

Projet Scientifique Collectif
Diffusion croisée en dynamique des populations

S. Boïté, P. Goze, M. Grau, T. Molfessis, D. Sbeiti
Promotion X 2021

26 février 2025

Résumé

En dynamique des populations, la diffusion croisée permet de mettre en évidence les interactions locales conduisant à la ségrégation spatiale entre deux espèces.

Pour décrire ces effets répulsifs, nous mettons tout d'abord en place un modèle probabiliste considérant également des événements de naissance ou de mort, simulé par l'algorithme de GILLEPSIE. Cela fait naturellement apparaître à la limite un comportement déterministe correspondant à un système d'équations aux dérivées partielles. En raison de la présence d'un terme non linéaire de diffusion croisée dans le système initial, sa résolution numérique est difficile, *a fortiori* en temps long.

Afin d'atteindre et d'observer des états stationnaires du système, nous implémentons ainsi dans un deuxième temps un algorithme d'intégration efficace du modèle continu. Nous développons alors quelques conjectures sur les conditions favorisant la ségrégation à l'équilibre, et démontrons quelques premiers résultats en ce sens.

Nous expliquons et illustrons enfin pourquoi, et dans quelle mesure, le modèle continu peut être effectivement pensé comme la limite naturelle du processus aléatoire markovien.

Remerciements

Nous tenons tout particulièrement à remercier nos tuteurs, Vincent Bansaye et Maxime Breden (CMAP), pour leur disponibilité, leur bienveillance et leur pédagogie. Leurs conseils quant à l'orientation de nos recherches ainsi que sur l'interprétation de nos résultats nous ont été d'une aide immense, et ont significativement contribué à l'avancée de nos travaux.

Un grand merci également à notre coordinateur, Teddy Pichard, qui a veillé à ce que notre projet de recherche se déroule dans les meilleures conditions.

Table des matières

1	Approche stochastique	9
1.1	Simulation numérique	9
1.2	Optimisation de la simulation	12
1.2.1	Premières idées	12
1.2.2	<i>Tau-leaping</i>	13
1.3	Observons !	16
2	Approche déterministe	19
2.1	Simulation numérique	20
2.2	Étude de certains états stationnaires	21
2.3	Détail de la méthode numérique	25
3	Lien entre les modèles	29
3.1	Une limite théorique naturelle	29
3.2	Comparaison expérimentale des simulations	35

Introduction

On considère deux espèces animales représentées par leurs concentrations u et v dans l'espace. On cherche à résoudre un problème s'approchant du modèle proposé par SHEGUESADA, KAWAZAKI ET TERAMOTO : [1]

Définition. Le *modèle SKT* est décrit par le système d'équations aux dérivées partielles suivant :

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta (d_1 u + d_{11} u^2 + d_{12} uv) &= u (r_1 - a_1 u - b_1 v) \\ \partial_t v - \Delta (d_2 v + d_{21} uv + d_{22} v^2) &= v (r_2 - b_2 u - a_2 v) \end{cases} \quad \text{sur } [0, 1] \times \mathbb{R}_+.$$

où $u(x, t)$ et $v(x, t)$ sont les concentrations (positives) des deux espèces. Les coefficients sont finalement regroupés dans la matrice de diffusion \mathcal{D} et la matrice de réaction \mathcal{R} :

$$\mathcal{D} := \begin{pmatrix} d_1 & d_{11} & d_{12} \\ d_2 & d_{21} & d_{22} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathcal{R} := \begin{pmatrix} r_1 & a_1 & b_1 \\ r_2 & b_2 & a_2 \end{pmatrix}.$$

À chaque instant, les espèces ont tendance à se diffuser dans l'espace, ainsi qu'à réagir entre elles – naissance, mort... Ici, on distingue les termes de *diffusion*, à gauche, des termes de *réaction*, à droite.

Les d_i règlent la diffusion linéaire de l'espèce i , tandis que les d_{ii} règlent sa diffusion quadratique et ont tendance à éviter spécifiquement la formation de pics. Les $d_{i\bar{i}}$ sont appelés coefficients de *diffusion croisée* et deviennent prépondérants là où la coexistence uv des espèces devient trop importante : ils traduisent la tendance d'une espèce i à se ségréger par rapport à \bar{i} .

Les r_i sont les coefficients de reproduction, et les a_i ceux de mort : leur nature quadratique a tendance à éviter l'explosion des espèces. Les b_i , quant à eux, règlent la compétition qui règne entre les deux espèces, qui peut être de nature prédatrice ou mutuellement bénéfique selon le signe choisi.

Chapitre 1

Approche stochastique

Dans cette partie, on simule cette évolution déterministe de façon probabiliste – et l’on montrera dans la dernière partie comment ces deux modèles sont liés.

On se place sur un espace contenant un nombre entier d’individus de chaque espèce sur M sites discrets. Trois types d’événements peuvent se produire : le déplacement d’un individu d’un site vers un site connexe, la naissance ou la mort d’un individu. Leur probabilité de réalisation sur un intervalle de temps donné dépend de la concentration de chaque espèce et de la coexistence uv des deux espèces sur un schéma similaire à l’équation du modèle SKT, que nous expliciterons en dernière partie. Ceux-ci font évoluer la distribution globale de population et ont lieu après un certain temps de réaction.

En effet, chaque individu reste un certain temps en son site. Ce temps de séjour est, pour chaque individu, une variable aléatoire suivant une loi exponentielle dont la moyenne est inversement proportionnelle au nombre d’individus présent en son site. S’il se déplace, alors le site vers lequel le déplacement s’effectue est choisi parmi les sites connexes au site où l’individu séjourne, et ce selon une loi uniforme. Or le modèle évolue après le temps de réaction de l’individu qui réagit en premier, réactualisant les temps de réaction de tous les autres individus selon la nouvelle distribution. Ce premier temps de réaction peut donc être considéré comme temps de saut général de la distribution donnée.

1.1 Simulation numérique

On raisonne dans un premier temps à population totale constante, sans terme de naissance ni de mort. On s’attache dans cette partie à simuler la seule diffusion des individus grâce à l’algorithme de GILLEPSIE. [2]

L’algorithme de simulation du modèle stochastique ainsi que l’ensemble des scénarios initiaux mentionnés dans l’analyse qui suit sont accessibles depuis la

librairie développée pour l'occasion *PSCMarkovStochastic*. [3]

Temps de saut

On cherche d'abord à calculer le temps que met un saut à se déclencher, i.e. le temps que met le modèle à évoluer d'une distribution à la suivante et pendant lequel il ne change pas. Celui-ci peut être vu comme le temps que l'écosystème à un instant t est capable de supporter sous la pression de la compétition inter- et intra-espèces, avant qu'un individu ne cède et qu'il ne se déplace pour alléger ce poids.

Différents facteurs font pression, comme la co-existence d'espèces qui tendent à se ségréger, caractérisée par un fort produit des concentrations uv . Conformément au modèle introduit précédemment, on exprime l'envie $\lambda_n^{u/v,i}$ qu'un individu d'un site i donné a de sauter à l'étape n :

$$\begin{cases} \lambda_n^{u,i} = u_n^i(d_1 + d_{11}u_n^i + d_{12}v_n^i) \\ \lambda_n^{v,i} = v_n^i(d_2 + d_{21}u_n^i + d_{22}v_n^i) \end{cases} \quad \text{pour } i \in \{1, \dots, M\}$$

On somme ces quantités et l'on obtient la tension globale de chacune des espèces :

$$\begin{cases} \lambda_n^u = U^T(d_1\mathbf{1} + d_{11}U + d_{12}V) \\ \lambda_n^v = V^T(d_2\mathbf{1} + d_{21}U + d_{22}V) \end{cases}$$

On évalue ainsi la tension générale λ de notre distribution :

$$\lambda_n = \lambda_n^u + \lambda_n^v.$$

Le temps τ_n séparant deux instants de sauts, que l'on veut sans mémoire, est choisi suivant une loi exponentielle de paramètre λ_n .

Qui saute ?

On a défini le rythme auquel notre distribution a besoin de s'actualiser. On cherche maintenant à déterminer quelle est l'espèce qui va sauter, et dans quel site.

On peut déterminer quelle espèce se déplace en fonction des poids relatifs de u et de v . Si v pèse plus lourd que u en terme d'interactions, alors v a généralement une probabilité plus grande de se déplacer :

$$\mathbb{P}(u \text{ saute à l'instant } n) = \frac{\lambda_n^u}{\lambda_n^u + \lambda_n^v} = 1 - \mathbb{P}(v \text{ saute à l'instant } n).$$

Une fois que l'on sait quelle espèce saute, on représente la pression relative régnant en chaque site par une partition en M sites du segment $[0, 1]$. Chaque

site i possède un poids propre relatif $\lambda_n^{u,i}/\lambda_n^u$. On simule alors un curseur uniforme sur ce segment afin de désigner de quel site i partira le saut. L'individu qui saute a autant de chance de basculer dans le site situé à sa droite que celui situé à sa gauche, et l'on implémente des conditions aux bords périodiques.

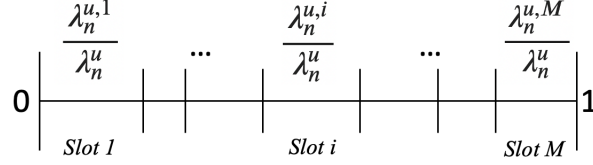


FIGURE 1.1 – Choix de l'individu qui saute

Une fois que l'on a déterminé qui saute et quand, il reste enfin à simuler le saut en lui-même, i.e le déplacement d'une certaine quantité de population d'un site de départ vers un site d'arrivée.

Approximation continue

Nous verrons que quoique aléatoires, ces évolutions de population ont certaines propriétés déterministes à la limite, et se rapprochent notamment d'une évolution que l'on peut décrire par une équation différentielle. Pour l'instant, si l'on pressent déjà que le nombre M de sites doit correspondre à une finesse de discrétisation spatiale du segment espace, le cadre discret se prête peu à ce genre de passages à la limite continu.

Si les populations sont continûment réparties sur le segment espace, il est physiquement pertinent de représenter la *concentration* de celles-ci à travers l'espace. Un individu devient alors une unité d'aire sous cette courbe discrétisée de densité.

Finalement, il faut prendre garde à initialiser correctement les conditions initiales, pour que la population contenue en chaque site soit un nombre entier. Typiquement, pour une condition initiale en escalier h approchant une allure f continue sur $[0, 1]$, on veut que la population en le site ω_i vérifie :

$$\int_{\omega_i} f \approx \frac{h(i/M)}{M} = k \in \mathbb{N}.$$

On choisit l'entier k permettant de réaliser au mieux cette approximation.

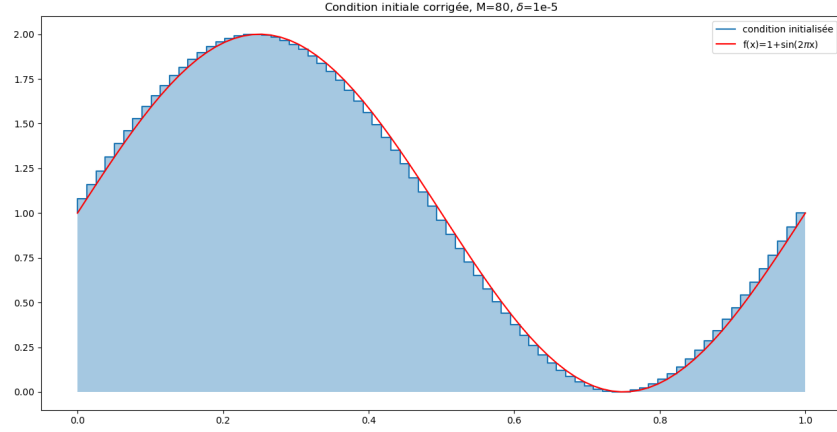


FIGURE 1.2 – Conditions initiales discrétisées

On ajoute de même les termes de *réaction* — naissance et mort. Le procédé est similaire : on tire le site au sein duquel la réaction va se produire à un instant donné, et on y crée, ou supprime un individu.

1.2 Optimisation de la simulation

1.2.1 Premières idées

Un certain nombre d'optimisations ont rapidement été tentées pour aller suffisamment loin dans la simulation et observer des états stationnaires.

Stockage « différentiel ». Puisque nous simulons un grand nombre de sauts à l'impact infinitésimal, stocker toutes les distributions au cours du temps serait très coûteux en mémoire. Ainsi, on ne garde à chaque instant du calcul que la distribution courante, et on enregistre les différents sauts sous la forme d'un triplet contenant l'espèce, le site de départ et le site d'arrivée du saut. On reconstitue le tout au moment de l'affichage. Nous avons gardé cette technique, qui s'est avérée redoutablement efficace du point de vue de la mémoire.

Deux approches concurrentes ont également été envisagées sans être retenues dans le programme final :

Sauter loin. Pour accélérer la simulation, on s'est autorisé pendant un temps à modifier l'ensemble des sites atteignables par un individu lorsqu'il saute. Plutôt que de considérer que seuls les sites immédiatement voisins au site de l'individu

sont atteignables, ce dernier pourrait atteindre des sites plus éloignés. On simule ainsi l'amplitude d'un saut selon une loi gaussienne centrée dont nous pouvons modifier la variance. Augmenter la variance de notre distribution revient à augmenter la longueur moyenne des sauts.

Cette approche nous a permis d'accélérer légèrement la simulation mais nous ne l'avons finalement pas retenue car elle était incohérente avec notre volonté de faire coïncider modèle stochastique et modèle déterministe, raccordement essentiel à notre projet.

Sauter à plusieurs. Dans la même veine, nous avons essayé de faire sauter plusieurs individus à la fois. Cela n'a permis qu'une optimisation mineure tout en nous éloignant significativement du modèle limite sur lequel nous espérons retomber dans la suite. Nous avons donc de même abandonné cette approche.

1.2.2 *Tau-leaping*

Une quatrième idée, en fait classique dans les algorithmes de type GILLEPSIE, nous a permis de largement optimiser notre programme. En profilant notre code, nous avons remarqué que le tirage aléatoire de l'espèce coûtait énormément, et qu'il était facile de l'optimiser drastiquement, quitte à perdre légèrement en exactitude. En effet, si la population est suffisante, le saut d'un seul individu change très peu l'état macroscopique du système et ne modifie donc qu'infinitement la distribution de probabilité décrivant qui sera le prochain à sauter. Or, il est plus rapide de simuler n tirages indépendants d'une même loi, que de simuler n fois un tirage d'une loi qui évolue, quoique légèrement.

Il s'agit donc de déterminer dans quelle mesure on a « le droit » d'effectuer cette approximation tout en s'attendant à des résultats « qui auraient pu être tirés » sans cette dernière. On s'intéresse notamment à la valeur de n que l'on peut raisonnablement choisir en fonction des paramètres du problème.

Cadre

Sans distinction d'espèce, soit I l'ensemble des individus présents dans le système. À l'étape k , l'individu i a une probabilité $p_{k,i}$ de sauter, et on définit la variable X_k donnant l'individu qui saute à cette étape. On choisit les X_k de manière couplée : on tire une variable aléatoire U de loi uniforme sur le segment $[0, 1]$, qui sert de « curseur » indiquant quel individu va sauter.

On définit le *temps de premier défaut* de l'approximation comme le premier instant k auquel X_k diffère de X_0 , i.e les deux mesures de probabilité produisent un résultat différent :

$$T = \inf\{k \in \mathbb{N}, X_k \neq X_0\}.$$

Ainsi :

$$\begin{aligned} (T > n) &= (X_0 = \dots = X_n) \\ &= \bigsqcup_{i \in I} \left(U \in \bigcap_{k=0}^n X_k^{-1}(\{i\}) \right). \end{aligned}$$

D'où :

$$\mathbb{P}(T \leq n) = 1 - \sum_{i \in I} \left| \bigcap_{k=0}^n X_k^{-1}(\{i\}) \right|.$$

La mesure des intervalles qui apparaissent dans cette formule est une simple fonction des $p_{k,i}$. On a ainsi relié l'évolution successive des différentes mesures et la qualité de l'approximation consistant à considérer la mesure constante, i.e la loi du temps de la première erreur.

Résultats

On développe un *notebook Python* permettant, sur une grande quantité de tirages, d'estimer la fonction de répartition de T grâce à la formule précédente. On s'attend à ce que l'approximation soit d'autant plus vraie que le déplacement d'un individu seulement est négligeable vis-à-vis de l'environnement global, i.e lorsque la quantité moyenne d'individus par site est grande.

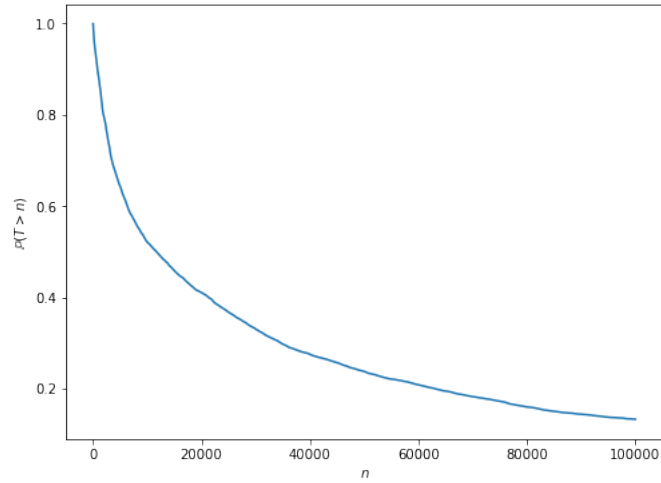


FIGURE 1.3 – Fonction de répartition typique aux ordres de grandeur précisés ci-après.

On effectue une régression exponentielle sur cette fonction et l'on observe une

fonction de répartition de la forme :

$$F_T(t) = 1 - e^{-a\sqrt{t}}.$$

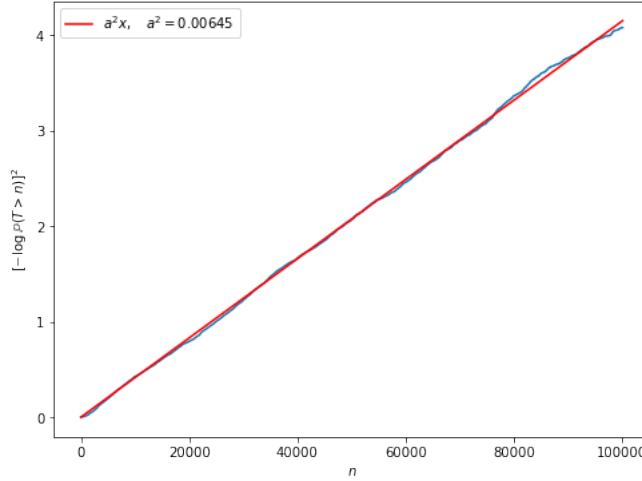


FIGURE 1.4 – Régression de $[-\log \mathbb{P}(T \leq n)]^2$ en fonction de n .

Autrement dit, T est le carré d'une loi géométrique. Pour commencer à comprendre cela, nous avons imaginé une situation limite constituée de seulement deux individus 1 et 2, à laquelle est associée une probabilité de saut p_n et q_n à l'instant n . Si à un tour p_n augmente (et q_n diminue), au tour suivant, la particule 1 aura une chance plus grande de sauter, et sa probabilité de saut tendra à diminuer, compensant l'évolution précédente. Cet effet de modération permet d'intuiter le fait que l'on trouve un temps de premier défaut supérieur à un temps géométrique.

Empiriquement, pour une densité d'environ 10^2 individus par site sur de l'ordre de 10^2 sites, l'approximation ne produit *aucune* erreur jusqu'à 10^3 sauts dans plus de 95% des cas, ce qui est très satisfaisant. On fixe donc $n = 10^3$, et l'on choisira par la suite des densités par site supérieures à $N = 10^2$ pour rester dans le cadre de cette approximation.

Efficacité finale

Alors que l'approche naïve permettait de simuler le million de sauts en 15 minutes sur un ordinateur portable classique, on est désormais en mesure de le faire en 5 secondes à peine.

1.3 Observons !

Maintenant que le code est fonctionnel et rapide, on se propose d'étudier les états d'équilibre donnés par le modèle dans des cas simples. On mettra ces intuitions en perspective avec des propriétés attendus du système limite dans la partie suivante.

On initie d'abord le modèle avec des concentrations initiales en $u(x, 0) = 1 + \cos(2\pi x)$ et $v(x, 0) = 1 + \sin(2\pi x)$, que l'on nomme scénario (S1) :

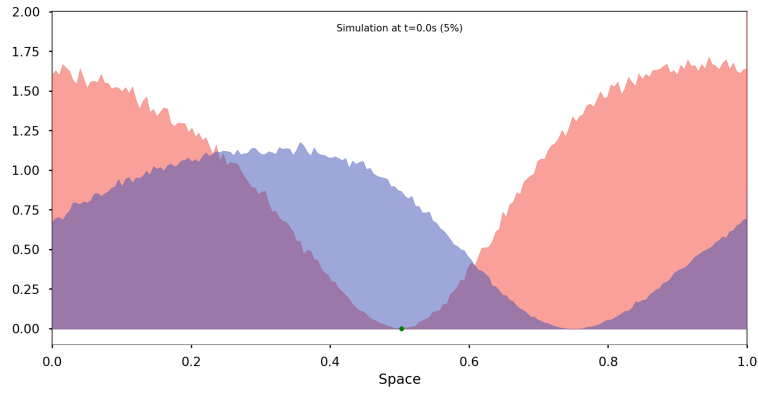


FIGURE 1.5 – État initial (10^4 individus par site, *tau-leaping* tous les $n = 10^3$ sauts).

Au bout de 30 millions de sauts, on observe l'équilibre suivant :

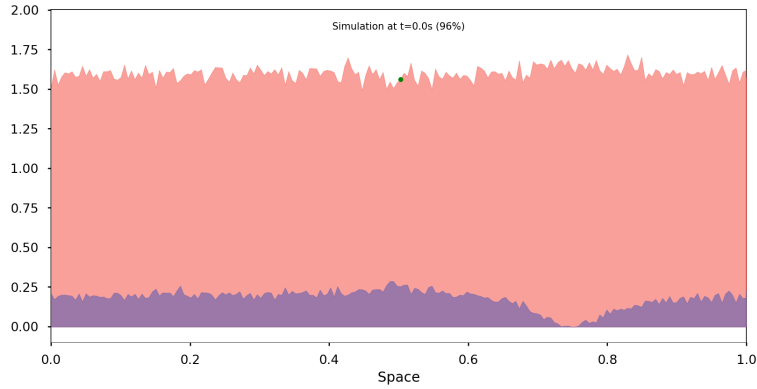


FIGURE 1.6 – État final (10^4 individus par site, *tau-leaping* tous les $n = 10^3$ sauts).

L'équilibre se caractérise par la convergence du produit uv des concentrations vers une constante : c'est un comportement attendu dans le cas déterministe, comme nous l'expliquerons par la suite. L'effet de la diffusion linéaire est observé sur la diminution d'amplitude de la répartition sinusoïdale de population. L'équilibre final est tout de même régi par des interactions croisées à l'échelle locale : on observe des points de croisement, qui montre que les espèces ont tendance à se repousser d'un site à l'autre.

Si l'on modélise maintenant un scénario ($S2$) dans lequel l'une des populations est hautement majoritaire sur une zone de l'espace comme suit :

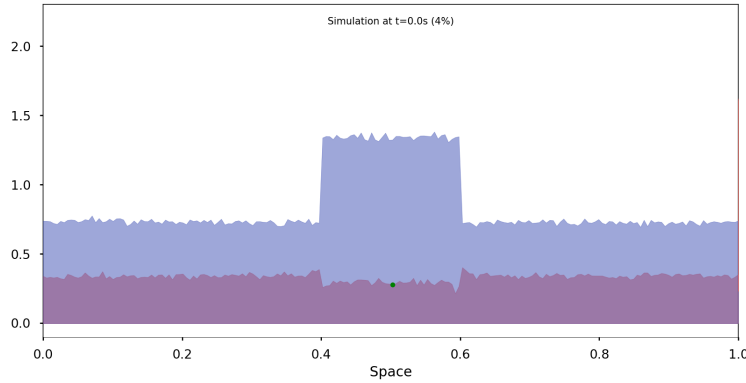


FIGURE 1.7 – État initial (10^4 individus par site, *tau-leaping* tous les $n = 10^3$ sauts).

La diffusion linéaire « prend le dessus » et conduit à l'homogénéisation complète des deux espèces. C'est conforme à ce que la répartition relative des populations pouvait laisser intuituer, puisque le poids est principalement absorbé par l'accumulation de l'espèce u sur un même espace étroit.

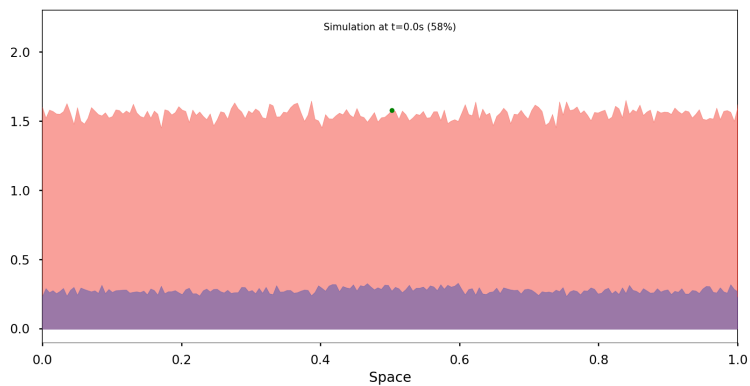


FIGURE 1.8 – État final (10^4 individus par site, *tau-leaping* tous les $n = 10^3$ sauts).

L'enjeu sera par la suite de voir si le modèle SKT permet d'observer la ségrégation spatiale à l'équilibre à travers des motifs plus intéressants. Trouvera-t-on une situation dans laquelle la diffusion linéaire ne prend pas le dessus, et où l'on observera des situations que l'on connaît chez certaines espèces animales ?

Chapitre 2

Approche déterministe

Pour rappel, le *modèle SKT* tel que nous l'étudions est constitué du système d'équations suivantes :

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta (d_1 u + d_{11} u^2 + d_{12} uv) &= u (r_1 - a_1 u - b_1 v) \\ \partial_t v - \Delta (d_2 v + d_{21} uv + d_{22} v^2) &= v (r_2 - b_2 u - a_2 v) \end{cases} \quad \text{sur } [0, 1] \times \mathbb{R}_+.$$

où $u(x, t)$ et $v(x, t)$ sont les concentrations des deux espèces. Les coefficients sont regroupés dans la matrice de diffusion \mathcal{D} et la matrice de réaction \mathcal{R} :

$$\mathcal{D} := \begin{pmatrix} d_1 & d_{11} & d_{12} \\ d_2 & d_{21} & d_{22} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathcal{R} := \begin{pmatrix} r_1 & a_1 & b_1 \\ r_2 & b_2 & a_2 \end{pmatrix}.$$

On se place toujours dans le cadre de conditions au bord périodiques, mais les résultats que nous montrerons se généralisent à des conditions de NEUMANN homogènes au bord.

Remarque. SKT généralise un grand nombre de modèles classiquement utilisés en dynamique des populations : soient a , b , c et d des réels positifs. Le système proie-prédateur de LOTKA-VOLTERRA correspond à :

$$\mathcal{D} := \mathbf{0}_{2 \times 3} \quad \text{et} \quad \mathcal{R} := \begin{pmatrix} a & 0 & b \\ -d & -c & 0 \end{pmatrix}.$$

On peut montrer, sous certaines conditions, que le modèle semi-continu est la limite déterministe du cadre stochastique présenté précédemment. Nous avons rapidement développé une librairie permettant de résoudre cette classe de systèmes afin de pouvoir :

1. Intuire par l'expérience le rôle des différents paramètres ;
2. Quantifier l'écart entre les deux modèles, voire la vitesse de convergence.

2.1 Simulation numérique

PySpecies est une librairie *open source* développée dans le cadre de cette étude permettant de simuler rapidement le modèle précédent [4].

Elle se base sur la méthode d'EULER implicite où le problème a été linéarisé par la méthode de NEWTON-RAPHSON. Comme nous le détaillerons par la suite, les différentes matrices jacobienues qui interviennent dans la résolution sont pré-traitées par l'algorithme de CUTHILL-MCKEE inversé, qui réduit la largeur de leur bande, permettant d'appliquer un solveur creux de complexité linéaire.

On confirme le comportement du solveur dans des cas simples, et on vérifie notamment la conservation de l'intégrale des solutions calculées dans le cas de la stricte diffusion :

Proposition. *Dans le cas où $\mathcal{R} = 0$, la population totale de chacune des espèces est conservée : les intégrales de u et de v sont constantes.*

Démonstration. Soit u et v supposées suffisamment régulières pour mener les calculs qui vont suivre – typiquement, on admet qu'elles appartiennent à l'espace de Sobolev $H^1(\Omega)$ avec $\Omega = [0, 1]$.

$$\partial_t \int_{\Omega} u = \int_{\Omega} \partial_t u = d_1 \int_{\Omega} \operatorname{div} \nabla u \, dx + d_{11} \int_{\Omega} \operatorname{div} \nabla u^2 \, dx + d_{12} \int_{\Omega} \operatorname{div} \nabla (uv) \, dx.$$

Or par les formules de Green :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \operatorname{div} \nabla u \, dx &= \int_{\partial\Omega} \nabla u \cdot n \, ds \\ &= \frac{\partial u}{\partial n}(L) - \frac{\partial u}{\partial n}(0) \\ &= 0. \end{aligned}$$

car on a choisi des conditions aux bords périodiques. Les autres intégrales s'annulent de la même manière. Cette preuve peut être généralisée dans \mathbb{R}^N à une fonction de $[0, 1]^N$ avec conditions aux bords périodiques : on voit aisément que les intégrales de $\nabla u \cdot n$ sur les faces opposées se compenseraient. \square

Remarque. Il est facile de voir que la preuve précédente peut être adaptée dans le cas de conditions de NEUMANN homogènes au bord. En effet, si $\nabla u \cdot n$ et $\nabla v \cdot n$ s'annulent sur $\partial\Omega$, les intégrales correspondantes s'annulent et la masse est également conservée.

2.2 Étude de certains états stationnaires

Dans cette sous-partie, nous identifions par l'expérience certains comportements caractéristiques de ce modèle de dynamique des populations, et nous développons des arguments théoriques afin de les expliquer.

Diffusion croisée seulement

Proposition. *Dans le cas de la seule diffusion croisée, un état stationnaire vérifie nécessairement $\Delta(uv) = 0$, soit $uv = \text{cste}$ dans le cas 1D avec conditions au bord périodiques.*

Démonstration. Si $\partial_x^2(uv) = 0$, comme la fonction est périodique, il existe $c \in [0, 1]$ tel que $\partial_x(uv)(c) = 0$, d'où $\partial_x(uv)(x) = \int_c^x \partial_x^2(uv) dx = 0$, d'où $uv = \text{cste}$. \square

Remarque. Cette proposition se généralise quelque soit la dimension avec des conditions de NEUMANN homogènes au bord.

Exemple. On choisit des concentrations initiales $u = 1 + \cos$ et $v = 1 + \sin$, et on obtient l'équilibre suivant (u est en rouge et v en bleu) :

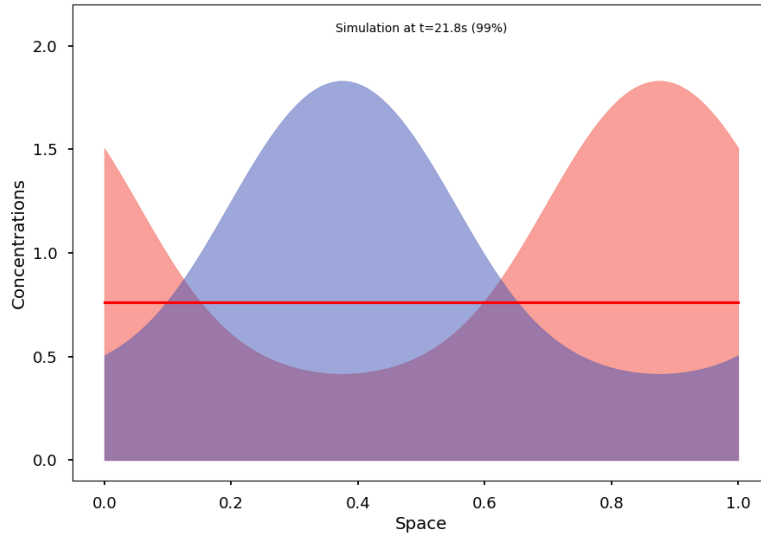


FIGURE 2.1 – Le produit des concentrations à l'équilibre est représenté en rouge.

On observe bien que uv est constant à l'équilibre.

Diffusion seulement

Proposition. *Dans le cas où $\mathcal{R} = 0$ et qu'il y a diffusion linéaire et croisée, la diffusion linéaire l'emporte à l'équilibre et mène à des solutions constantes.*

Démonstration. Dans une telle situation, les états d'équilibre vérifient par un raisonnement analogue au précédent un système de cette forme :

$$\begin{cases} u + \alpha u^2 + \beta uv &= c \\ v + \delta uv + \gamma v^2 &= d \end{cases}$$

À supposer que l'on ne s'intéresse qu'à des solutions continues, il suffit de montrer que l'application :

$$\Phi : \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \in \mathbb{R}_+^2 \mapsto \begin{pmatrix} x + \alpha x^2 + \beta xy - c \\ y + \delta xy + \gamma y^2 - d \end{pmatrix}$$

n'admet que des zéros isolés. Il suffit pour ce faire que le déterminant de la jacobienne de Φ soit non nul en chacun de ses zéros : par le théorème d'inversion locale, Φ serait alors injective au voisinage de chacun de ses zéros. On a donc :

$$J_\Phi(x, y) = \begin{pmatrix} 1 + 2\alpha x + \beta y & \beta x \\ \delta y & 1 + \delta x + 2\gamma y \end{pmatrix},$$

ainsi :

$$\det J_\Phi(x, y) = (1 + 2\alpha x + \beta y)(1 + 2\gamma y + \delta x) - \delta\beta xy \geq 1,$$

car $x, y \geq 0$, $\alpha, \beta, \delta, \gamma \geq 0$, et car les deux termes $\delta\beta xy$ qui apparaissent s'annulent.

Ainsi, les zéros de Φ sont non dégénérés, donc isolés, ce qui conclut la preuve. \square

Sans diffusion croisée

Afin d'observer de la ségrégation spatiale à l'équilibre, il est crucial d'ajouter un terme de diffusion croisée. La démonstration complète de ce fait est complexe et aurait nécessité une étude plus approfondie, au-delà de la portée de notre PSC. Esquissons néanmoins la démarche permettant d'y parvenir.

Proposition. *Si l'on ne considère que la diffusion linéaire, on est ramenés au modèle de LOTKA-VOLTERRA compétitif avec diffusion. Dans ce cas, il y a 4 situations possibles, dans lesquelles il existe à chaque fois un état stationnaire homogène et stable : [5]*

1. *u dominante* : $r_1/r_2 > \max(a_1/b_2, b_1/a_2)$;
2. *v dominante* : $r_1/r_2 < \min(a_1/b_2, b_1/a_2)$;
3. *Compétition faible* : $a_1/b_2 > r_1/r_2 > b_1/a_2$;

4. *Compétition forte* : $a_1/b_2 < r_1/r_2 < b_1/a_2$.

Dans la situation 1 (resp. 2), l'espèce u (resp. v) prend le dessus et élimine son adversaire.

Dans la situation 3, les espèces sont en légère compétition et on peut donc espérer observer leur co-existence : on montre que l'état homogène

$$(u_\star, v_\star) = \left(\frac{r_1 a_2 - r_2 b_1}{a_1 a_2 - b_1 b_2}, \frac{r_2 a_1 - r_1 b_2}{a_1 a_2 - b_1 b_2} \right).$$

est stable.

Dans la dernière situation, au contraire, l'une ou l'autre des espèces peut prendre le dessus et les états stationnaires homogènes $(r_1/a_1, 0)$ et $(0, r_2/a_2)$ sont tous les deux stables.

Nous admettons enfin le résultat suivant, qui permet de conclure, et dont la preuve se situe dans l'article [6].

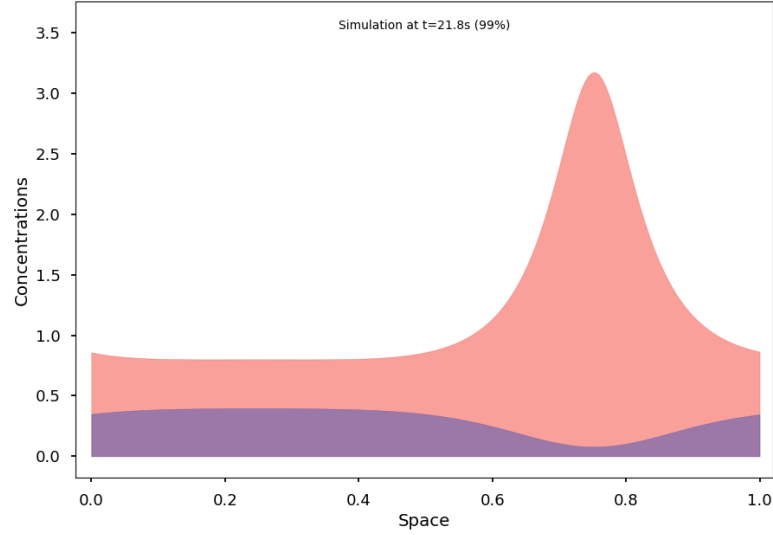
Proposition. *S'il y a seulement de la diffusion linéaire et qu'il existe un état d'équilibre non homogène, alors celui-ci est forcément instable.*

Ainsi, dans le cas de la stricte diffusion linéaire, on n'exclut pas l'existence de solutions d'équilibre ségrégées. Cependant, on ne pourra jamais converger vers une telle solution en temps long, à part si la donnée initiale est déjà parfaitement à l'équilibre, ce qui nous intéresse peu en pratique.

Ségrégation à l'équilibre ?

Dans le cas où il y a diffusion croisée et $\mathcal{R} \neq 0$, il peut exister une situation d'équilibre non homogène.

Exemple. Voici une situation d'équilibre non triviale :

FIGURE 2.2 – $d_i = 5 \cdot 10^{-3}$, $d_{12} = 3$, $r_1 = 5$, $r_2 = 2$, $a_i = 3$, $b_i = 1$.

Ici, la présence de termes de réaction permet d'observer un motif intéressant à l'équilibre, dans lequel la diffusion linéaire ne conduit pas au simple mélange homogène des espèces. Le modèle est ainsi en mesure de décrire avec succès la ségrégation spatiale telle qu'on l'observe chez certaines espèces animales !

Situation	États stationnaires
Diffusion croisée seulement	uv constant
Diffusion seulement (dont linéaire) ou pas de diffusion croisée	u et v homogènes en espace
Diffusion et réaction	Il existe un état homogène en espace Ségrégation spatiale possible

TABLE 2.1 – Résumé des résultats sur le modèle continu.

Il aurait été intéressant de s'intéresser aux conditions théoriques favorisant ces états ségrégués non triviaux à l'équilibre : nous n'avons pas eu le temps de nous pencher sur cette question.

Finalement, en voyant le résultat de la simulation ci-dessus, nos tuteurs nous ont encouragé à trouver des situations d'explosion locale de la population. Nous n'avons pas réussi à observer une telle explosion, ce qui soutient la conjecture selon laquelle de telles situations n'existent pas.

2.3 Détail de la méthode numérique

On détaille dans cette sous-partie le travail théorique ayant permis de développer la librairie *PySpecies*. Après quelques tâtonnements autour de la méthode de CRANK-NICOLSON, on a finalement retenu la méthode d'EULER implicite, tout à fait fonctionnelle, dans le programme final.

On discrétise les concentrations u et v selon des pas respectifs δx et δt . Étant donné les concentrations discrétisées $U^- \in \mathbb{R}^K$ à un instant donné, on exprime les $U \in \mathbb{R}^K$ à l'instant suivant :

$$\begin{aligned} \frac{U_k - U_k^-}{\delta t} &= c_1 \frac{U_{k+1} - 2U_k + U_{k-1}}{\delta x^2} - d_{11} \frac{U_{k+1}^2 - 2U_k^2 + U_{k-1}^2}{\delta x^2} \\ &\quad - d_{12} \frac{U_{k+1}V_{k+1} - 2U_kV_k + U_{k-1}V_{k-1}}{\delta x^2} \\ &= U_k(r_1 - s_{11}U_k - S_{12}V_k). \end{aligned}$$

On renormalise les coefficients des matrices \mathcal{D} et \mathcal{R} pour les simplifier. On note J l'opérateur cyclique de décalage sur \mathbb{R}^K :

$$J = \begin{pmatrix} & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \\ 1 & & & \end{pmatrix}$$

Grâce à cet opérateur, on résume le schéma précédent, ainsi que les conditions aux bord périodiques, en l'équation suivante :

$$\begin{aligned} 0 &= U_k - U_k^- - d_1 (JU - 2U + J^{-1}U) - d_{11} (JU^2 - 2U^2 + J^{-1}U^2) \\ &\quad - d_{12} (JUV - 2UV + J^{-1}UV) - r_1U + a_1U^2 + b_1UV. \end{aligned}$$

où AB est le vecteur obtenu en multipliant les coordonnées de A et B terme à terme. On résume cela en :

$$f_1(U, V) - U^- = 0.$$

où, en factorisant l'expression précédente :

$$\begin{aligned} f_1(U, V) &= [(1 - r_1 + 2d_1)I - d_1(J + J^{-1})] U \\ &\quad + [(a_1 + 2d_{11})I - d_{11}(J + J^{-1})] U^2 \\ &\quad + [(b_1 + 2d_{12})I - d_{12}(J + J^{-1})] UV. \end{aligned}$$

Et :

$$\begin{aligned} f_1(U, V) &= -J(d_1U + d_{11}U^2 + d_{12}UV) \\ &\quad + [(1 - r_1 + 2d_1)U + (a_1 + 2d_{11})U^2 + (b_1 + 2d_{12})UV] \\ &\quad - J^{-1}(d_1U + d_{11}U^2 + d_{12}UV). \end{aligned}$$

On définit X comme la concaténation de U et de V . On écrit par symétrie une équation analogue en V , et on doit résoudre en résumé :

$$0 = g_{X^-}(X) := \begin{pmatrix} f_1(U, V) - U^- \\ f_2(V, U) - V^- \end{pmatrix}.$$

Il s'agit de trouver le zéro d'une fonction non linéaire en les coefficients de X . Pour ce faire, on utilise la méthode de NEWTON-RAPHSON, ce qui nécessite de connaître la jacobienne \mathbf{J} de g_{X^-} :

$$\mathbf{J}(X) = \begin{pmatrix} \partial_U f_1(U, V) & \partial_V f_1(U, V) \\ \partial_U f_2(V, U) & \partial_V f_2(V, U) \end{pmatrix}.$$

Par la première expression de f_1 :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial U}(U, V) &= (1 - r_1 + 2d_1)I - d_1(J + J^{-1}) \\ &\quad + 2[(a_1 + 2d_{11})I - d_{11}(J + J^{-1})] \text{diag } U \\ &\quad + [(b_1 + 2d_{12})I - d_{12}(J + J^{-1})] \text{diag } V. \end{aligned}$$

En regroupant les facteurs en I , J et J^{-1} , on remarque que cette matrice est tridiagonale avec deux termes extrémaux correspondant aux conditions aux bords. De manière analogue :

$$\frac{\partial f_1}{\partial V}(U, V) = [(b_1 + 2d_{12})I - d_{12}(J + J^{-1})] \text{diag } U.$$

Cette matrice possède la même structure. Par symétrie, on en déduit la forme complète creuse de \mathbf{J} , que l'on stocke de manière efficace avec le module `scipy.sparse`.

On applique enfin l'algorithme de CUTHILL-MCKEE inversé, qui ne dépend que de la forme (constante) de la jacobienne \mathbf{J} pour calculer une permutation permettant de réduire la largeur de sa bande. [7]

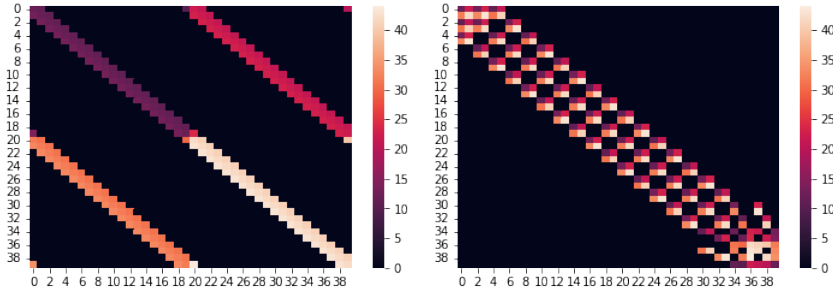
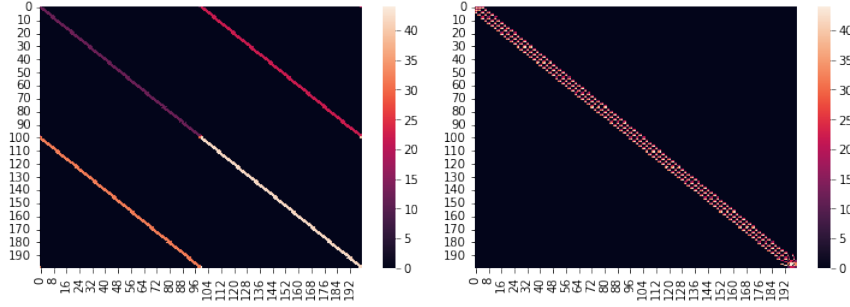


FIGURE 2.3 – Pré-traitement de la jacobienne avec $K = 20$ points d'espace.

FIGURE 2.4 – Pré-traitement de la jacobienne avec $K = 100$ points d'espace.

On affiche ici en couleur, à gauche, les coefficients potentiellement non nuls des 4 blocs de la jacobienne précédemment identifiés, et à droite, leur position d'arrivée après permutation des colonnes. On constate que quelque soit la finesse de discrétisation de l'espace considérée – et donc la taille de la matrice – la largeur de bande finale est de 7.

Cela nous permet d'appliquer un solveur de système linéaire creux type **UMFPACK**, implémenté dans la librairie **scipy.linalg**, et d'atteindre une complexité temporelle en $\mathcal{O}(n)$ cruciale à l'observation pratique d'états d'équilibre.

Chapitre 3

Lien entre les modèles

On étudie dans cette partie la convergence du modèle stochastique vers le modèle semi-continu dans le cadre du modèle SKT.

3.1 Une limite théorique naturelle

Les calculs qui vont suivre sont fondés sur le cours de MAP563 et notamment les sections 3.2.3 et 3.4 du polycopié. [8]

À cet égard, on rappelle ici la définition de générateur d'un processus markovien de saut.

Définition. Soit X_t un processus markovien de saut, caractérisé par son état initial $X_0 = x$ et la fonction taux de saut λ . On définit le **générateur** de X_t comme l'opérateur

$$Af(X) = \sum_{y \in Y_x} \lambda(x, y)(f(y) - f(x)),$$

où Y_x représente l'ensemble des états de la chaîne atteignables depuis x , et f une fonction mesurable bornée.

Ce générateur peut être vu comme un opérateur de dérivation de la loi du processus, et le théorème 3.2.23 du polycopié sus-mentionné assure que la connaissance du générateur d'un processus markovien de saut, associée à celle de l'état initiale, permet entièrement de déterminer un tel processus.

On étudie l'équation sans terme quadratique ni de réaction :

$$\begin{cases} \partial_t u &= \Delta (d_1 u + d_{12} uv) \\ \partial_t v &= \Delta (d_2 v + d_{21} uv) \end{cases} \quad \text{sur } [0, 1] \times \mathbb{R}_+.$$

où $u_t(x)$ et $v_t(x)$ sont les concentrations (positives) des deux espèces. Les coefficients sont finalement regroupés dans la matrice de diffusion \mathcal{D} :

$$\mathcal{D} := \begin{pmatrix} d_1 & d_{12} \\ d_2 & d_{22} \end{pmatrix}$$

Pour cela, on dispose dans le modèle stochastique de M sites équirépartis sur le segment $[0, 1]$ considéré périodique. On représente ces sites par des représentants de classes $j \in \mathbb{Z}/M\mathbb{Z}$. On note N le nombre moyen d'individus par site.

Soit des concentrations réelles initiales de population notées $x_0 = (u_0, v_0)$. On considère la suite de processus markoviens $(X_t^N)_{N \geq 1}$ définis sur l'espace

$$E^N = \left(\left(\frac{\mathbb{N}}{N} \right)^2 \right)^M, \text{ avec}$$

$$X_t^N = (u_t^N, v_t^N) = \left((u_t^N \left(x = \frac{1}{M} \right), v_t^N \left(x = \frac{1}{M} \right)), \dots, (u_t^N(x=1), v_t^N(x=1)) \right)$$

donnée par $X_0^N = (u_0^N, v_0^N) = \left(\frac{\lfloor N \cdot u_0 \rfloor}{N}, \frac{\lfloor N \cdot v_0 \rfloor}{N} \right)$ et par les taux de transition

$$\lambda^N(X_t^N, X_{u,j,t \pm}^N) = \frac{1}{2} \cdot \left(d_{12} \cdot M^2 \cdot u_t^N \left(\frac{j}{M} \right) \cdot N v_t^N \left(\frac{j}{M} \right) + d_1 \cdot M^2 \cdot N u_t^N \left(\frac{j}{M} \right) \right),$$

où, pour

$$X_t^N = \left((u_t^N \left(\frac{1}{M} \right), v_t^N \left(\frac{1}{M} \right)), \dots, (u_t^N \left(\frac{j}{M} \right), v_t^N \left(\frac{j}{M} \right)), \dots, (u_t^N(1), v_t^N(1)) \right) \in E^N,$$

on définit

$$X_{u,j,t,\pm}^N = X_t^N - \left(\left(\frac{1}{N}, 0 \right) \delta_j(i) \right)_{1 \leq i \leq M} + \left(\left(\frac{1}{N}, 0 \right) \delta_{j \pm 1}(i) \right)_{1 \leq i \leq M},$$

ce qui correspond à un déplacement d'un individu de l'espèce u du site j vers le site $j \pm 1$. On définit également $X_{v,j,t,\pm}^N$ et les taux de transition associés de manière analogue.

Ces taux de transition sont ceux que l'on utilise pour la simulation dans l'approche stochastique. On note par ailleurs que dans cette approche, on ne multiplie par N , dans les taux de transition correspondants aux termes quadratiques, qu'une des deux populations normalisées, afin que les espèces ne soient sensibles qu'à des densités et que les phénomènes associés à ces termes n'explorent pas quand N est grand. De même, on multiplie les coefficients des termes de diffusion par M^2 pour que les phénomènes de diffusion ne disparaissent pas quand le maillage

devient plus fin quand M tend vers l'infini. En effet, les individus ayant un comportement markovien, le nombre de sauts nécessaire à l'exploration d'une plage de largeur M est de l'ordre de M^2 . Le fait que M augmente correspond donc à un ralentissement du phénomène de diffusion qu'il faut donc compenser. Les coefficients de réaction n'ont eux donc pas ce besoin car ce sont des phénomènes indépendants de la finesse de la discrétisation spatiale.

Soit f une fonction scalaire bornée et continûment dérivable sur $(\mathbb{R}^2)^M$. On considère le générateur infinitésimal de X^N donné par

$$\begin{aligned} A^N f(X) = & \sum_{j \in \mathbb{Z}/M\mathbb{Z}, w \in \{u, v\}} \lambda^N(X_{t=0}^N, X_{w,j,+}^N) \cdot (f(X_{w,j,+}^N) - f(X_{t=0}^N)) \\ & + \lambda^N(X_{t=0}^N, X_{w,j,-}^N) \cdot (f(X_{w,j,-}^N) - f(X_{t=0}^N)). \end{aligned} \quad (3.1)$$

Notons pour $w \in \{u, v\}$, $\frac{\partial f}{\partial w_i}(X)$ la dérivée de f par rapport à la composante w de la i -ème coordonnée de X . Pour une fonction g continûment à deux variables et dérivable, on sait par développement limité que pour tout $x, y \in \mathbb{R}$ lorsque h tend vers 0, à l'ordre 1 :

$$\begin{aligned} g(x-h, y+h) - g(x, y) &= g(x-h, y+h) - g(x, y+h) + g(x, y+h) - g(x, y) \\ &\approx -h \frac{\partial g}{\partial x}(x, y) + h \frac{\partial g}{\partial y}(x, y). \end{aligned}$$

Puisque f est continûment dérivable, on obtient alors en injectant l'expression de λ^N donnée ci-dessus dans (3.1) et en transposant le développement précédent à f , quand N tend vers l'infini, que :

$$\begin{aligned} A^N f(X) \approx & \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathbb{Z}/M\mathbb{Z}} \left(d_{12} \cdot M^2 \cdot u_0^N \left(\frac{j}{M} \right) \cdot N v_0^N \left(\frac{j}{M} \right) + d_1 \cdot M^2 \cdot N u_0^N \left(\frac{j}{M} \right) \right) \\ & \times \left[\left(-\frac{1}{N} \frac{\partial f}{\partial u_j}(X_0^N) + \frac{1}{N} \frac{\partial f}{\partial u_{j+1}}(X_0^N) \right) + \left(-\frac{1}{N} \frac{\partial f}{\partial u_j}(X_0^N) + \frac{1}{N} \frac{\partial f}{\partial u_{j-1}}(X_0^N) \right) \right] \\ & + \left(d_{21} \cdot M^2 \cdot N u_0^N \left(\frac{j}{M} \right) \cdot v_0^N \left(\frac{j}{M} \right) + d_2 \cdot M^2 \cdot N v_0^N \left(\frac{j}{M} \right) \right) \\ & \times \left[\left(-\frac{1}{N} \frac{\partial f}{\partial v_j}(X_0^N) + \frac{1}{N} \frac{\partial f}{\partial v_{j+1}}(X_0^N) \right) + \left(-\frac{1}{N} \frac{\partial f}{\partial v_j}(X_0^N) + \frac{1}{N} \frac{\partial f}{\partial v_{j-1}}(X_0^N) \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Or, quand N tend vers l'infini, X_0^N tend uniformément vers x_0 . Donc par continuité des dérivées de f , on obtient par (3.2) que, quand N tend vers l'infini,

$A^N f(X^N)$ tend vers un certain

$$\begin{aligned}
Af(x) = \frac{M^2}{2} \sum_{j \in \mathbb{Z}/M\mathbb{Z}} & \left(d_{12} \cdot u_0 \left(\frac{j}{M} \right) \cdot v_0 \left(\frac{j}{M} \right) + d_1 \cdot u_0 \left(\frac{j}{M} \right) \right) \\
& \times \left(-\frac{\partial f}{\partial u_j}(x_0) + \frac{\partial f}{\partial u_{j+1}}(x_0) \right) \\
& + \left(d_{21} \cdot u_0 \left(\frac{j}{M} \right) \cdot v_0 \left(\frac{j}{M} \right) + d_1 \cdot v_0 \left(\frac{j}{M} \right) \right) \\
& \times \left(-\frac{\partial f}{\partial v_j}(x_0) + \frac{\partial f}{\partial v_{j+1}}(x_0) \right) \quad (3.3)
\end{aligned}$$

En séparant la somme pour factoriser par les dérivées de f , on obtient, après changement d'indices, que l'on peut écrire (3.3) sous la forme :

$$\begin{aligned}
Af(x) = \frac{M^2}{2} \sum_{j \in \mathbb{Z}/M\mathbb{Z}} & \frac{\partial f}{\partial u_j}(x_0) \cdot \left[d_{12} \cdot \left(-2u_0 v_0 \left(\frac{j}{M} \right) + u_0 v_0 \left(\frac{j-1}{M} \right) + u_0 v_0 \left(\frac{j+1}{M} \right) \right) \right. \\
& \left. + d_1 \cdot \left(-2u_0 \left(\frac{j}{M} \right) + u_0 \left(\frac{j+1}{M} \right) + u_0 \left(\frac{j+1}{M} \right) \right) \right] \\
& + \frac{\partial f}{\partial v_j}(x_0) \cdot \left[d_{21} \cdot \left(-2u_0 v_0 \left(\frac{j}{M} \right) + u_0 v_0 \left(\frac{j-1}{M} \right) + u_0 v_0 \left(\frac{j+1}{M} \right) \right) \right. \\
& \left. + d_2 \cdot \left(-2v_0 \left(\frac{j}{M} \right) + v_0 \left(\frac{j+1}{M} \right) + v_0 \left(\frac{j+1}{M} \right) \right) \right] \quad (3.4)
\end{aligned}$$

On utilise le produit scalaire sur $(\mathbb{R}^2)^M$ défini par

$$X \cdot Y = \sum_{j=1}^M a_j c_j + b_j d_j$$

où $X = ((a_j, b_j))_{1 \leq j \leq M}$ et $Y = ((c_j, d_j))_{1 \leq j \leq M}$.

Notons de plus pour $A = (A(\frac{j}{M}))_{1 \leq j \leq M} \in \mathbb{R}^M$, l'opérateur de laplacien discret,

$$\Delta^M A = \frac{1}{2 \frac{1}{M^2}} \left(-2A \left(\frac{j}{M} \right) + A \left(\frac{j-1}{M} \right) + A \left(\frac{j+1}{M} \right) \right)_{1 \leq j \leq M}$$

On généralise facilement cet opérateur à $(\mathbb{R}^2)^M$

On reconnaît alors dans l'équation (3.4) des laplaciens discrets, ce qui permet d'écrire le générateur A sous la forme du produit scalaire suivant :

$$Af(x) = \nabla f(x_0) \cdot \Delta^M h(x_0) \quad (3.5)$$

avec

$$\nabla f(x_0) = \left(\left(\frac{\partial f}{\partial u_j}(x_0), \frac{\partial f}{\partial v_j}(x_0) \right) \right)_{1 \leq j \leq M}$$

et

$$h(x_0)_j = \left(u_0 v_0 \left(\frac{j}{M} \right) + u_0 \left(\frac{j}{M} \right), u_0 v_0 \left(\frac{j}{M} \right) + v_0 \left(\frac{j}{M} \right) \right)$$

L'équation (3.5) étant vérifiée par toute fonction continûment dérivable f et bornée, on obtient alors par la convergence des générateurs que la suite de processus markoviens $(X_t^N)_N \geq 1$ semble converger vers le processus déterministe X solution de l'équation différentielle

$$\frac{dX_t}{dt} = \Delta^M(h(X_t)), \quad X_0 = x_0. \quad (3.6)$$

L'équation (3.6) peut alors s'écrire en détaillant sur les deux composantes (U_t, V_t) de X_t :

$$\begin{cases} \partial_t U_t = \Delta^M(d_{12}U_t V_t + d_1 U_t), & U_0 = u_0 \\ \partial_t V_t = \Delta^M(d_{21}U_t V_t + d_2 V_t), & V_0 = v_0 \end{cases} \quad (3.7)$$

Le processus limite X est donc solution du modèle semi-continu considéré en partie 2.3.

Pour finir, regardons ce que deviennent les termes de réaction. Disons par exemple que nous rajoutons dans l'équation un terme de naissance de l'espèce u , de la forme $r_1 u$ (sans laplacien) dans le membre de droite de l'équation sur u_t considérée en début de section. Il faut alors rajouter dans l'équation 3.1 les termes de la forme

$$\lambda^N(X_{t=0}^N, X_{u,j,++}^N) \cdot (f(X_{u,j,++}^N) - f(X_{t=0}^N))$$

où

$$X_{u,j,++}^N = X_{t=0}^N + \left(\left(\frac{1}{N}, 0 \right) \delta_j \right)_{1 \leq j \leq M},$$

qui correspond donc à la naissance d'un individu de type u au site j , et avec donc conformément à l'équation,

$$\lambda^N(X_{t=0}^N, X_{u,j,++}^N) = r_1 \cdot Nu^N \left(\frac{j}{M} \right).$$

Le développement limité de f à l'ordre 1 quand N tend vers l'infini est alors cette fois

$$f(X_{u,j,++}^N) - f(X_{t=0}^N) = \frac{1}{N} \frac{\partial f}{\partial u_j}(x_0).$$

On reconnaît directement dès lors et sans changement d'indice dans la somme sur j de ces termes de naissances un produit scalaire entre le gradient de f et une autre fonction $g(x_0)$ sans laplacien cette fois, qui correspond aux termes de réaction de l'équation complète.

Résumé

Grâce à ces calculs, nous savons ainsi que le modèle stochastique converge vers le schéma numérique d'intégration de l'EDP limite – pour la même discrétisation – et devrait donc produire des résultats similaires. Nous savons également que cette convergence se réalise à mesure que la densité N d'individus par site grandit, et nous sommes plus pratiquement en mesure d'adapter les coefficients d'un modèle vers l'autre afin d'obtenir des résultats transposables.

3.2 Comparaison expérimentale des simulations

On avait déjà observé en première partie des comportements attendus à l'équilibre dans le cas de la stricte diffusion croisée (uv constant) et de la stricte diffusion, avec présence d'un terme de diffusion linéaire, qui annulait le tout.

Voyons maintenant si l'on est en mesure de retrouver l'équilibre non trivial avec ségrégation à l'équilibre de la partie 2. On reprend les mêmes matrices de diffusion et de réaction ainsi que le même état initial :

$$\mathcal{D} := \begin{pmatrix} 5 \cdot 10^{-3} & 0 & 3 \\ 5 \cdot 10^{-3} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathcal{R} := \begin{pmatrix} 5 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}.$$

On observe l'évolution comparative suivante :

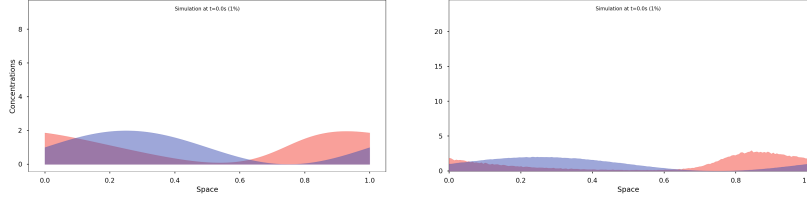


FIGURE 3.1 – État initial

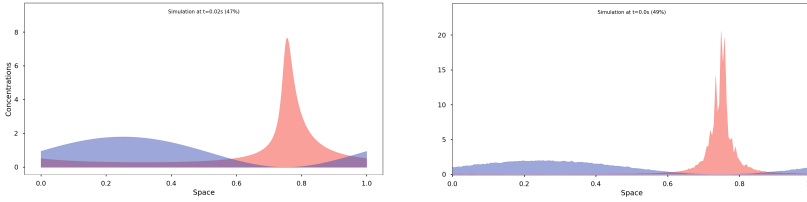


FIGURE 3.2 – État intermédiaire (50%)

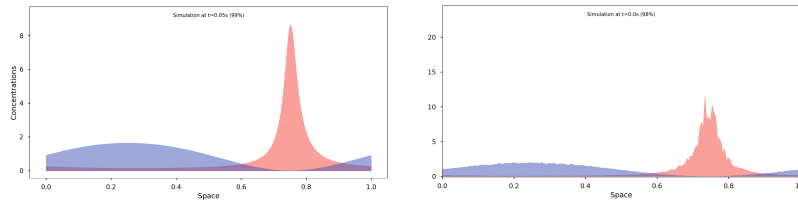


FIGURE 3.3 – État final

FIGURE 3.4 – Comparaison des deux modèles avec diffusion et réaction

L'évolution des deux modèles semble correspondre. En effet, les problématiques d'échelle ne sont en réalité que liées à la discrétisations en M sites du modèle stochastique. C'est pourquoi, si nous effectuons la moyenne mobile des populations dans le but de lisser la simulation, nous obtenons des résultats parfaitement cohérents avec le modèle semi-continu. nous retrouvons par ailleurs le motif ségrégué à l'équilibre dans la simulation stochastique. Le comportement aléatoire de la première approche va néanmoins conduire à certaines différences légères entre les résultats finaux :

Dans le cas stochastique, on observe des fluctuations à l'équilibre, et une légère ségrégation à l'échelle locale, en lien avec le terme de diffusion croisée. En effet, bien que ce phénomène soit compensé par la diffusion linéaire, les espèces tendent à se repousser d'un site à l'autre, ce qui donne une structure en dents de scie. Cela illustre le fait que les modèles ne sont pas censés converger en norme infinie.

Ainsi, du fait de ces pics locaux, ces derniers atteignent des valeurs élevées dans le cas stochastique (20 ici) tandis que dans le modèle continu, le maximum n'est que de 8 pour les mêmes coefficients. Ainsi, afin de pouvoir mieux visualiser la convergence des modèles stochastiques et déterministes, nous avons implémenté une fonction qui applique une moyenne mobile sur 15 sites consécutifs. Nous obtenons les résultats suivants :

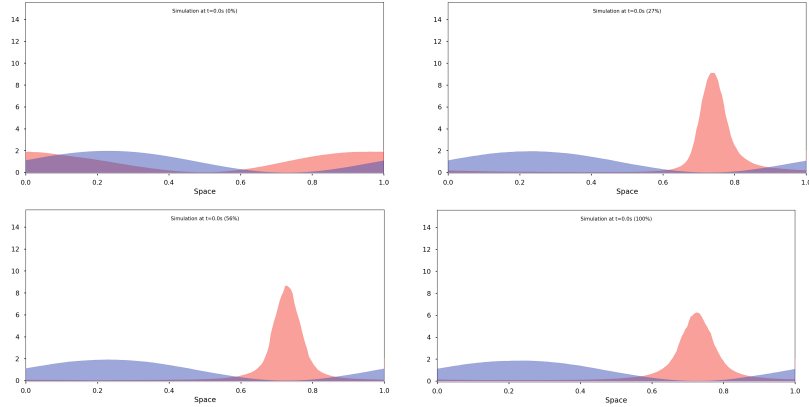


FIGURE 3.5 – Évolution stochastique moyennée sur une dizaine de sites pour une comparaison plus fiable avec le modèle semi-continu (0%, 27%, 56% et 100%)

On retrouve bien des pics de l'ordre de 8 dans le cas stochastique, ce qui est conforme au cas continu.

Dans le cas stochastique, notre modélisation tient compte du nombre M de sites. En effet, lorsque nous implémentons la partie diffusion du modèle stochastique, il n'y a pas de problématique de mise à l'échelle des facteurs de diffusion. Par exemple, lorsque l'on augmente le nombre de sites M , la simulation ne va pas être impactée en terme d'évolution, hormis en terme de durée de diffusion : les

sauts de $1/M$ à gauche ou à droite seront plus petits et l'état d'équilibre sera atteint beaucoup plus lentement.

En revanche, lorsque nous commençons à implémenter en parallèle les paramètres de réaction, on se rend compte qu'il va y avoir un problème lorsque M va augmenter car la réaction n'est pas impactée par le nombre de sites. En effet, plus M augmente, et plus la diffusion va être impactée (ralentie) tandis que la réaction elle, restera la même (l'intégrale sous la courbe n'est pas modifiée donc le choix du type de sauts non plus). Ceci provient de la manière dont nous calculons les probabilités de type de sauts, qui dépendent de l'intégrale sous les courbes pondérées par ces facteurs de diffusion ou de réaction.

Dès lors, nous devons modifier les facteurs de diffusion afin que l'augmentation du nombre de sites M ne modifie pas le rapport diffusion/réaction. C'est de là que provient le M^2 par lequel nous multiplions la matrice D lorsque nous simulons le modèle stochastique. Cette multiplication de D par M^2 va compenser le ralentissement de la diffusion lorsque M augmente et permettre de faire coïncider les modèles semi-continu et stochastique avec des valeurs de M très grandes.

Résumé

Pour des « grandes » valeurs d'individus par site, on visualise correctement la convergence de la solution simulée de façon stochastique vers une limite décrite par l'équation aux dérivées partielles du modèle SKT. On est ainsi également en mesure d'observer de la ségrégation à l'équilibre, pour des valeurs non triviales des coefficients de \mathcal{D} et de \mathcal{R} ! On sent également pourquoi cette convergence ne peut avoir lieu en norme L^∞ : la discrétisation de l'espace produit des pics locaux.

Bibliographie

- [1] Nanako Shigesada, Kohkichi Kawasaki, and Ei Teramoto. Spatial segregation of interacting species. *Journal of Theoretical Biology*, 79(1) :83–99, July 1979.
- [2] Daniel T. Gillespie. Exact stochastic simulation of coupled chemical reactions. *The Journal of Physical Chemistry*, 81(25) :2340–2361, December 1977.
- [3] PSCMarkovStochastic. *Blazing-fast simulation of advanced population dynamics*. Disponible sur <https://github.com/SounaSb/PSCMarkovStochastic>.
- [4] PySpecies. *Blazing-fast simulation of advanced population dynamics*. Disponible sur <https://github.com/samuel-boite/pyspecies>.
- [5] Yuan Lou and Wei-Ming Ni. Diffusion, self-diffusion and cross-diffusion. *Journal of Differential Equations*, 131(1) :79–131, October 1996.
- [6] Kazuo Kishimoto and Hans F Weinberger. The spatial homogeneity of stable equilibria of some reaction-diffusion systems on convex domains. *Journal of Differential Equations*, 58(1) :15–21, June 1985.
- [7] E. Cuthill and J. McKee. Reducing the bandwidth of sparse symmetric matrices. In *Proceedings of the 1969 24th national conference*, ACM '69, pages 157–172, New York, NY, USA, August 1969. Association for Computing Machinery.
- [8] Vincent Bansaye. MAP563 – Modélisation aléatoire en biologie, écologie et évolution, 2023.