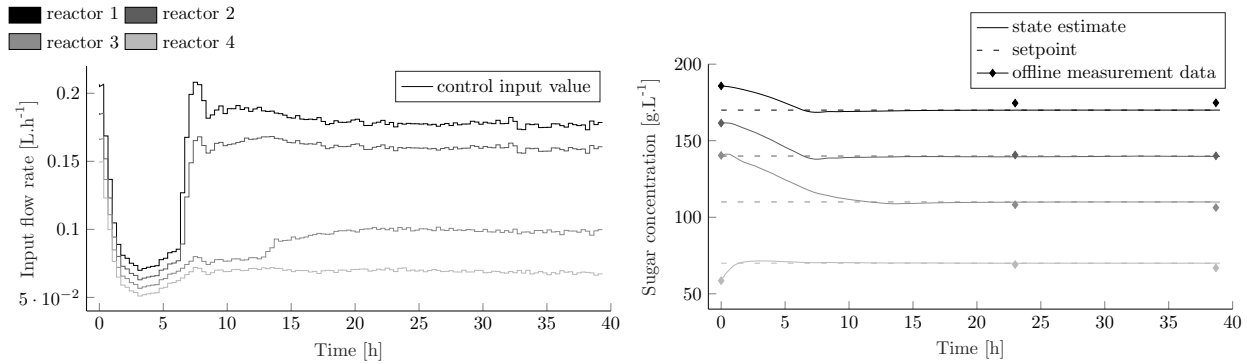


FIGURE 6.5 – Résultats expérimentaux obtenus après application de la stratégie de contrôle de la concentration en sucre dans les 4 réacteurs du FCME. A droite : concentration en sucre (consigne, valeur estimée et mesures hors ligne). A gauche ; valeur des commandes. Figure issue de (Casenave, Perez et al. 2020).

Collaborations

Ces travaux ont été effectués dans le cadre du projet européen CAFE puis du projet ANS. Ces travaux ont été effectués en collaboration avec Marc Pérez et Jean-Marie Sabblayrolles de l’UMR SPO, qui m’ont aidé sur la compréhension du procédé de fermentation et sur tous les aspects expérimentaux (données, mesures, conduite des expérimentations), ainsi qu’avec Denis Dochain (UCL, Belgique), Jérôme Harmand (LBE, INRA Narbonne) et Alain Rapaport (MISTEA). Ces travaux ont été présentés dans un article à la conférence IFAC World Congress 2014 (Casenave, Dochain, Harmand et al. 2014), au Cap (Afrique du Sud) et ont été récompensés à cette occasion par l’IFAC Application Paper Prize. Puis un article de journal a ensuite été publié dans IEEE Transactions on Control Systems Technology (Casenave, Perez et al. 2020). Ces travaux ont également été détaillés dans les livrables du projet européen CAFE (Casenave et Dochain 2013 ; Casenave, Trelea et al. 2013).

6.3 Synthèse de loi de commande sous contraintes de positivité sur les entrées

Le problème concret du contrôle du fermenteur continu multi-étagé a fait émerger une problématique plus générale portant sur la synthèse d’une loi de commande sous contraintes de positivité sur les entrées. Plusieurs travaux méthodologiques ont donc été réalisés sur ce sujet. Ces travaux ont tous été inspirés d’un papier très intéressant écrit par R.Antonelli et A.Astolfi dont le titre est “Continuous stirred tank reactors : easy to stabilize?” et qui a été publié dans Automatica en 2003 (Antonelli et al. 2003). Le principal résultat de cet article est rappelé dans le paragraphe suivant avant la présentation de mes travaux.

6.3.1 Résultat de Antonelli et Astolfi

Dans leur article (Antonelli et al. 2003), R.Antonelli et A.Astolfi donne un résultat assez général pour la synthèse d’une loi de commande tenant compte d’une contrainte de saturation sur la commande. Ils considèrent un système non-linéaire affine en la commande de la forme :

$$\dot{z} = f(z) + g(z)u \quad (6.6)$$

avec $z \in \mathbb{R}^n$ et $u \in \mathbb{R}$ et soumis à la contrainte de saturation sur la commande suivante :

$$\underline{u} < u < \bar{u}. \quad (6.7)$$

Ils proposent une loi de commande basée sur une fonction de Lyapunov spécifique dans laquelle les valeurs limites (bornes de la saturation \underline{u} et \bar{u}) de la commande apparaissent explicitement. La commande u est alors solution d'une équation de la forme $\frac{du}{dt} = (\bar{u} - u)(u - \underline{u})g(x, u)$, ce qui l'oblige à rester entre \underline{u} et \bar{u} sans avoir recours à une saturation qui a tendance à dégrader voire à déstabiliser le système commandé.

Le résultat présenté dans (Antonelli et al. 2003) est donné en suivant, après avoir été reformulé pour faire apparaître la loi de commande dans le lemme :

Lemma 1 *Consider the system*

$$\dot{z} = f(z) + g(z)u, \quad (6.8)$$

where $z \in \mathbb{R}^n$ is the state, $u \in \mathbb{R}$ is the control, and $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n$ and $g : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n$. Suppose that there exist a constant control $u = u_{ss}$ and a positive definite and radially unbounded function $V(z)$ such that :

$$f(0) + g(0)u_{ss} = 0, \quad (6.9)$$

$$\text{and } \dot{V}(z) = \frac{\partial V}{\partial z} f(z) + \frac{\partial V}{\partial z} g(z)u_{ss} < 0, \forall z \neq 0. \quad (6.10)$$

Then, for any \underline{u} and \bar{u} such that $\underline{u} < u_{ss} < \bar{u}$, there exists a dynamic control law, which does not require the knowledge of u_{ss} , namely :

$$\begin{aligned} u &= \theta \\ \dot{\theta} &= -k \frac{\partial V}{\partial z} g(z) (\bar{u} - \theta) (\theta - \underline{u}), \end{aligned} \quad (6.11)$$

with $\theta(0) \in (\underline{u}, \bar{u})$ and $k > 0$, such that the closed loop system (6.8)-(6.11) is stable in the sense of Lyapunov, the variable z converges to zero whatever the initial condition $z(0)$ (0 is globally asymptotically stable) and, along the trajectories of the closed loop system, $\theta(t) = u(t) \in (\underline{u}, \bar{u})$, $\forall t > 0$.

La loi de commande conçue avec cette technique garantit la stabilité du système en boucle fermée, la convergence de la variable d'état vers la consigne et le respect naturel de la contrainte de saturation. La seule hypothèse requise est que la valeur de la consigne doit être l'unique point d'équilibre globalement asymptotiquement stable du système et doit être atteint pour une valeur constante donnée de la commande qui doit vérifier la contrainte de saturation.

L'inconvénient de cette méthode est qu'elle repose sur la connaissance d'une fonction de Lyapunov pour le système sans contraintes, ce qui est souvent difficile à obtenir en pratique. De plus, seules les saturations dont les bornes sont constantes sont considérées. Cet problème peut néanmoins être contourné, puisque par changement de variables, on peut toujours se ramener à une commande dont la saturation a des bornes fixes :

$$\underline{u}(t) < u(t) < \bar{u}(t) \Leftrightarrow 0 < \theta(t) < 1 \text{ avec } \theta = \frac{u - \underline{u}}{\bar{u} - \underline{u}} \quad (6.12)$$

Cependant, après ce changement de variables, la recherche d'une fonction de Lyapunov n'est souvent pas facilitée. Enfin le lemme précédent n'est valable a priori que pour des systèmes mono-entrée ($u \in \mathbb{R}$) ce qui limite aussi son application.

C'est pour ces raisons que j'ai travaillé sur diverses extensions de l'approche qui sont présentées dans les paragraphes suivants.

6.3.2 Systèmes en cascade

Dans un premier papier, j'ai proposé une extension de l'approche de Antonelli et Astolfi à une classe de systèmes non linéaires en cascade avec des contraintes de saturation sur la commande et des bornes de saturation variables dans le temps. Plus précisément, la contrainte de saturation considérée est une contrainte d'ordre : la valeur de la commande d'un sous-système doit être inférieure à la valeur de la commande du précédent sous-système (structure en cascade). Cette classe de systèmes comprend les réacteurs continus interconnectés, tels que le fermenteur continu multi-étagé étudié précédemment.

Les systèmes considérés sont donc des systèmes multi-entrées de la forme :

$$\dot{z}_i = f_i(z) + g_i(z)u_i, \quad i = 1 : n \quad (6.13)$$

avec $z = (z_1^T, \dots, z_n^T)^T$, et $z_i \in \mathbb{R}^{n_i}$, $u_i \in \mathbb{R}$ pour $i = 1 : n$ et soumis à la contrainte :

$$\underline{u} < u_n < u_{n-1} < \dots < u_1 < \bar{u}. \quad (6.14)$$

Le problème est ici que les bornes sur les entrées ne sont pas constantes, comme dans le cas précédent, et que la contrainte d'ordonnancement lie entre elles les différentes entrées. Le travail consistait donc à adapter la forme de la fonction de Lyapunov à cette classe particulière de systèmes et à se ramener à un cas où les bornes des saturations étaient constantes.

Une première étape a donc été d'effectuer un changement de variables pour faire apparaître des entrées dont les bornes sont constantes et qui ne sont donc pas liées entre elles. Pour cela, il a d'abord fallu se fixer un ordre de saturation. Par exemple on peut saturer d'abord u_1 , puis u_2 , puis u_3 , puis u_4 et effectuer le changement de variables suivant :

- Saturation 1 : $\underline{u} < u_1 < \bar{u} \Leftrightarrow 0 < v_1 < 1$ avec $v_1 = \frac{u_1 - \underline{u}}{\bar{u} - \underline{u}}$.
- Saturation i : $\underline{u} < u_i < u_{i-1} \Leftrightarrow 0 < v_i < 1$ avec $v_i = \frac{u_i - \underline{u}}{u_{i-1} - \underline{u}}$.

Avec ce changement de variables, le système se réécrit de la manière suivante :

$$\dot{x}_j = \tilde{f}_j(x) + \tilde{g}_j(x)\Pi_{k=1}^j v_k, \quad j = 1 : n \quad (6.15)$$

avec $\tilde{f}_j(z) = f_j(z) + g_j(z)\bar{u}$, $\tilde{g}_j(z) = -g_j(z)(\bar{u} - \underline{u})$ et $v_j \in \mathbb{R}$ pour $j = 1 : n$ avec la contrainte :

$$0 < v_j < 1. \quad (6.16)$$

A noter que l'ordre de saturation des commandes peut influencer sur les performances de la loi de commande qui dépendent de la valeur de la consigne, de la condition initiale ainsi que des conditions expérimentales. Ce choix là reste donc une question ouverte.

J'ai ensuite adapté le lemme de Antonelli et Astolfi (lemme 1) à cette forme particulière de système, ce qui a amené au lemme suivant :

Proposition 2 *Consider the system*

$$\dot{z}_j = f_j(z) + g_j(z)\Pi_{k=1}^j u_k, \quad j = 1 : n \quad (6.17)$$

where $z = (z_1^T, \dots, z_n^T)^T$ with $z_j \in \mathbb{R}^{n_j}$ is the state, $u_j \in \mathbb{R}$, $i = 1 : n$ are the control inputs, and $f_j : \mathbb{R}^N \mapsto \mathbb{R}^{n_j}$ and $g : \mathbb{R}^N \mapsto \mathbb{R}^{n_j}$ with $N = \sum_{k=1}^n n_k$. Suppose that there exist some constant control inputs $u_j = u_j^{ss}$ and a positive definite and radially unbounded function $V(z)$ such that :

$$f_j(0) + g_j(0)\Pi_{k=1}^j u_k^{ss} = 0, \quad j = 1 : n \quad (6.18)$$

$$\dot{V}(z) = \sum_{j=1}^n \left[\frac{\partial V}{\partial z_j} f_j(z) + \frac{\partial V}{\partial z_j} g_j(z)\Pi_{k=1}^j u_k^{ss} \right] < 0, \quad \forall z \neq 0. \quad (6.19)$$

Then, for any \underline{u}_j and \bar{u}_j such that $\underline{u}_j < u_j^{ss} < \bar{u}_j$, there exists a dynamic control law, which does not require the knowledge of u_j^{ss} , namely :

$$\begin{aligned} u_j &= \theta_j \\ \dot{\theta}_j &= \begin{cases} k_j(\theta_j - \bar{u}_j)(\theta_j - \underline{u}_j) \frac{\partial V}{\partial z_j} g_j(z) & \text{if } j = n \\ k_j(\theta_j - \bar{u}_j)(\theta_j - \underline{u}_j) \left[\frac{\partial V}{\partial z_j} g_j(z) + \sum_{l=j+1}^n \frac{\partial V}{\partial z_l} g_l(z) \prod_{k=j+1}^l \theta_k \right], & \text{if } j \neq n \end{cases} \end{aligned} \quad (6.20)$$

with $\theta_j(0) \in (\underline{u}_j, \bar{u}_j)$ and $k_j > 0$, such that the closed loop system (6.17)-(6.20) is stable in the sense of Lyapunov, the variable z converges to zero whatever the initial condition $z(0)$ and, along the trajectories of the closed loop system, $\theta_j(t) = u_j(t) \in (\underline{u}_j, \bar{u}_j)$, $\forall t > 0$.

Ce résultat a finalement été appliqué sur un exemple de système en cascade représentant 4 bioréacteurs en série (voir figure 6.6) inspiré du Fermenteur Continu Multi-Etagé.

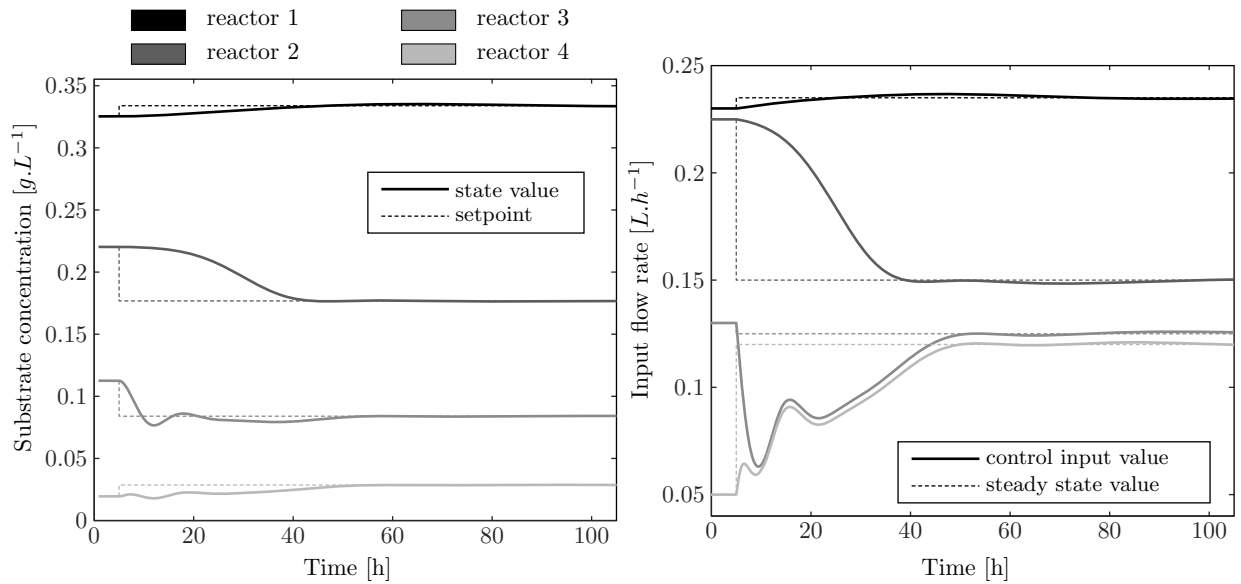


FIGURE 6.6 – Validation de la stratégie de contrôle définie dans la proposition 2 sur un exemple de système en cascade représentant 4 bioréacteurs en série. Figure issue de (Casenave et Perez 2015).

Collaborations

Ces travaux ont été publiés dans un article de conférence à IEEE CCDC en 2015 (Casenave et Perez 2015).

6.3.3 Contraintes de positivité générales

J'ai ensuite travaillé sur une autre extension de l'approche de Antonelli et Astolfi à une classe plus générale de contraintes sur la commande : les contraintes considérées ne sont plus forcément des contraintes de saturation de la valeur des commandes, mais des contraintes de positivité quelconque sur des fonctions des différentes commandes.

Dans un premier temps, les systèmes considérés sont des systèmes mono-entrée affine en la commande de la forme :

$$\dot{z} = f(z) + g(z)u, \quad i = 1 : n \quad (6.21)$$

avec $z \in \mathbb{R}^n$, $u \in \mathbb{R}$ et les L contraintes de positivité sur l'entrée u :

$$k_l(u(t)) \geq 0, l = 1 : L, \forall t > 0, \quad (6.22)$$

avec k_l des fonctions de $\mathcal{K}_l \subset \mathbb{R}$ dans \mathbb{R} .

J'ai donc là encore adapté lemme de Antonelli et Astolfi (lemme 1) à cette forme particulière de contraintes et systèmes, ce qui a amené au lemme suivant :

Lemma 3 *Consider the system*

$$\dot{z} = f(z) + g(z)u, \quad (6.23)$$

where $z \in \mathbb{R}^n$ is the state, $u \in \mathbb{R}$ is the control, and $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n$ and $g : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n$. Suppose that there exist a constant control $u = u_{ss}$ and a positive definite and radially unbounded function $V(z)$ such that :

$$f(0) + g(0)u_{ss} = 0, \quad (6.24)$$

$$\text{and } \dot{V}(z) = \frac{\partial V}{\partial z} f(z) + \frac{\partial V}{\partial z} g(z)u_{ss} < 0, \forall z \neq 0. \quad (6.25)$$

Then, for any continuously differentiable functions $k_l : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $l = 1 : L$ such that $u_{ss} \in \bar{\Omega}_c$ and :

$$\lim_{\theta \rightarrow \partial \Omega_c} \int_{u_{ss}}^{\theta} \frac{s - u_{ss}}{\prod_l k_l(s)} ds = +\infty, \quad (6.26)$$

where :

$$\Omega_c := \{u \in \mathbb{R}, \text{ such that } k_l(u) > 0, \forall l = 1 : L\}, \quad (6.27)$$

there exists a dynamic control law, which does not require the knowledge of u_{ss} , namely :

$$\begin{aligned} u &= \theta \\ \dot{\theta} &= -k \frac{\partial V}{\partial z} g(z) \prod_l k_l(\theta), \end{aligned} \quad (6.28)$$

with $\theta(0) \in \Omega_c$ and $k > 0$, such that :

- (1) the closed loop system (6.23)-(6.28) is stable in the sense of Lyapunov,
- (2) the variable z converges to zero whatever the initial condition $z(0)$ (0 is globally asymptotically stable);
- (3) along the trajectories of the closed loop system, $\theta(t) = u(t) \in \Omega_c, \forall t > 0$.

Collaborations

Ces travaux n'ont jamais été publiés, et sont actuellement en cours de finalisation.

6.3.4 Utilisation du changement de temps

En parallèle de ces travaux d'extension de l'approche de Antonelli et Astolfi, j'ai travaillé sur une seconde approche, toujours inspirée par les travaux de Antonelli et Astolfi, mais cette fois-ci basée sur la transformation du système en boucle fermée par changement de temps.

Pour faire comprendre l'approche, illustrons la sur un cas simple. On considère donc le problème de commande d'un système non linéaire SISO (single input single output) avec saturation sur la commande, saturation dont les bornes sont constantes dans le temps. Le problème est donc de

trouver une commande u (scalaire dans un premier temps) qui stabilise le système suivant à la consigne x_c (qu'on prendra sans perte de généralité égale à 0) :

$$\frac{dx}{dt} = f(x, u) \quad (6.29)$$

et qui vérifie la contrainte suivante :

$$\underline{u} \leq u \leq \bar{u} \quad (6.30)$$

L'idée (inspirée du lemme de Antonelli et Astolfi) est de chercher une commande u stabilisante, de la forme :

$$\frac{du}{dt} = (\bar{u} - u)(u - \underline{u})g(x, u), \quad (6.31)$$

avec $g(x, \underline{u}) < \infty$ et $g(x, \bar{u}) < \infty$. Ainsi, la commande u est forcée de rester entre \underline{u} et \bar{u} puisque l'ensemble $[u, \bar{u}]$ devient un invariant du système. Avec une telle loi de commande, le système bouclé s'écrira donc sous la forme :

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = f(x, u) \\ \frac{du}{dt} = (\bar{u} - u)(u - \underline{u})g(x, u) \end{cases} \quad (6.32)$$

Contraindre la forme d'une loi de commande dynamique n'est pas évident. Pour le faire nous allons utiliser un changement de temps, qui est tout simplement un changement de variable qui opère sur la variable temporelle. On pose donc τ la nouvelle variable de temps qui est telle que :

$$\frac{d\tau}{dt}(t) = (\bar{u} - u(t))(u(t) - \underline{u}) \quad (6.33)$$

ce qui implique :

$$\frac{dt}{d\tau}(\tau) = \frac{1}{(\bar{u} - u(t(\tau)))(u(t(\tau)) - \underline{u})}. \quad (6.34)$$

Pour n'importe quelle variable $z(t)$, en notant $\tilde{z}(\tau) = z(t(\tau))$, on obtient alors :

$$\frac{d\tilde{z}}{d\tau}(\tau) = \frac{dt}{d\tau}(\tau) \frac{dz}{dt}(t(\tau)) \quad (6.35)$$

Le système boucle fermée s'écrit alors dans le nouveau temps τ :

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{x}}{d\tau} = \frac{f(\tilde{x}, \tilde{u})}{(\bar{u} - \tilde{u})(\tilde{u} - \underline{u})} =: \tilde{f}(\tilde{x}, \tilde{u}) \\ \frac{d\tilde{u}}{d\tau} = g(\tilde{x}, \tilde{u}) \end{cases} \quad (6.36)$$

A partir de là, on peut appliquer des techniques classiques de synthèse de loi de commande sur un système dynamique non linéaire puisque la forme de la loi de commande n'est plus contrainte. On a seulement besoin que ce soit une loi de commande dynamique, c'est à dire qui est exprimée comme la solution d'une équation différentielle ordinaire. Une solution serait donc de trouver une fonction de Lyapunov V et une fonction g telle que la commande $\frac{d\tilde{u}}{d\tau} = g(\tilde{x}, \tilde{u})$ stabilise le système $\frac{d\tilde{x}}{d\tau} = \tilde{f}(\tilde{x}, \tilde{u})$ au sens de Lyapunov dans le temps τ . On montre facilement qu'on obtiendrait alors également la stabilisation dans le temps t , et comme dans le temps t l'équation de la commande s'écrit : $\frac{du}{dt} = (\bar{u} - u)(u - \underline{u})g(x, u)$, on est sûr que cette commande vérifie bien les contraintes de saturation.

Cette fonction de Lyapunov V et cette fonction g peuvent être obtenues par exemple en utilisant une loi de commande linéarisante dynamique (voir l'article de Henson et Borg (Henson et al. 1997), section 4.4.1, "Controller Design Based on an Affine System").

Cette stratégie de contrôle a été testée sur des exemples test puis appliquée avec succès (en simulation) sur le problème de commande du Fermenteur Continu Multi Étagé (6.2) (voir figure 6.7).

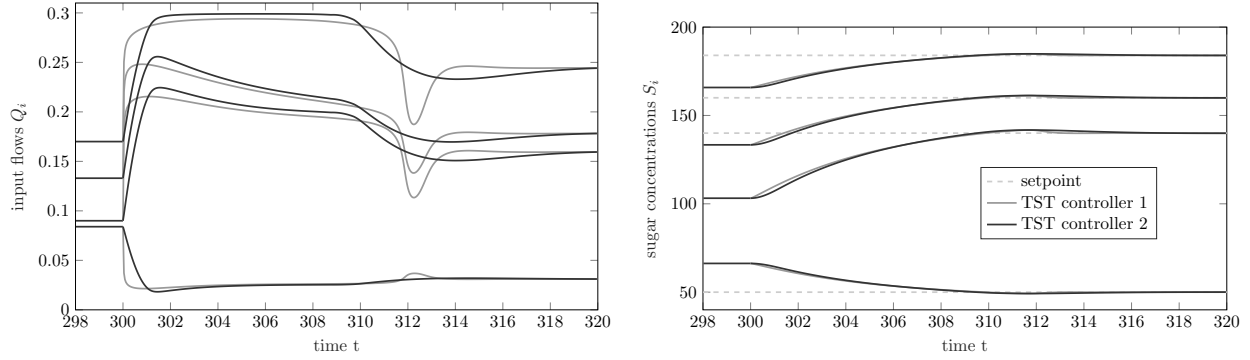


FIGURE 6.7 – Application de la méthode de synthèse de loi de commande basée sur le changement de temps au problème de commande du Fermenteur Continu Multi Etagé (6.2) avec $R = 4$ réacteurs. Figure issue de (Casenave et E. Montseny 2017).

Collaborations

Ces travaux ont été réalisés en collaboration avec Emmanuel Montseny (UPS, Toulouse III) et publiés dans un article de conférence à l’IFAC World Congress 2017 (Casenave et E. Montseny 2017). Dans un autre papier de conférence présenté à la Mediterranean Conference on Control and Automation 2020 (Casenave et Bisson 2020), cette méthode a été appliquée sur un exemple de contrôle de la production agricole dans un réseau de parcelles agricoles. Ce sont les modèles développés dans la thèse de Anne Bisson qui ont été utilisés pour représenter la dynamique de l’écosystème dans chaque parcelle du réseau.

Conclusion

L'écriture de cette habilitation à diriger des recherches a été l'occasion pour moi de faire un bilan de mes travaux et de mettre en avant le fil directeur qui les guide.

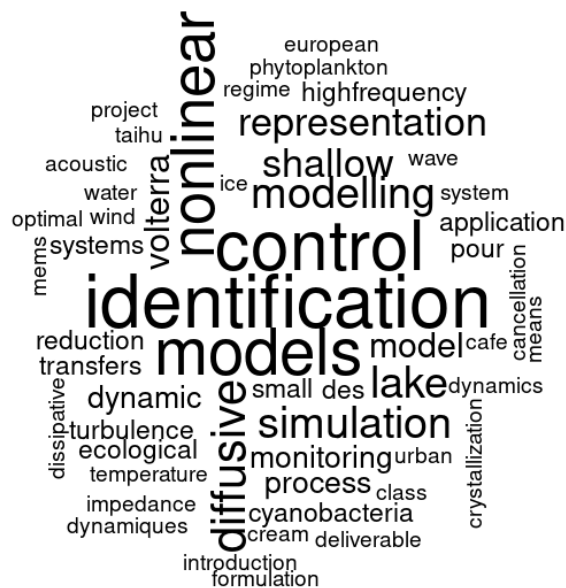


FIGURE 6.8 – Nuage de points des mots-clés de mes publications. Figure générée avec le code de (Louveau 2018).

Depuis le début de ma carrière, j'ai travaillé sur divers problèmes touchant à la modélisation, l'identification, la simulation, et la commande de systèmes dynamiques. Cette diversité dans mes travaux répond en fait à des besoins qui se sont exprimés au fur et à mesure de mes collaborations. Lorsque je suis arrivée à l'INRAE, je pensais naïvement que l'on me solliciterait sur des problématiques de commande pour lesquelles des modèles prédictifs fiables étaient disponibles. J'aurais alors pu me concentrer sur la synthèse de lois de commande et avoir la chance, étant dans un institut de recherche finalisé, d'aller jusqu'à l'application sur le système réel. Mais la réalité était évidemment toute différente. J'ai d'abord compris que c'était à moi d'aller chercher les applications sur lesquelles je pourrais contribuer. Puis, une fois la problématique trouvée, il m'est apparu qu'avant

de pouvoir appliquer les méthodes de commande, il fallait souvent résoudre au préalable d'autres problèmes pour obtenir des modèles suffisamment fiables et adaptés à l'application des méthodes de commande. Comme je l'ai expliqué en début de ce manuscrit, je travaille à partir de modèles déterministes mécanistes : la compréhension des processus est donc importante puisque les lois de commande synthétisées sont basées sur des modèles représentant ces processus et leur interaction au sein de l'écosystème. C'est ce qui m'a amené à faire de la modélisation et à plonger dans la littérature scientifique en biologie, écologie, agronomie et sciences environnementales pour comprendre les mécanismes à modéliser. La confrontation aux données est apparue également primordiale à mes yeux, que ce soit dans le cas de modèles de bioprocédés où cette étape est nécessaire pour obtenir de bonnes performances des lois de commande, ou dans le cas de modèles d'écosystèmes lacustres où les simulations issues des modèles sont utilisées pour acquérir de la connaissance.

Si mes recherches étaient motivées au départ par la finalité de la commande, mes travaux dans ce domaine occupent désormais une faible partie de mon temps. Ce sont maintenant les modèles qui sont au cœur de mes recherches. Tous mes travaux m'ont amené à me questionner sur ces objets, sur leur rôle, leur utilité. Ce sont pour moi des moyens de communication très puissants, qui permettent d'échanger avec les chercheurs des autres communautés. Ils permettent également de formaliser des concepts et de tester des hypothèses. Ils sont pour moi un moyen de faire de l'expérimentation numérique, en regroupant la connaissance issue de divers domaines dans un même objet. C'est donc un outil multidisciplinaire, qui doit se construire en collaboration avec les scientifiques des autres communautés.

Cette multidisciplinarité est désormais indispensable à mes recherches. Je ne conçois plus aujourd'hui de faire seule un modèle sans solliciter des chercheurs du domaine applicatif. La lecture d'articles pourrait sembler suffisante mais rien ne remplace les discussions avec les chercheurs, les échanges et réflexions devant un schéma conceptuel ou des simulations ! Je rejoins en ce sens l'avis de Pierre Joliot qui dit (Joliot 2001) : *“La caractéristique la plus remarquable des sciences de l'environnement reste d'associer autour d'une même problématique toutes les disciplines scientifiques, depuis les sciences humaines jusqu'aux mathématiques, en passant par les sciences de la vie, la physique, la chimie et les sciences de la terre”*.

J'ai donc pris goût à la recherche multidisciplinaire mais également à la recherche finalisée. L'ensemble de mes travaux est en effet guidé par les applications. Il est important pour moi de pouvoir contribuer ainsi à des objectifs concrets. J'y trouve de la stimulation dans un premier temps et à terme de la satisfaction. C'est cette même démarche que je souhaite suivre dans l'avenir.

Bibliographie

Rita Antonelli et Alessandro Astolfi. Continuous stirred tank reactors: easy to stabilise? *Automatica* **39**.(10) (2003), 1817-1827.

J. Audounet, F.A. Devy-Vareta et G. Montseny. Pseudo-invariant diffusive control. In : *14th International Symposium of Mathematical Theory of Networks and Systems (MTNS'2000), Perpignan (France)*. 2000, pp.19-23.

J. Audounet et J.M. Roquejoffre. An asymptotic fractional differential model of spherical flame. *European Series on Applied and Industrial Mathematics (ESAIM): Proceedings* **5**.(4) (1998), 15-28.

J. Audounet, J.M. Roquejoffre et H. Rouzaud. Numerical simulation of a point-source initiated flame ball with heat losses. *European Series on Applied and Industrial Mathematics (ESAIM): Modélisation Mathématique et Analyse Numérique (M2AN)* **36**.(2) (2002), 273-291.

Pierre Auger. Utilisation des mathématiques en biologie. *Gazette de la SM (Société Mathématique de France)* (86) (2000), 47.

Pierre Auger, R Bravo de La Parra, Jean-Christophe Poggiale, E Sánchez et L Sanz. Aggregation methods in dynamical systems and applications in population and community dynamics. *Physics of Life Reviews* **5**.(2) (2008), 79-105.

Pierre Auger, Christophe Lett et Jean-Christophe Poggiale. *Modélisation mathématique en écologie-2e éd.: Cours et exercices corrigés*. Dunod, 2015.

Tristan Babey, Jean-Raynald De Dreuzy et Céline Casenave. Multi-Rate Mass Transfer (MRMT) models for general diffusive porosity structures. *Advances in Water Resources* **76** (2015), 146-156. DOI : [10.1016/j.advwatres.2014.12.006](https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2014.12.006).

Tristan Babey, Jean-Raynald De Dreuzy, Alain Rapaport et Céline Casenave. *Impact of immobile porosity architecture on reactive transport in mobile/immobile models*. American Geophysical Union Fall Meeting (AGU 2013). Poster. Déc. 2013. <https://hal.inria.fr/hal-01086215>.

Grigory I Barenblatt, Iu P Zheltov et IN Kochina. Basic concepts in the theory of seepage of homogeneous liquids in fissured rocks [strata]. *Journal of applied mathematics and mechanics* **24**.(5) (1960), 1286-1303.

George Bastin. *Modélisation et analyse des systèmes dynamiques*. 2013. <https://perso.uclouvain.be/georges.bastin/sysdyn.pdf>.

Gemma Beltran, Maite Novo, José M. Guillamón, Albert Mas et Nicolas Rozès. Effect of fermentation temperature and culture media on the yeast lipid composition and wine volatile compounds.

en. *International Journal of Food Microbiology* **121**.(2) (jan. 2008), 169-177. ISSN : 01681605. DOI : [10.1016/j.ijfoodmicro.2007.11.030](https://doi.org/10.1016/j.ijfoodmicro.2007.11.030).

Alan A Berryman. Population theory: an essential ingredient in pest prediction, management, and policy-making. *American entomologist* **37**.(3) (1991), 138-142.

Anne Bisson, Simon Boudsocq, Céline Casenave, Sébastien Barot, Raphaël J. Manlay, Jonathan Vayssières, Dominique Masse et Tanguy Daufresne. West African mixed farming systems as meta-ecosystems: A source-sink modelling approach. *Ecological Modelling* **412** (2019), 108803. DOI : [10.1016/j.ecolmodel.2019.108803](https://doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2019.108803).

Anne Bisson, Céline Casenave, Simon Boudsocq et Tanguy Daufresne. Maximization of fertility transfers from rangeland to cropland: the contribution of control theory. *Journal of Theoretical Biology* **469** (2019), 187-200. DOI : [10.1016/j.jtbi.2019.01.039](https://doi.org/10.1016/j.jtbi.2019.01.039).

Anne Bisson, Noémie Pichon, Simon Boudsocq, Tanguy Daufresne, Céline Casenave, Sébastien Barot et Dominique Masse. *Impact of land-use changes on biogeochemical cycles and fertility transfers in mixed-farming systems of West Africa*. 5. International EcoSummit: Ecological Sustainability: Engineering Change. Poster. Août 2016. <https://hal.inrae.fr/hal-02798227>.

J.F.F.P. Bos et G.W.J. Van De Ven. Mixing specialized farming systems in Flevoland (The Netherlands): agronomic, environmental and socio-economic effects. *Netherlands Journal of Agricultural Science* (1999), 185-200.

Seth Bullock. Levins and the lure of artificial worlds. *The Monist* **97**.(3) (2014), 301-320.

Ph. Carmona et L. Coutin. Fractional Brownian Motion and the Markov Property. *Electronic Communications in Probability* **3** (1998), 95-107.

Céline Casenave. Identification of Time-Non Local Models under Diffusive Representation. In : *4th IFAC symposium on system, structure and control*. Ancona, Italy, sept. 2010, pp.378-385. DOI : [10.3182/20100915-3-IT-2017.00062](https://doi.org/10.3182/20100915-3-IT-2017.00062). <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01061520>.

Céline Casenave. Time-local formulation and identification of implicit Volterra models by means of diffusive representation. *Automatica* **47**.(10) (2011), 2273-2278. DOI : [10.1016/j.automatica.2011.08.007](https://doi.org/10.1016/j.automatica.2011.08.007).

Céline Casenave et Anne Bisson. Control of the crop-production in a network of agricultural plots. In : *28th Mediterranean Conference on Control and Automation (MED'2020)*. 28th Mediterranean Conference on Control and Automation (MED'2020). Saint-Raphaël, France : IEEE, sept. 2020, pp.1104-1109. DOI : [10.1109/MED48518.2020.9183061](https://doi.org/10.1109/MED48518.2020.9183061). <https://hal.inrae.fr/hal-02935524>.

Céline Casenave, Anne Bisson, Simon Boudsocq et Tanguy Daufresne. Impact of biological nitrogen fixation and livestock management on the manure transfer from grazing land in mixed farming systems. *Journal of Theoretical Biology* **545** (juill. 2022), 111136. DOI : [10.1016/j.jtbi.2022.111136](https://doi.org/10.1016/j.jtbi.2022.111136).

Céline Casenave et Denis Dochain. *European project CAFE WP7: Process monitoring and control - Deliverable 7.2: Full-scale performance of the control laws in different product manufacturing end users*. Contract. 2013. <https://hal.inria.fr/hal-00859574>.

Céline Casenave, Denis Dochain, Graciela Alvarez, Marcela Arellano, Hayat Benkhelifa et Denis Leducq. Control of a nonlinear ice cream crystallization process. In : *9th IFAC Symposium on Nonlinear Control Systems (NOLCOS)*. Toulouse, France, sept. 2013, pp.717-722. DOI : [10.3182/20130904-3-FR-2041.00045](https://doi.org/10.3182/20130904-3-FR-2041.00045). <https://hal.inria.fr/hal-00859552>.

Céline Casenave, Denis Dochain, Graciela Alvarez, Marcela Arellano, Hayat Benkhelifa et Denis Leducq. Model identification and reduction for the control of an ice cream crystallization process. *Chemical Engineering Science* **119** (2014), 274-287. DOI : [10.1016/j.ces.2014.08.030](https://doi.org/10.1016/j.ces.2014.08.030).

Céline Casenave, Denis Dochain, Graciela Alvarez, Hayat Benkhelifa, Denis Flick et Denis Leducq. Steady-state and stability analysis of a population balance based nonlinear ice cream crystallization model. In : *American Control Conference (ACC) 2012*. Proceedings of the American Control Conference. Montréal, Canada : IEEE, juin 2012, pp.6 p. DOI : [10.1109/ACC.2012.6314813](https://doi.org/10.1109/ACC.2012.6314813). <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00854398>.

Céline Casenave, Denis Dochain, Jérôme Harmand, Marc Perez, Alain Rapaport et Jean-Marie Sablayrolles. Control of a Multi-Stage Continuous Fermentor for the study of the wine fermentation. In : *19th IFAC World Congress 2014*. T. 19, part. 1. World Congress. Application Paper Prize (APP). Cap Town, South Africa, août 2014. DOI : [10.3182/20140824-6-ZA-1003.00627](https://doi.org/10.3182/20140824-6-ZA-1003.00627). <https://hal.inria.fr/hal-01064704>.

Céline Casenave et Emmanuel Montseny. Dissipative state formulations and numerical simulation of a porous medium for boundary absorbing control of aeroacoustic waves. In : *17th IFAC World Congress*. Seoul, South Korea, juill. 2008, pp.13432-13437. DOI : [10.3182/20080706-5-KR-1001.02275](https://doi.org/10.3182/20080706-5-KR-1001.02275). <https://hal.inria.fr/hal-01061508>.

Céline Casenave et Emmanuel Montseny. Simplification of dynamic problems by time-scale transformation: application to the nonlinear control with input positive constraints. In : *20th IFAC World Congress 2017*. T. 50. IFAC-PapersOnLine. Conférence Paper Archive 1. Toulouse, France : Elsevier Ltd, juill. 2017, pp.10691-10696. DOI : [10.1016/j.ifacol.2017.08.2218](https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2017.08.2218). <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01689062>.

Céline Casenave et Emmanuel Montseny. Time-local dissipative formulation and stable numerical schemes for a class of integrodifferential wave equations. *SIAM Journal on Applied Mathematics* **68**.(6) (juill. 2008), 1763-1783. DOI : [10.1137/070693710](https://doi.org/10.1137/070693710).

Céline Casenave, Emmanuel Montseny et Gérard Montseny. System identification by operatorial cancellation of nonlinear terms and application to a class of Volterra models. *International Journal of Robust and Nonlinear Control* **27**.(8) (mai 2017), pp.1211-1241. DOI : [10.1002/rnc.3622](https://doi.org/10.1002/rnc.3622).

Céline Casenave, Emmanuel Montseny et Lionel Séguier. Formulation différentielle dissipative d'un modèle de paroi absorbante en aéroacoustique. *Comptes Rendus Mécanique* **336**.(4) (2008), 398-403. DOI : [10.1016/j.crme.2007.12.004](https://doi.org/10.1016/j.crme.2007.12.004).

Céline Casenave et Gérard Montseny. A Cancellation Operator Suitable for Identification of Nonlinear Volterra Models. In : *IFAC Workshop on Control of Distributed Parameter Systems, CDPS 2009*. Toulouse, France, juill. 2009. <https://hal.inria.fr/hal-01061526>.

Céline Casenave et Gérard Montseny. Diffusive Identification of Volterra Models by Cancellation of the Nonlinear Term. In : *15th IFAC Symposium on System Identification, SYSID 2009*. Saint-Malo, France, juill. 2009, pp.640-645. DOI : [10.3182/20090706-3-FR-2004.00106](https://doi.org/10.3182/20090706-3-FR-2004.00106). <https://hal.inria.fr/hal-01061517>.

Céline Casenave et Gérard Montseny. Identification and state realization of non-rational convolutive models by means of diffusive representation. *IET Control Theory and Applications* **5**.(7) (mai 2011), 934-942. DOI : [10.1049/iet-cta.2010.0229](https://doi.org/10.1049/iet-cta.2010.0229).

Céline Casenave et Gérard Montseny. Identification of Nonlinear Volterra Models by Means of Diffusive Representation. In : *17th IFAC World Congress*. Seoul, South Korea, juill. 2008, pp.4024-4029. DOI : [10.3182/20080706-5-KR-1001.00677](https://doi.org/10.3182/20080706-5-KR-1001.00677). <https://hal.inria.fr/hal-01061509>.

Céline Casenave et Gérard Montseny. Introduction to diffusive representation. In : *4th IFAC symposium on system, structure and control*. Ancona, Italy, sept. 2010, pp.15-17. DOI : [10.3182/20100915-3-IT-2017.00064](https://doi.org/10.3182/20100915-3-IT-2017.00064). <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00854381>.

Céline Casenave et Gérard Montseny. Optimal identification of delay-diffusive operators and application to the acoustic impedance of absorbent materials. In : *7th IFAC Workshop on Time*

delay Systems (IFAC TDS 2007). Nantes, France, sept. 2007. <https://hal.inria.fr/hal-01061527>.

Céline Casenave et Gérard Montseny. “Optimal identification of delay-diffusive operators and application to the acoustic impedance of absorbent materials”. In : *Topics in Time Delay Systems*. Springer, 2009, pp.315-325. DOI : [10.1007/978-3-642-02897-7_27](https://doi.org/10.1007/978-3-642-02897-7_27). <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00833051>.

Céline Casenave et Marc Perez. Control of a class of nonlinear cascade systems with input-dependent saturations. In : *27th Chinese Control and Decision Conference (CCDC)*. Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE). Singapour, USA. Qingdao, China, mai 2015, pp.np. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01154868>.

Céline Casenave, Marc Perez, Denis Dochain, Jérôme Harmand, Alain Rapaport et Jean-Marie Sablayrolles. Antiwindup Input-Output Linearization Strategy for the Control of a Multistage Continuous Fermenter With Input Constraints. *IEEE Transactions on Control Systems Technology* **28**.(3) (2020), 766-775. DOI : [10.1109/TCST.2019.2892932](https://doi.org/10.1109/TCST.2019.2892932).

Céline Casenave, Antoine Rousseau et Joseph Luis Kahn Casapia. *Couplage et réduction de modèles hydro-écologiques pour la simulation d'écosystèmes aquatiques d'eau douce*. 7èmes journées scientifiques du LabEx NUMEV. Poster. 2018. <https://hal.inria.fr/hal-01955787>.

Céline Casenave, Cristian Trelea, Jean-Roch Mouret, Jean-Marie Sablayrolles, Stéphanie Passot, Bruno Perret, Fernanda Fonseca, Carlos Vilas, Hayat Benkhelifa, Denis Leducq, Graciela Alvarez, Verena Eisner-Schadler, Janneke De Kramer, Arnoud Togtema, Youri Grushkin, Ruud Van Der Sman et Martijntje Vollebregt. *European project CAFE WP3: Process experiments - Deliverable 3.3: Test of optimal control strategies*. Contract. inria, 2013. <https://hal.inria.fr/hal-00859575>.

P.D. Christofides. “Nonlinear Model Reduction and Control of Particulate Processes”. In : *Particle Technology Series: Model-Based Control of Particulate Processes*. T. 14. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (The Netherlands), 2002, pp.9-33.

Ryszard J Chróst et Jürgen Overbeck. Kinetics of alkaline phosphatase activity and phosphorus availability for phytoplankton and bacterioplankton in lake plu\see (North German Eutrophic Lake). *Microbial ecology* **13**.(3) (1987), 229-248.

Cory C Cleveland, Alan R Townsend, David S Schimel, Hank Fisher, Robert W Howarth, Lars O. Hedin, Steven S. Perakis, Erika F Latty, Joseph C Von Fischer, Adrien Elseroad et Matt F Wasson. Global patterns of terrestrial biological nitrogen (N₂) fixation in natural ecosystems. *Global Biogeochem. Cycles* **13**.(2) (juin 1999), 623-645. ISSN : 08866236. DOI : [10.1029/1999GB900014](https://doi.org/10.1029/1999GB900014).

C.B.B. Costa, M.R.W. Maciel et R.M. Filho. Considerations on the crystallization modeling: Population balance solution. *Computers & Chemical Engineering* **31**.(3) (2007), 206-218.

Jim M Cushing. *Integrodifferential equations and delay models in population dynamics*. T. 20. Springer Science & Business Media, 2013.

R. David, D. Dochain, J.-R. Mouret, A. Vande Wouwer et J.-M. Sablayrolles. Nitrogen-backed modeling of wine-making in standard and nitrogen-added fermentations. *Bioprocess and Biosystems Engineering* (fév. 2013). ISSN : 1615-7591, 1615-7605. DOI : [10.1007/s00449-013-0914-6](https://doi.org/10.1007/s00449-013-0914-6).

Y Degerli, F Lavernhe, P Magnan et J Farre. Bandlimited 1/f α -noise source. *Electronics Letters* **35**.(7) (1999), 521-522.

F.A. Devy-Vareta, J. Audounet, D. Matignon et G. Montseny. Pseudo-invariance by matched scaling: application to robust diffusive control of a flexible beam. In : *2nd European Conference on Structural Control*. 2000.

- Robert J. Diaz et Andrew Solow. *Ecological and economic consequences of hypoxia*. Rapp. tech. NOAA Coastal Ocean Program, 1999. <https://tamug-ir.tdl.org/tamug-ir/handle/1969.3/27540>.
- Denis Dochain. *Automatique des bioprocédés*. Hermes Science Publication, 2001.
- Francis J. Doyle Doyle III. An Anti-Windup Input-Output Linearization Scheme for SISO Systems. *Journal of Process Control* **9**.(3) (1999), 213-220.
- Anne-Marie Drouin. Le modèle en questions. *Aster* (7) (1988). ISSN : 0297-9373. DOI : [10.4267/2042/9214](https://doi.org/10.4267/2042/9214).
- Serge Frontier, Denise Pichod-Viale, Alain Leprêtre, Dominique Davoult et Christophe Luczak. *Ecosystèmes: structure, fonctionnement, évolution*. Sciences Sup, 3ème édition, Dunod, Paris, 2004.
- G. Garcia et J. Bernussou. Identification of the dynamics of a lead acid battery by a diffusive model. *European Series on Applied and Industrial Mathematics (ESAIM): Proceedings* **5** (1998), 87-98.
- Teresa Garde-Cerdán et Carmen Ancín-Azpilicueta. Effect of the addition of different quantities of amino acids to nitrogen-deficient must on the formation of esters, alcohols, and acids during wine alcoholic fermentation. en. *LWT - Food Science and Technology* **41**.(3) (avr. 2008), 501-510. ISSN : 0023-6438. DOI : [10.1016/j.lwt.2007.03.018](https://doi.org/10.1016/j.lwt.2007.03.018).
- S. Gasser. “Etude des propriétés acoustiques et mécaniques d’un matériau métallique poreux modèle à base de sphères creuses de nickel”. Thèse de doct. Institut National Polytechnique de Grenoble, 2003.
- J.-E. Gonzalez. “Contribution au contrôle par la modélisation d’un procédé de cristallisation en continu”. Thèse de doct. Agroparistech, 2012.
- Edna Granéli et Jefferson T Turner. *Ecology of harmful algae*. English. Berlin; New York : Springer, 2006. <http://public.ebib.com/choice/publicfullrecord.aspx?p=371724>.
- Volker Grimm. Mathematical models and understanding in ecology. *Ecological modelling* **75** (1994), 641-651.
- Joao Guilherme Caldas Steinstraesser, Carole Delenne, Pascal Finaud-Guyot, Vincent Guinot, Joseph Luis Kahn Casapia et Antoine Rousseau. Upscaled shallow water modeling with SW2D-Lemon for urban flood simulation. In : *EGU General Assembly Conference Abstracts*. 2021, pp. EGU21-8212.
- Roy Haggerty et Steven M Gorelick. Multiple-rate mass transfer for modeling diffusion and surface reactions in media with pore-scale heterogeneity. *Water Resources Research* **31**.(10) (1995), 2383-2400.
- M. A. Henson et D. E. Seborg. Feedback linearizing control. *Nonlinear process control* (1997), 149-231.
- M. Herrero, P. K. Thornton, A. M. Notenbaert, S. Wood, S. Msangi, H. A. Freeman, D. Bossio, J. Dixon, M. Peters, J. Van De Steeg, J. Lynam, Parthasarathy Rao, S. MacMillan, B. Gerard, J. McDermott, C. Seré et M. Rosegrant. *Smart investments in sustainable food production: Revisiting mixed crop-livestock systems*. Fév. 2010. DOI : [10.1126/science.1183725](https://doi.org/10.1126/science.1183725).
- Jef Huisman, Hans C. P. Matthijs et Petra M. Visser, éd. *Harmful cyanobacteria*. Aquatic ecology series v. 3. Dordrecht ; Norwell, MA : Springer, 2005. ISBN : 1-4020-3009-6.
- Pierre Joliot. *Recherche passionnément (La)*. Odile Jacob, 2001.
- Sven Erik Jorgensen et Giuseppe Bendoricchio. *Fundamentals of ecological modelling*. Elsevier, 2001.

- Guy Joulin. Point-source initiation of lean spherical flames of light reactants: an asymptotic theory. *Combustion science and technology* **43**.(1-2) (1985), 99-113.
- Joseph Luis Kahn Casapia, Céline Casenave et Antoine Rousseau. Coupling and reduction of hydro-ecological models for the simulation of freshwater aquatic ecosystems. In : *Congrès d'Analyse Numérique pour les Jeunes*. World Wide Web, France, déc. 2020. <https://hal.inria.fr/hal-03148049>.
- Andreas Kamilaris, Andries Engelbrecht, Andreas Pitsillides et Francesc X Prenafeta-Boldú. Transfer of manure as fertilizer from livestock farms to crop fields: The case of Catalonia. *Computers and Electronics in Agriculture* **175** (2020), 105550.
- Sandeep Kumar, Heidi Sieverding, Liming Lai, Nleya Thandiwe, Brian Wienhold, Daren Redfearn, David Archer, David Ussiri, Derek Faust, Douglas Landblom et al. Facilitating crop–livestock reintegration in the northern great plains. *Agronomy Journal* **111**.(5) (2019), 2141-2156.
- E.A. Lantinga et R. Rabbinge. “The renaissance of mixed farming systems: a way towards sustainable agriculture.” In : *Book of Abstracts 4th Congr. European Society for Agronomy, Veldhoven, The Netherlands*. 1996, pp.428-429.
- W.G. Large et S. Pond. Open Ocean Momentum Flux Measurements in Moderate to Strong Winds. *Journal of Physical Oceanography* **11** (1980), 324-336.
- L. Laudebat. “Modélisation et identification sous représentation diffusive de comportements dynamiques non rationnels en génie électrique”. Thèse de doct. Université de Toulouse, 2003.
- Jean-Marie Legay. *L'expérience et le modèle: un discours sur la méthode*. INRA editions, 1996.
- Gilles Lemaire, Alan Franzluebbbers, Paulo César de Faccio Carvalho et Benoît Dedieu. Integrated crop–livestock systems: Strategies to achieve synergy between agricultural production and environmental quality. *Agriculture, Ecosystems & Environment* **190** (2014), 4-8.
- D. Levadoux et G. Montseny. Diffusive formulation of the impedance operator on circular boundary for 2D wave equation. In : *The Sixth International Conference on Mathematical and Numerical Aspects of Wave Propagation*. 2003.
- Richard Levins. The strategy of model building in population biology. *American scientist* **54**.(4) (1966), 421-431.
- AM Liebhold. Use and abuse of insect and disease models in forest pest management: past, present, and future. *Sustainable Ecological Systems: Implementing an Ecological Approach to Land Management. Tech. Rep. RM-247. US Department of Agriculture, Forest Service* (1994), 204-210.
- J.A. Logan. In defense of big ugly models. *American Entomologist* **40**.(4) (1994), 202-207.
- Jesse A Logan. “Derivation and analysis of composite models for insect populations”. In : *Estimation and Analysis of Insect Populations*. Springer, 1989, pp.278-288.
- M. Louveaux. *Analyse de références bibliographiques avec R*. 2018. <https://marionlouveaux.fr/fr/blog/bibliography-analysis/>.
- Chloe MacLaren, Jonathan Storkey, Johann Strauss, Pieter Swanepoel et Katharina Dehnen-Schmutz. Livestock in diverse cropping systems improve weed management and sustain yields whilst reducing inputs. *Journal of Applied Ecology* **56**.(1) (2019), 144-156.
- S. Malherbe, V. Fromion, N. Hilgert et J.-M. Sablayrolles. Modeling the effects of assimilable nitrogen and temperature on fermentation kinetics in enological conditions. *Biotechnology and Bioengineering* **86**.(3) (mai 2004), 261-272. ISSN : 0006-3592, 1097-0290. DOI : [10.1002/bit.20075](https://doi.org/10.1002/bit.20075).
- Marvin Minsky. *Matter, mind and models* (1965).
- Ana M. Molina, Jan H. Swiegers, Cristian Varela, Isak S. Pretorius et Eduardo Agosin. Influence of wine fermentation temperature on the synthesis of yeast-derived volatile aroma compounds. en.

Applied Microbiology and Biotechnology **77**.(3) (déc. 2007), 675-687. ISSN : 0175-7598, 1432-0614. DOI : [10.1007/s00253-007-1194-3](https://doi.org/10.1007/s00253-007-1194-3).

Emmanuel Montseny et Céline Casenave. Analysis, simulation and impedance operator of a nonlocal model of porous medium for acoustic control. *Journal of Vibration and Control* **21**.(5) (avr. 2015), pp. 1012-1028. DOI : [10.1177/1077546313493815](https://doi.org/10.1177/1077546313493815).

G. Montseny. *Représentation diffusive*. Hermes Science Publ., 2005.

Wolf M Mooij, Dennis Trolle, Erik Jeppesen, George Arhonditsis, Pavel V Belolipetsky, Deonatus BR Chitamwebwa, Andrey G Degermendzhy, Donald L DeAngelis, Lisette N De Senerpont Domis, Andrea S Downing et al. Challenges and opportunities for integrating lake ecosystem modelling approaches. *Aquatic Ecology* **44**.(3) (2010), 633-667.

J.R. Mouret, C. Camarasa, M. Angenieux, E. Aguera, M. Perez, V. Farines et J.M. Sablayrolles. Kinetic analysis and gas-liquid balances of the production of fermentative aromas during winemaking fermentations: Effect of assimilable nitrogen and temperature. en. *Food Research International* **62** (août 2014), 1-10. ISSN : 09639969. DOI : [10.1016/j.foodres.2014.02.044](https://doi.org/10.1016/j.foodres.2014.02.044).

Ph. Mouyon et N. Imbert. Identification of a 2D turbulent wind spectrum. *Aerospace Science and Technology* **6**.(8) (2002), 599-605.

Gianfranco Nitti. Water is not an infinite resource and the world is thirsty. *The Italian Insider* (mai 2011), 8.

Eugene Pleasants Odum et Gary W Barrett. *Fundamentals of ecology*. T. 3. Saunders Philadelphia, 1971.

H. W. Paerl et Jef Huisman. Blooms Like It Hot. en. *Science* **320**.(5872) (avr. 2008), 57-58. ISSN : 0036-8075, 1095-9203. DOI : [10.1126/science.1156721](https://doi.org/10.1126/science.1156721).

Krishna P Paudel, Keshav Bhattarai, Wayne M Gauthier et Larry M Hall. Geographic information systems (GIS) based model of dairy manure transportation and application with environmental quality consideration. *Waste Management* **29**.(5) (2009), 1634-1643.

Francesco Piccioni. "Lake ecosystems in a changing climate: strategy for coupled hydrodynamic and biogeochemical modelling". Thèse de doct. Marne-la-vallée, ENPC, 2021.

Francesco Piccioni, Céline Casenave, Meïli Baragatti, Bertrand Cloez, Yi Hong, Bruno Lemaire et Brigitte Vinçon-Leite. Automated calibration strategies in ecological modeling using high-frequency in situ data. In : *11th Symposium for European Freshwater Sciences*. Zagreb, Croatia, juin 2019. <https://hal-enpc.archives-ouvertes.fr/hal-02294366>.

Francesco Piccioni, Céline Casenave, Meïli Baragatti, Bertrand Cloez et Brigitte Vinçon-Leite. Automated calibration of a complex aquatic ecological model through Approximate Bayesian Computation. *Ecological Informatics* (2022).

Francesco Piccioni, Céline Casenave, Bruno Lemaire, Patrick Le Moigne, Philippe Dubois et Brigitte Vinçon-Leite. The thermal response of small and shallow lakes to climate change: new insights from 3D hindcast modelling. *Earth System Dynamics* **12**.(2) (avr. 2021), 439-456. DOI : [10.5194/esd-12-439-2021](https://doi.org/10.5194/esd-12-439-2021).

Francesco Piccioni, Yi Hong, Bruno Lemaire, Dubois Philippe, Denis Plec, Chenlu Li, Brigitte Vinçon-Leite, Céline Casenave, Kevin Tambosco et Jean Francois Humbert. An automatic monitoring and modelling system of cyanobacteria dynamics in urban water bodies with high-frequency measurements. In : *ELLS-IAGLR-2018 "Big lakes-small world" (European Large Lakes Symposium, International Association for Great Lakes Research)*. Evian, France, sept. 2018. <https://hal.inrae.fr/hal-027927>.

Francesco Piccioni, Yi Hong, Denis Plec, Bruno Lemaire, Brigitte Vinçon-Leite et Céline Casenave. Régime thermique d'un lac urbain en Île-de-France : quelle évolution sur les trois dernières décennies ? In : *Journées Doctorales en Hydrologie Urbaine 2018*. Paris, France, nov. 2018. <https://hal-enpc.archives-ouvertes.fr/hal-01919722>.

Francesco Piccioni, Bruno Lemaire, Céline Casenave et Brigitte Vinçon-Leite. Modelling 40 YEARS of water temperature of a small shallow lake. Is there any trend in stratification and mixing regime? In : *LAKE 2019*. 6th Workshop on Parameterization of Lakes in Numerical Weather Prediction and Climate Modelling. CNRM. Toulouse, France, oct. 2019. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02373009>.

Francesco Piccioni, Brigitte Vinçon-Leite, Yi Hong, Céline Casenave, Denis Plec, Bruno Lemaire, Chenlu Li, Hoang-Minh LE et Nicole Goutal. Cyanobacteria dynamics: Comparison of two different ecological modeling approaches. In : *18th International Conference on Harmful Algae - ICHA 2018*. Nantes, France, oct. 2018. <https://hal-enpc.archives-ouvertes.fr/hal-01962452>.

Christian J.M.G. M G Pieri. *Fertility of Soils : A future for Farming in the West African Savannah*. Berlin : Springer-Verlag, 1992. ISBN : 3-540-53283-8.

J.M. Powell, S. Fernandez-Rivera, P. Hiernaux et M.D. Turner. Nutrient Cycling in Integrated Rangeland/Cropland System of the Sahel. *Agricultural Systems* **52**.(2/3) (1996), 143-170.

Karsten Pruess. A practical method for modeling fluid and heat flow in fractured porous media. *Society of Petroleum Engineers Journal* **25**.(01) (1985), 14-26.

Boqiang Qin. *Lake Taihu, China: dynamics and environmental change*. T. 87. Springer Science & Business Media, 2008.

Alan Randolph. *Theory of particulate processes: analysis and techniques of continuous crystallization*. Academic press, New York (USA), 1971.

Louis Raynal, Jean-Michel Marin, Pierre Pudlo, Mathieu Ribatet, Christian P Robert et Arnaud Estoup. ABC random forests for Bayesian parameter inference. *Bioinformatics* **35**.(10) (2019), 1720-1728.

Stéphanie Rollero, Audrey Bloem, Carole Camarasa, Isabelle Sanchez, Anne Ortiz-Julien, Jean-Marie Sablayrolles, Sylvie Dequin et Jean-Roch Mouret. Combined effects of nutrients and temperature on the production of fermentative aromas by *Saccharomyces cerevisiae* during wine fermentation. en. *Applied Microbiology and Biotechnology* **99**.(5) (mars 2015), 2291-2304. ISSN : 0175-7598, 1432-0614. DOI : [10.1007/s00253-014-6210-9](https://doi.org/10.1007/s00253-014-6210-9).

Mariana C Rufino, Edwin C Rowe, Robert J Delve et Ken E Giller. Nitrogen cycling efficiencies through resource-poor African crop-livestock systems. *Agriculture, ecosystems & environment* **112**.(4) (2006), 261-282.

A Rumeau, P Bidan, T Lebey, L Marchin, B Barbier et S Guillemet. Behavior modeling of a CaCu₃Ti₄O₁₂ ceramic for capacitor applications. In : *2006 IEEE Conference on Electrical Insulation and Dielectric Phenomena*. IEEE. 2006, pp.23-26.

A. Rumeau. "Modélisation comportementale en génie électrique sous Représentation Diffusive : Méthode et Applications". Thèse de doct. Université de Toulouse, 2009.

A. Rumeau, P. Bidan, T. Lebey, L. Marchin, B. Barbier et S. Guillemet. Behavior modeling of a CaCu₃Ti₄O₁₂ ceramic for capacitor applications. In : *IEEE Conference on Electrical Insulation and Dielectric Phenomena*. Kansas City (Missouri USA), 2006.

Jean-Marie Sablayrolles, Claude Dubois, Claire Manginot, Jean-Louis Roustan et Pierre Barre. Effectiveness of combined ammoniacal nitrogen and oxygen additions for completion of sluggish and stuck wine fermentations. *Journal of fermentation and bioengineering* **82**.(4) (1996), 377-381.

Antonius GT Schut, Emily C Cooledge, Marc Moraine, Gerrie WJ van de Ven, Davey L Jones et David R Chadwick. Reintegration of crop-livestock systems in Europe: an overview. *Frontiers of Agricultural Science and Engineering* **8**.(1) (2021), 111-129.

David Sigeo. *Freshwater microbiology: biodiversity and dynamic interactions of microorganisms in the aquatic environment*. John Wiley & Sons, 2005.

Lena Soler. Qu'est-ce qu'un modèle scientifique? Des caractéristiques du modèle qui importent du point de vue de l'enseignement intégré de science et de technologie. *Spirale-Revue de recherches en éducation* **52**.(1) (2013), 177-214.

Arthur George Tansley. The Use and Abuse of Vegetational Concepts and Terms. en. *Ecology* **16**.(3) (juill. 1935), 284-307. DOI : [10.2307/1930070](https://doi.org/10.2307/1930070).

Zofia E. Taranu, Irene Gregory-Eaves, Peter R. Leavitt, Lynda Bunting, Teresa Buchaca, Jordi Catalan, Isabelle Domaizon, Piero Guilizzoni, Andrea Lami, Suzanne McGowan, Heather Moorhouse, Giuseppe Morabito, Frances R. Pick, Mark A. Stevenson, Patrick L. Thompson et Rolf D. Vinebrooke. Acceleration of cyanobacterial dominance in north temperate-subarctic lakes during the Anthropocene. en. *Ecology Letters* **18**.(4) (avr. 2015), 375-384. ISSN : 1461-0248. DOI : [10.1111/ele.12420](https://doi.org/10.1111/ele.12420).

David Tilman, Kenneth G Cassman, Pamela A Matson, Rosamond Naylor et Stephen Polasky. Agricultural sustainability and intensive production practices. *Nature* **418**.(6898) (2002), 671-677.

Diego Torrea, Cristian Varela, Maurizio Ugliano, Carmen Ancin-Azpilicueta, I Leigh Francis et Paul A Henschke. Comparison of inorganic and organic nitrogen supplementation of grape juice—Effect on volatile composition and aroma profile of a Chardonnay wine fermented with *Saccharomyces cerevisiae* yeast. *Food chemistry* **127**.(3) (2011), 1072-1083.

Ruud Van Der Sman, Martijntje Vollebregt, Robert David, Denis Dochain, Denis Flick, Hayat Benkhelifa, José Enrique Gonzalez-Ramirez, Denis Leducq, Graciela Alvarez, Marcela Arellano Salazar, Cristian Trelea, Ines Douania, Stéphanie Passot, Fernanda Fonseca, Carlos Vilas, Estefania López-Quiroga, Antonio Alvarez Alonso, Michael Binns, Weiguo Xie, Constantinos Theodoropoulos et Céline Casenave. *European project CAFE WP4: Model reduction, validation and simulation - Deliverable 4.2: Portable and documented simulation software for each demonstration process*. Contract. 2013. <https://hal.inria.fr/hal-00859579>.

Egbert H. Van Nes et Marten Scheffer. A strategy to improve the contribution of complex simulation models to ecological theory. en. *Ecological Modelling* **185**.(2-4) (juill. 2005), 153-164. ISSN : 03043800. DOI : [10.1016/j.ecolmodel.2004.12.001](https://doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2004.12.001).

Mar Vilanova, Tracey E. Siebert, Cristian Varela, Isak S. Pretorius et Paul A. Henschke. Effect of ammonium nitrogen supplementation of grape juice on wine volatiles and non-volatiles composition of the aromatic grape variety Albariño. en. *Food Chemistry* **133**.(1) (juill. 2012), 124-131. ISSN : 03088146. DOI : [10.1016/j.foodchem.2011.12.082](https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2011.12.082).

Brigitte Vinçon-Leite et Céline Casenave. Modelling eutrophication in lake ecosystems: A review. *Science of the Total Environment* **651**.(Part: 2) (fév. 2019), 2985-3001. DOI : [10.1016/j.scitotenv.2018.09.320](https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.09.320).

Brigitte Vinçon-Leite, Francesco Piccioni, Bruno Lemaire, Yi Hong, Denis Plec, Céline Casenave et Frédéric Soullignac. Stratification and mixing regime of a shallow polymictic lake. In : *5. IAHR Europe Congress – New challenges in hydraulic research and engineering*. IAHR. Trento, Italy, juin 2018. <https://hal.inrae.fr/hal-02789786>.

Vito Volterra. Lecons sur la Théorie Mathématique de la Lutte par la Vie. *Gauthier-Villars, Paris* **193**.(1) (1931).

JE Warren et P Jj Root. The behavior of naturally fractured reservoirs. *Society of Petroleum Engineers Journal* **3**.(03) (1963), 245-255.

WHO, éd. *Guidelines for drinking-water quality*. World Health Organization (4th ed). Geneva, 2011. ISBN : 978-92-4-154815-1.

Arthur Jones Willis. *Arthur Roy Clapham, 24 May 1904-18 December 1990*. 1994.

Tingfeng Wu, Céline Casenave, David Hamilton, Boqiang Qin et Anning Huang. Cohesive sediment transport model development supported by high spatiotemporal resolution investigation of high-turbidity events in a large shallow lake. *Water Resources Research* (2022).

Tingfeng Wu, Boqiang Qin, Anning Huang, yongwei Sheng, Shunxin Feng et Céline Casenave. Reconsideration of wind stress, wind waves, and turbulence in simulating wind-driven currents of shallow lakes in the Wave and Current Coupled Model (WCCM) version 1.0. *Geoscientific Model Development Discussions* **15**.(2) (2022), 745-769. DOI : [10.5194/gmd-15-745-2022](https://doi.org/10.5194/gmd-15-745-2022).

Wei Xiao, Shoudong Liu, Wei Wang, Dong Yang, Jiaping Xu, Chang Cao, Hanchao Li, Xuhui Lee et Xuhui Lee. Transfer coefficients of momentum, heat and water vapour in the atmospheric surface layer of a freshwater lake. *Boundary-Layer Meteorology* **148**.(3) (2013), 4479-494.

Alex Zheng, Mayuresh V. Kothare et Manfred Morari. Anti-windup design for internal model control. *International Journal of Control* **60**.(5) (1994), 1015-1024.