

Proposition de Projet de Fin d'Études (PFE)

**Modélisation et Sélection optimale d'espèces
microbiennes en compétition dans un chémostat
Application aux modèles de Monod, Droop et
photoacclimatation**

Groupe d'étudiants :

Ulric Chamard

Kra Gérard

Lucie Agnello

Option Mathématiques pour la Sciences des Données

M2 d'ingénierie mathématiques, Valrose (Nice)

Encadrant : Walid Djema (Centre Inria d'Université Côte d'Azur)

walid.djema@inria.fr www.waliddjema.fr



Décembre 2024

Table des matières

1	Introduction	3
2	Problème de sélection optimale d'espèces basé sur le modèle de Monod	5
2.1	Modèle de Monod pour la compétition entre deux espèces	5
2.2	Formulation du problème de contrôle optimal (OCP)	6
2.3	Analyse des états stationnaires	6
2.4	Application du principe de Pontryagin (PMP)	7
2.5	Résolution de l'OCP par méthode d'optimisation directe	8
3	Modèle de Droop	13
3.1	Dynamique du système	13
3.2	Conditions initiales	13
3.3	Objectif du contrôle optimal	14
3.4	Contraintes	14
3.5	Analyse des états stationnaires	15
4	Modèle Photosensible	20
4.1	Contexte et Objectif du Modèle	20
4.2	Description du modèle	20
4.3	Méthodologie Numérique	22
4.3.1	Préanalyse et Validation du modèle	22
4.4	Résultats et Analyse numérique	24
5	Modèle de Photoacclimatation	27
5.1	Description du Modèle	27
5.2	Résultats Numériques	28
5.3	Incohérences et Points Inattendus	30
6	Conclusion	30

1 Introduction

Ce document aborde l'étude de plusieurs **problèmes de contrôle optimal (OCPs)** appliqués à la **compétition entre deux espèces de micro-organismes** dans un chimostat, afin d'étudier la dynamique des populations microbiennes. L'objectif principal est de déterminer des stratégies de contrôle optimales permettant de **favoriser la sélection d'une espèce spécifique** au sein de la culture, en fonction de ses caractéristiques d'intérêt pour des applications biotechnologiques.

Par exemple, dans le cas d'une culture en **photobioréacteurs** où deux espèces sont en compétition et ont toutes deux la capacité de dominer la culture, il s'agit d'**optimiser le taux de dilution** pour favoriser l'espèce la plus intéressante. Une espèce peut être considérée comme avantageuse si elle **produit une quantité accrue de lipides**, permettant une extraction plus efficace de **biocarburants**. Une autre application concerne la sélection de l'espèce la plus **transparente** (possédant moins de pigments), facilitant ainsi la pénétration de la lumière dans la culture dense et **améliorant les rendements de production**.

Afin de modéliser la compétition entre ces espèces microbiennes, nous utilisons des **systèmes d'équations différentielles ordinaires (ODEs)**, largement employés dans la littérature. En particulier, nous considérons des modèles classiques de **croissance compétitive** basés sur les structures de **Monod** (couramment utilisées pour les bactéries) et de **Droop** (particulièrement adaptées aux microalgues). Ces modèles décrivent la dynamique de croissance des micro-organismes en fonction de la disponibilité des ressources nutritives, avec une **étape supplémentaire d'absorption et d'accumulation de réserves** dans le modèle de Droop. Pour une introduction approfondie à ces modèles, nous renvoyons à [8].

L'objectif de cette étude est d'**analyser des OCPs permettant la sélection d'une espèce dans un temps de culture limité**. Cet objectif se traduit par la **maximisation du ratio des concentrations** des deux espèces à l'instant final t_f , soit $x_1(t_f)/x_2(t_f)$. Pour ce faire, nous utilisons comme **variable de contrôle** le taux de dilution $D(t)$, une **grandeur positive et bornée**, qui permet de moduler à la fois l'**apport de nutriments** et l'**évacuation du milieu de culture**, tout en maintenant un **volume constant dans le bioréacteur**.

Dans un second temps, nous introduirons l'effet de la lumière et de la **photoacclimation** des espèces dans cet OCP de sélection, afin de prendre en compte la nature **photosynthétique** des microalgues, qui nécessitent de la lumière pour croître.

Pour l'**OCP principal** de notre étude, qui concerne la sélection d'espèces favorables, nous allons d'abord l'analyser en nous basant sur le **modèle de Monod**, suivant l'approche développée dans [1]. Ensuite, nous étendrons cette étude au même OCP en l'adaptant au **modèle de Droop**, qui est plus complexe et introduit **deux variables d'état supplémentaires**. Cette seconde approche suit l'étude plus récente menée dans [10].

Pour résoudre ces problèmes de contrôle optimal, nous utilisons des méthodes numériques avancées qui transforment le problème en un problème de programmation non linéaire (NLP) en dimension finie. Ces méthodes, basées sur l'optimisation directe, permettent de discrétiser les variables d'état et de contrôle. Des solveurs comme Ipopt sont employés pour simuler différents scénarios et valider les stratégies de contrôle proposées.

Dans un second temps, nous intégrons l'effet de la lumière et la photoacclimation dans notre OCP. La photoacclimation permet aux microalgues d'ajuster dynamiquement leur quota de pigments photosynthétiques en fonction de l'intensité lumineuse disponible. Ce processus influence directement leur taux de croissance et leur capacité à rivaliser avec d'autres espèces. En prenant en compte cette adaptation physiologique, nous pouvons mieux comprendre comment optimiser les conditions lumineuses pour favoriser une espèce spécifique.

Cette approche nous permet de mieux comprendre comment optimiser la culture de microalgues dans des applications industrielles : maximiser la production de biocarburants, de composés biochimiques comme les antioxydants ou les acides gras essentiels, ou encore pour améliorer la capture du CO₂.

2 Problème de sélection optimale d'espèces basé sur le modèle de Monod

L'approche traditionnelle pour la sélection d'une espèce microbienne dans un chemostat avec un substrat limitant repose sur le principe d'exclusion compétitive : avec un taux de dilution $D(t)$ constant, seule l'espèce capable de croître avec la plus faible concentration de substrat survit, tandis que l'autre disparaît progressivement. Cependant, cette méthode est asymptotique et ne garantit pas une séparation efficace dans un temps fini. Dans [1], les auteurs proposent une approche alternative basée sur une stratégie de contrôle optimal. Cette stratégie permet d'atteindre, en un temps minimal, un état où la concentration d'une espèce est significativement plus élevée que celle de l'autre.

Pour analyser ce contrôle, nous considérons d'abord le modèle de Monod. Ce modèle décrit la croissance microbienne en fonction de la concentration du substrat limitant s . Lorsque deux souches microbiennes sont en compétition pour ce substrat, le système dynamique associé est de dimension trois : une équation pour la concentration du substrat s et deux équations pour les biomasses des souches x_1 et x_2 . Contrairement au modèle de Droop, il n'y a pas de variable de quota intracellulaire, ce qui simplifie la dynamique du système. Nous détaillons ces aspects dans la section suivante.

2.1 Modèle de Monod pour la compétition entre deux espèces

La dynamique du modèle de Monod pour deux espèces en compétition est décrite par les équations différentielles suivantes :

$$\begin{cases} \dot{s}(t) &= D(t)[s_{in} - s(t)] - \mu_1(s(t))x_1(t) - \mu_2(s(t))x_2(t), \\ \dot{x}_1(t) &= [\mu_1(s(t)) - D(t)]x_1(t), \\ \dot{x}_2(t) &= [\mu_2(s(t)) - D(t)]x_2(t), \end{cases} \quad (1)$$

où $s(t) \geq 0$ est la concentration du substrat libre dans la culture à l'instant t et s_{in} la concentration du substrat à l'entrée du chimostat. Le taux de dilution $D(t)$ est une fonction de contrôle. Elle est positive et bornée telle que $0 \leq D(t) \leq D_{\max}$, où $D_{\max} > 0$ désigne la valeur maximal que peut atteindre $D(t)$. De plus, $x_i(t)$ désigne la concentrations des biomasses de la i -ème espèce à l'instant t telles que $x_i(t) \geq 0$. Pour $s(t) \in [0; s_{in}]$ la fonction $\mu_i(s(t))$ est le taux de croissance de l'espèce i , donné par la fonction de Monod :

$$\mu_i(s(t)) = \mu_{i,\max} \frac{s(t)}{K_i + s(t)}, \quad (2)$$

où $\mu_{i,\max}$ est le taux de croissance maximal et K_i est la constante de demi-saturation. C'est une fonction continue et strictement croissante sur $[0; +\infty[$ telle que $\mu_i(0) = 0$ pour tout i . Une illustration graphique est donnée dans la Figure 1.

Le modèle de Monod a été largement étudié dans la littérature, en particulier pour décrire les dynamiques des levures et des bactéries. Le problème de sélection d'espèces basé sur ce modèle a été analysé dans [1], où une propriété bien connue du modèle de Monod a été exploitée. Il s'agit d'un ensemble invariant qui découle de la conservation de la masse, une propriété classique de ce modèle (voir [8]). Dans le cas du modèle à deux espèces (Système (1)), cette propriété d'invariance est caractérisée par l'ensemble ci-dessous, qui est attractif et invariant :

$$\tau = \{(x_1, x_2, s) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^* : x_1 + x_2 + s = s_{in}\}. \quad (3)$$

Dans la suite, on considère que les valeurs initiales appartiennent à τ , c'est-à-dire que $x_1(0) + x_2(0) + s_0 = s_{in}$.

2.2 Formulation du problème de contrôle optimal (OCP)

Dans ce travail, nous nous intéressons à un problème de contrôle visant à maximiser le ratio $\frac{x_1(t_f)}{x_2(t_f)}$ à un temps final fixé t_f . Cette approche diffère légèrement de celle adoptée dans [1], où l'objectif était d'atteindre une valeur cible du rapport x_1/x_2 en un temps minimal. Premièrement, l'ensemble des contrôles admissibles est défini comme suit :

$$\mathcal{D} := \{D : [0, t_f] \rightarrow [0, D_{\max}] ; D(\cdot) \in \mathcal{L}_{\text{loc}}^\infty(\mathbb{R}_+)\},$$

où $\mathcal{L}_{\text{loc}}^\infty(\mathbb{R}_+)$ désigne l'espace des fonctions mesurables et localement bornées sur \mathbb{R}_+ . En pratique, D_{\max} est choisi supérieur aux taux de croissance maximaux μ_{\max} des souches microbiennes en compétition, afin de garantir que le système reste opérationnel dans des conditions réalistes.

Le problème de contrôle optimal est donc un problème d'optimisation en dimension finie avec contraintes qui s'écrit : étant donné une valeur initiale $X_0 = (x_1(0), x_2(0), s_0) \in \tau$, trouver un contrôle admissible $D(\cdot) \in \mathcal{D}$ tel que :

$$\sup_{D(\cdot)} \left\{ \frac{x_1(t_f)}{x_2(t_f)} \right\}. \quad (4)$$

2.3 Analyse des états stationnaires

Les états stationnaires du système sont obtenus en annulant les dérivées temporelles des variables d'état x_1 , x_2 et s du système (1), ce qui définit les conditions d'équilibre du chemostat. Cette analyse permet d'identifier les concentrations de substrat s pour lesquelles le système atteint un régime permanent.

Pour caractériser l'avantage compétitif entre les deux espèces, on introduit la fonction de différence des taux de croissance :

$$\Delta(s) = \mu_1(s) - \mu_2(s),$$

qui mesure l'écart de croissance entre les deux espèces en fonction de s . On définit ensuite :

$$\bar{s} = \arg \max_s \Delta(s),$$

comme la concentration en substrat où l'avantage compétitif de l'espèce x_1 sur x_2 est maximal.

Les propriétés de $\Delta(s)$ sont les suivantes :

- $\Delta(s)$ est strictement croissante sur $[0, \bar{s}]$ et atteint son maximum en \bar{s} .
- $\Delta(s)$ est strictement décroissante sur $[\bar{s}, +\infty[$.

Ces propriétés induisent les comportements compétitifs suivants :

- Pour $s < \bar{s}$, l'espèce x_1 domine avec un taux de croissance supérieur à celui de x_2 .
- Pour $s > \bar{s}$, l'espèce x_2 devient dominante.
- Lorsque $s \approx \bar{s}$, la différence de croissance entre les deux espèces est maximisée en faveur de x_1 .

Ainsi, le contrôle optimal doit réguler dynamiquement la concentration en substrat autour de s_{max} afin de maximiser l'avantage compétitif de x_1 par rapport à x_2 .

Exemple 1.

On considère les paramètres suivants : $s_{in} = 6.0$, $\mu_{1,\max} = 1.7$, $\mu_{2,\max} = 1.8$, $K_1 = 0.3$ et $K_2 = 0.6$. Ainsi, on trace les fonctions $\Delta(s)$, $\mu_i(s)$, $i = 1, 2$ et le ratio $\frac{\mu_1(s)}{\mu_2(s)}$. Le résultat est donné dans la Figure 1.

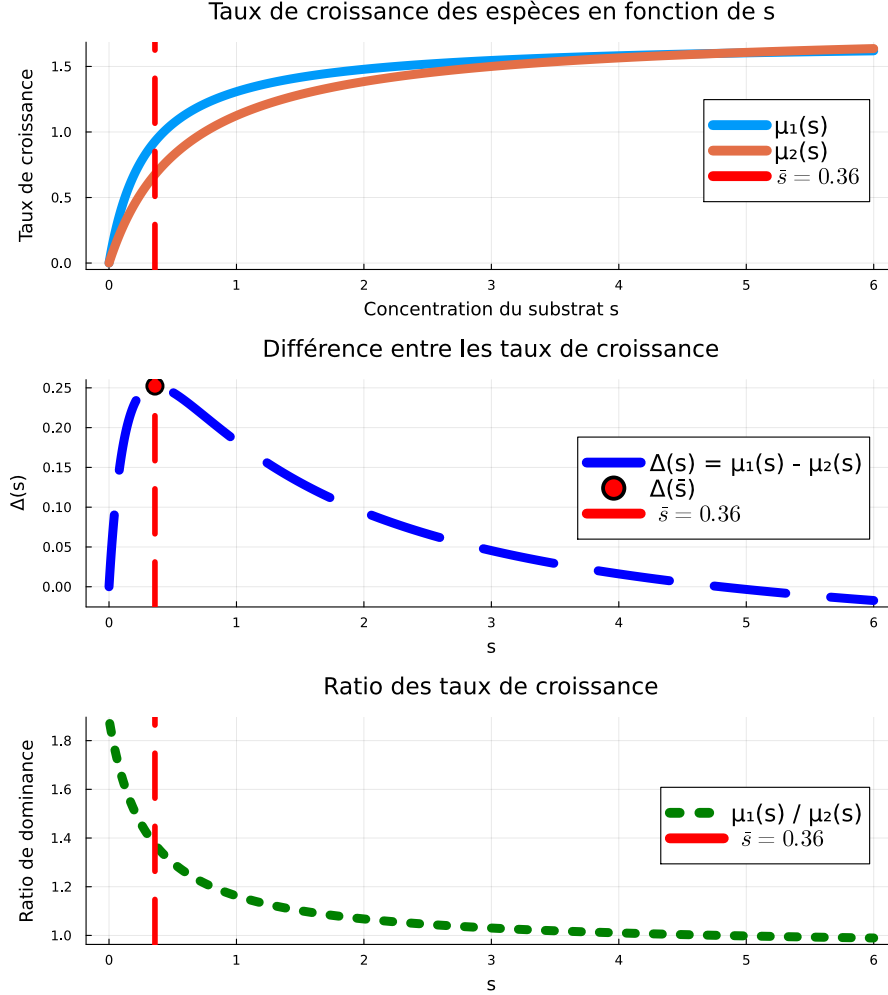


FIG. 1 – Modèle de Monod : analyse statique

Le graphique de la Figure 1 illustre les taux de croissance $\mu_1(s)$ et $\mu_2(s)$ des espèces microbiennes en fonction de la concentration du substrat s , suivant une cinétique de type Monod. Les courbes se croisent à $\bar{s} = 0.36$, où les deux espèces ont le même taux de croissance. La différence $\Delta(s) = \mu_1(s) - \mu_2(s)$ quantifie l'avantage compétitif : $\Delta(s) > 0$ indique la dominance de x_1 , tandis que $\Delta(s) < 0$ favorise x_2 . Le maximum de $\Delta(s)$ autour de $\bar{s} = 0.36$ correspond à la concentration où l'avantage de x_1 est maximal. Le ratio $\mu_1(s)/\mu_2(s)$ confirme cette dynamique, avec un équilibre à $\bar{s} = 0.36$. Pour maximiser la dominance de x_1 , il est donc crucial de maintenir s près de \bar{s} , où $\Delta(s)$ est maximisé.

2.4 Application du principe de Pontryagin (PMP)

Le principe du maximum de Pontryagin (PMP) est appliqué à notre problème (4) pour caractériser le contrôle optimal $D^*(t)$. Le Hamiltonien du système (1) est donc donné par la quantité suivante :

$$H = \lambda_1 \mu_1(s) x_1 + \lambda_2 \mu_2(s) x_2 + \lambda_0 + D(-\lambda_1 x_1 - \lambda_2 x_2), \quad (5)$$

où $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2)$ est le vecteur des co-variables adjointes avec λ_1 et λ_2 les coûts marginaux associés aux concentrations des espèces x_1 et x_2 .

Les équations adjointes sont :

$$\begin{cases} \dot{\lambda}_1 = \lambda_1[\mu'_1(s)x_1 - \mu'_1(s)] + \lambda_2\mu'_2(s)x_2 + \lambda_1 D, \\ \dot{\lambda}_2 = \lambda_2[\mu'_2(s)x_2 - \mu'_2(s)] + \lambda_2\mu'_1(s)x_1 + \lambda_2 D. \end{cases} \quad (6)$$

La condition d'optimalité donne :

$$\frac{\partial H}{\partial D} = -\lambda_1 x_1 - \lambda_2 x_2 = 0. \quad (7)$$

Ce qui nous permet d'obtenir la fonction de commutation définie par :

$$\Phi = -\lambda_1 x_1 - \lambda_2 x_2 \quad (8)$$

et elle détermine la structure du contrôle optimal. Elle est caractérisée par :

$$\begin{cases} \Phi(t) < 0 \Rightarrow D(t) = D_{max} \\ \Phi(t) > 0 \Rightarrow D(t) = 0, \end{cases} \quad (9)$$

pour tout $t \in [0; t_f]$. Dans ce cas, on dit que le contrôle optimal de type Bang-bang. Cependant, lorsque le contrôle n'est pas une valeur constante, on parle plutôt de contrôle optimal est de type Arcs singuliers, c'est-à-dire que $D(t)$ suit une trajectoire spécifique trouvée via l'analyse de Φ qui désigne la dérivée seconde du Hamiltonien.

Les auteurs de [1] ont mis en évidence que le contrôle singulier, correspondant à une phase où la fonction switch s'annule sur un intervalle de temps non réduit à un instant ponctuel, joue un rôle important dans la stratégie et la structure du contrôle optimal sur l'intervalle $[0, t_f]$. La stratégie utilisant principalement l'arc singulier est optimale pour atteindre l'état cible (dans [1]) en un temps donné à condition que les conditions initiales se trouvent dans τ . Ils montrent également que les trajectoires optimales ne peuvent pas avoir de points de commutation avant d'atteindre l'état cible ou l'arc singulier.

L'arc singulier est défini comme l'ensemble des points où la dérivée du Hamiltonien par rapport au contrôle $D(t)$ s'annule. Sur cet arc, le contrôle $D(t)$ est donné par :

$$D_{\bar{s}}(t) = \frac{\mu_1(\bar{s})x_1 + \mu_2(\bar{s})x_2}{x_1 + x_2}. \quad (10)$$

Cette stratégie permet de réguler la concentration du substrat de manière à favoriser la croissance de l'espèce désirée.

2.5 Résolution de l'OCP par méthode d'optimisation directe

La méthode directe est une approche numérique puissante pour résoudre des problèmes de contrôle optimal (OCP). Elle consiste à transformer le problème continu en un problème d'optimisation non linéaire (NLP) en discrétisant les variables d'état et de contrôle sur un horizon temporel fini. Cette méthode est particulièrement adaptée aux systèmes non linéaires, comme le modèle de Monod, car elle permet de gérer efficacement les contraintes sur les états et les contrôles, et elle est compatible avec des solveurs performants tels qu'IPOPT [11].

L'objectif principal est de résoudre le problème (4) à un temps final t_f , en contrôlant le taux de dilution $D(t)$. Pour cela, nous discrétisons les équations dynamiques du modèle de Monod et résolvons le problème d'optimisation résultant à l'aide d'un solveur NLP.

Discrétisation des Équations Dynamiques

Pour discrétiser les équations dynamiques du système (1), nous utilisons la méthode de Crank-Nicolson. Cette méthode implicite offre une stabilité inconditionnelle et une précision d'ordre deux en temps, ce qui est essentiel pour capturer la dynamique rapide du modèle de Monod, notamment près des états stationnaires. Elle repose sur une moyenne pondérée entre les valeurs actuelles et futures des variables d'état, ce qui la rend plus stable et précise que les schémas explicites comme la méthode d'Euler.

Pour une équation différentielle générale $\dot{y} = f(y, t)$, la discrétisation s'écrit :

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\Delta t} = \frac{1}{2} (f(y_n, t_n) + f(y_{n+1}, t_{n+1})).$$

Appliquée au modèle de Monod, cette méthode conduit à un système d'équations non linéaires couplées pour s_{n+1} , $x_{1,n+1}$, et $x_{2,n+1}$.

Voici un extrait de code Julia illustrant la discrétisation de ces équations en utilisant la méthode de Crank-Nicolson :

```
1 using JuMP, Ipopt
2
3 # Définition du modèle d'optimisation
4 model = Model(Ipopt.Optimizer)
5
6 # Déclaration des variables d'état et de contrôle
7 @variable(model, s[1 :N])
8 @variable(model, x1[1 :N])
9 @variable(model, x2[1 :N])
10 @variable(model, D[1 :N], lower_bound=0, upper_bound=D_max) # Contrôle D(t)
11
12 # Conditions initiales
13 @constraints(model, begin
14     s[1] == 2.0 # Concentration initiale du substrat
15     x1[1] == 2.0 # Concentration initiale de l'espèce x
16     x2[1] == 2.0 # Concentration initiale de l'espèce x
17 end)
18
19 # Contraintes de discrétisation par Crank-Nicolson
20 @NLconstraint(model, [i = 1 :N-1],
21     s[i+1] == s[i] + 0.5 * Δt * (
22         (D[i] * (s_in - s[i]) - μ1(s[i]) * x1[i] - μ2(s[i]) * x2[i]) +
23         (D[i+1] * (s_in - s[i+1]) - μ1(s[i+1]) * x1[i+1] - μ2(s[i+1]) * x2[i+1])
24     )
25 )
26
27 @NLconstraint(model, [i = 1 :N-1],
28     x1[i+1] == x1[i] + 0.5 * Δt * (
29         (μ1(s[i]) - D[i]) * x1[i] + (μ1(s[i+1]) - D[i+1]) * x1[i+1]
30     )
31 )
32
33 @NLconstraint(model, [i = 1 :N-1],
34     x2[i+1] == x2[i] + 0.5 * Δt * (
```

```

35      ( $\mu_2(s[i]) - D[i]) * x2[i] + (\mu_2(s[i+1]) - D[i+1]) * x2[i+1]$ 
36  )
37  )

```

Commentaire : Cet extrait montre la discrétisation de l'équation du substrat $s(t)$. Les termes $D[i]$ et $D[i+1]$ représentent le contrôle aux pas de temps i et $i+1$, tandis que $\mu_1(s[i])$ et $\mu_2(s[i])$ sont les taux de croissance des espèces x_1 et x_2 . La méthode de Crank-Nicolson assure une meilleure stabilité et précision par rapport à des schémas explicites.

Résolution avec IPOPT

Le problème discrétisé est résolu à l'aide du solveur IPOPT, qui utilise des méthodes de points intérieurs pour traiter les contraintes non linéaires. La solution obtenue fournit les trajectoires optimales pour $s(t)$, $x_1(t)$, $x_2(t)$, et $D(t)$, permettant ainsi de résoudre le problème (4).

```

1 # Résolution du modèle avec IPOPT
2 println("Résolution du modèle de Monod...")
3 optimize!(model)

```

Commentaire : Ce code résout le problème d'optimisation avec IPOPT. Les résultats incluent les trajectoires optimales des variables d'état et de contrôle, qui sont ensuite utilisées pour analyser la dominance compétitive des espèces.

Ici, l'optimisation directe permet d'intégrer naturellement les contraintes d'état dans la définition des variables du problème. Cette approche assure que la concentration en substrat, les biomasses et le taux de dilution restent dans des limites physiologiquement cohérentes, facilitant ainsi la convergence du solveur tout en garantissant une solution réalisable.

Un atout majeur des méthodes directes est la gestion efficace des contraintes d'état. Ici, les bornes sur s , x_1 , x_2 et D sont imposées dès la définition des inconnues, améliorant la robustesse numérique et la stabilité de l'optimisation. Contrairement aux approches indirectes où ces contraintes peuvent complexifier la résolution, elles sont ici exploitées pour guider la recherche de la solution optimale et accélérer la convergence.

```

1 # Définition des variables avec contraintes explicites
2 @variables(model, begin
3     0 s[1 :N+1] s_in # Concentration en substrat bornée
4     0 x1[1 :N+1]      # Biomasse de l'espèce 1 non négative
5     0 x2[1 :N+1]      # Biomasse de l'espèce 2 non négative
6     0 D[1 :N+1] D_max # Taux de dilution borné
7 end)

```

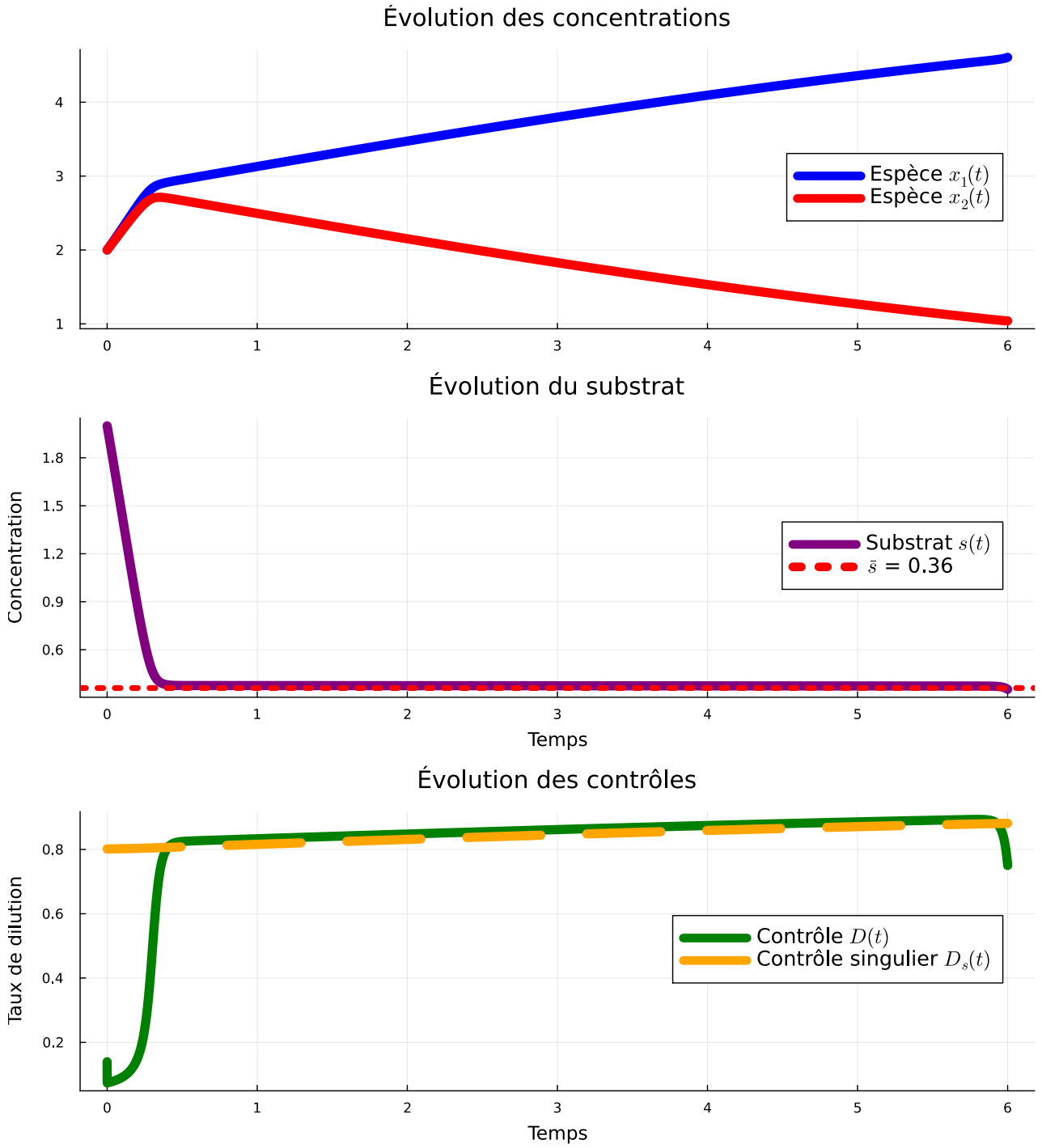


FIG. 2 – Résultats de l’optimisation directe renvoyés par le code Julia (basé sur IpOPT) : les trajectoires optimales illustrant la séparation des espèces x_1 et x_2 , où le ratio entre les deux atteint son maximum à t_f ; la trajectoire optimale $s(t)$, qui s’approche du point maximisant Δ et y reste jusqu’à t_f (un phénomène de turnpike). Ce système dynamique est gouverné par le contrôle optimal $D(t)$, qui présente une structure bang-singulier. La phase singulière obtenue numériquement via le code Julia correspond bien à la solution théorique déterminée par le PMP, avec $D_s(t)$ tracé en orange.

Les résultats démontrent que le contrôle optimal $D(t)$, caractérisé par une structure bang-singulier, permet une séparation efficace des espèces microbiennes x_1 et x_2 . Le ratio entre les deux espèces atteint son maximum à t_f , confirmant la dominance de x_1 . La concentration du substrat $s(t)$ suit un phénomène de turnpike, se stabilisant rapidement autour de \bar{s} (où $\Delta(s) =$

$\mu_1(s) - \mu_2(s)$ est maximisé), et y restant jusqu'à t_f . Ce comportement illustre l'importance de \bar{s} pour maximiser l'avantage compétitif de x_1 .

La phase singulière du contrôle $D(t)$, représentée en orange, correspond exactement à la solution théorique déterminée par le Principe du Maximum de Pontryagin (PMP). Cette phase est cruciale pour maintenir $s(t)$ près de \bar{s} et assurer une régulation fine du système. Les résultats numériques, obtenus via le code Julia (basé sur IpOPT), valident les prédictions théoriques, démontrant la robustesse de la modélisation et la précision de l'implémentation numérique.

Ces résultats ouvrent la voie à une généralisation avec le modèle de Droop, qui prend en compte le stockage intracellulaire des nutriments via la variable de quota q . Dans ce cadre, la maximisation de la dominance compétitive pourrait être étendue en intégrant les dynamiques de q , offrant ainsi une modélisation plus réaliste des systèmes microbiens où le stockage des nutriments joue un rôle crucial. Cette extension permettrait d'affiner les stratégies de contrôle pour des applications biotechnologiques avancées. Cependant, l'introduction de la variable de quota q conduit à un problème de dimension cinq, augmentant ainsi la complexité de la résolution du problème.

3 Modèle de Droop

Modèle de Droop : résultats

L'étude du modèle de Monod nous donne un cadre théorique et fondamental pour comprendre la croissance bactérienne, mais il lui est impossible de prévoir avec précision le comportement d'une colonie de micro-algues. En effet, là où les bactéries croissent directement en fonction de la quantité de substrat disponible, les microalgues passent par un processus intermédiaire appelé quota. En somme, les micro-algues stockent le substrat disponible et croissent en fonction du quota interne qu'elles ont accumulées, introduisant un délai entre privation de substrat et arrêt de la croissance de la population. Le modèle de Droop que nous introduirons dans cette partie a pour but de prendre en compte ce comportement.

3.1 Dynamique du système

Le modèle de Droop étend le modèle de Monod en prenant en compte le stockage interne des nutriments (quota).

La dynamique est donnée par le système d'équations différentielles du premier ordre suivant :

$$\begin{cases} \dot{s} &= D(t)(s_{in} - s) - \rho_1(s)x_1 - \rho_2(s)x_2 \\ \dot{q}_1 &= \rho_1(s) - \mu_1(q_1)q_1 \\ \dot{x}_1 &= (\mu_1(q_1) - D(t))x_1 \\ \dot{q}_2 &= \rho_2(s) - \mu_2(q_2)q_2 \\ \dot{x}_2 &= (\mu_2(q_2) - D(t))x_2 \end{cases} \quad (11)$$

où :

- i fait référence aux espèces 1 et 2
- q_i : Quotas internes de nutriments.
- $\rho_i(s)$: Taux d'absorption du substrat, donné par :

$$\rho_i(s) = \rho_{i,\max} \frac{s}{K_i + s}$$

- $\mu_i(q_i)$: Taux de croissance, dépendant du quota interne :

$$\mu_i(q_i) = \mu_{i,\max} \left(1 - \frac{k_i}{q_i} \right)$$

3.2 Conditions initiales

Les concentrations initiales sont fixées :

$$s(0) = s_0, \quad q_1(0) = q_{1,0}, \quad x_1(0) = x_{1,0}, \quad q_2(0) = q_{2,0}, \quad x_2(0) = x_{2,0}.$$

Ces valeurs permettent de simuler une situation où les deux espèces sont initialement présentes en faibles concentrations, avec des quotas internes de nutriments légèrement différents.

3.3 Objectif du contrôle optimal

Comme dans la partie précédente, une préanalyse est nécessaire. Celle-ci nous permettra de comprendre le modèle que nous manipulons et nous permettra de confirmer ou d'infirmer les résultats postérieurs. On cherche encore à déterminer la forme d'une fonction $\Delta(s)$ qui est la différence entre les deux fonctions de croissance μ_1 et μ_2 . Or contrairement au problème de Monod où les fonctions de croissances dépendent directement de la quantité de substrat s libre dans le bioréacteur, la croissance des microalgues est déterminée par les quotas q_1 et q_2 . Néanmoins, nous souhaitons tout de même pouvoir connaître la forme de cette fonction explicitement en fonction de la quantité de substrat libre s , puisque c'est sur cette valeur que nous avons un pouvoir de contrôle via D . On cherche donc à trouver la fonction suivante :

$$\Delta(s) = \mu_1(\delta_1^{-1}(s)) - \mu_2(\delta_2^{-1}(s)) \quad (12)$$

Où δ_i^{-1} est une fonction qui nous donne la quantité interne de substrat qu'une cellule accumule en fonction de la disponibilité de substrat externe s . Cette définition ressemble à celle du quota q_i , la différence fondamentale est que q est définie par une équation différentielle là où δ_i^{-1} est définie comme étant la valeur de q_i à l'équilibre. On a donc :

$$\begin{aligned} \dot{q} &= 0 \\ \Leftrightarrow \rho_i(s) - \mu_i(q_i)q_i &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{\rho_{m,i}s}{K_i + s} - \mu_{i,\infty}\left(1 - \frac{k_i}{q_i}\right) &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{k_i K_i \mu_{i,\infty} + (\rho_{m,i} + \mu_{i,\infty} k_i)s}{\mu_{i,\infty}(K_i) + s} &= q_i \end{aligned}$$

Cela est obtenu par la formulation des équations dynamiques, présentées plus en détail plus bas.

Au final, il est possible de déterminer $\Delta(s)$. De plus, dans le document de référence, il est expliqué que la compétition entre les espèces dépend de cette différence.

- Si $\Delta(s) > 0$, alors l'espèce 1 est avantagée et domine la compétition.
- Si $\Delta(s) < 0$, alors l'espèce 2 est avantagée et devient dominante.

L'évolution de $\Delta(s)$ en fonction de s permet donc d'identifier les seuils critiques où l'une des deux espèces prend l'avantage sur l'autre. Cette analyse est essentielle pour comprendre les mécanismes d'exclusion compétitive entre les deux espèces considérées.

L'objectif de notre problème de Droop étant le même que celui de Monod, il se formalise de la même façon : on cherche à maximiser le ratio $\frac{x_1(t_f)}{x_2(t_f)}$ à un temps final fixé t_f :

$$\max_{D(\cdot)} \frac{x_1(t_f)}{x_2(t_f)}.$$

Intuitivement, cela revient à chercher comment favoriser la croissance de l'espèce 1 tout en éliminant la présence de l'espèce 2.

3.4 Contraintes

Les contraintes garantissent que les solutions restent physiquement réalistes et exploitables dans un contexte expérimental.

- Contraintes dynamiques : Les équations différentielles du modèle de Droop doivent être satisfaites.
- Contraintes sur le contrôle : $0 \leq D(t) \leq D_{\max}$.
- Contraintes sur les états :

$$s_{in} \geq s(t) \geq 0$$

$$q_{1,\max} \geq q_1(t) \geq k_1$$

$$q_{2,\max} \geq q_2(t) \geq k_2$$

$$x_1(t) \geq 0$$

$$x_2(t) \geq 0$$

Remarque 1. *Il est important de noter que les contraintes sur l'état incluses ci-dessous ne sont pas indispensables dans le code de résolution directe ni dans le problème de contrôle étudié, puisque ces contraintes sont naturellement satisfaites par les dynamiques du système dans le modèle de Droop.*

Remarque 2. *La loi de conservation de la masse implique que l'ensemble suivant est à la fois attractif et invariant :*

$$M := \{X = (s, q_1, x_1, q_2, x_2) \in \Omega \mid s + x_1 q_1 + x_2 q_2 = s_{in}\}$$

Dans notre étude, nous nous restreignons au cas où les conditions initiales appartiennent à M .

3.5 Analyse des états stationnaires

La fonction $\rho_i(s)$ modélise la vitesse d'absorption du nutriment par l'espèce i et suit une loi de Michaelis-Menten. Elle s'écrit donc comme suit :

$$\rho_i(s) = \frac{\rho_{\max,i} s}{K_i + s}.$$

La formule indique comment l'espèce i absorbe le substrat en fonction de la disponibilité de s . Plus s est élevé, plus l'absorption est rapide, jusqu'à atteindre un plateau à $\rho_{\max,i}$.

De plus, la fonction de croissance $\mu_i(q_i)$ suit la relation de Droop :

$$\mu_i(q_i) = \begin{cases} 0, & \text{si } q_i \leq k_i, \\ \mu_{i,\infty} \left(1 - \frac{k_i}{q_i}\right), & \text{si } q_i > k_i. \end{cases}$$

où :

- K_i est la constante d'affinité de l'espèce i pour le substrat.
- $\rho_{\max,i}$ est le taux d'absorption maximal.
- $\mu_{i,\infty}$ est le taux de croissance maximal.
- k_i est le quota minimal en dessous duquel la croissance s'arrête.
- $q_{i,\max}$ est le quota maximal qu'une cellule peut absorber et stocker.

Notons que $q_{i,\max}$ n'est pas donné tel quel mais est définie de la façon suivante :

$$q_{i,\max} = k_i + \frac{\rho_{\max,i}}{\mu_{i,\infty}}$$

Si q_i est petit, la croissance est très réduite. Lorsqu'il dépasse un seuil critique, la croissance est proportionnelle au quota. Cela reflète l'accumulation du nutriment intracellulaire avant d'être utilisé pour la croissance.

Les états stationnaires du modèle sont obtenus en annulant les dérivées temporelles :

$$0 = (s_{in} - s^*)D^* - \rho_1(s^*)x_1^* - \rho_2(s^*)x_2^*,$$

$$0 = \rho_1(s^*) - \mu_1(q_1^*)q_1^*,$$

$$0 = \rho_2(s^*) - \mu_2(q_2^*)q_2^*.$$

Cela permet de caractériser les conditions dans lesquelles une espèce prend le dessus sur l'autre. Notons que la coexistence ne pourrait se produire que de manière purement théorique ici. En effet, il y a bien un point fixe permettant cet état, mais ce dernier est instable.

On distingue :

- Coexistence des deux espèces : $\mu_1(q_1^*) = \mu_2(q_2^*) = D$, (purement théorique).
- Survie d'une seule espèce : $\mu_1(q_1^*) = D$ et $\mu_2(q_2^*) < D$, ou inversement.
- Extinction des deux espèces : $s^* = s_{in}$.

On prend les valeurs suivantes :

Paramètre	Valeur	Paramètre	Valeur	Paramètre	Valeur
s_{in}	6.0	$\mu_{1,\max}$	1.7	$\mu_{2,\max}$	1.8
K_1	0.3	K_2	0.6	$\rho_{m,1}$	7.0
$\rho_{m,2}$	8.0	k_1	1.75	k_2	1.80

TAB. 1 – Paramètres du modèle du modèle de Droop.

Ainsi la résolution statique donne :

Solutions analytiques

Lorsque l'on ne se trouve pas dans une phase de bang, on parle de phase singulière. Dans ce cas, il est possible de trouver l'expression de l'arc singulier de $D(t)$. Intuitivement, on peut comprendre que l'on cherche à maximiser la croissance de x_1 par rapport à x_2 , et donc de garder le système au plus proche du maximum de $\Delta(s)$.

D'un point de vue plus mathématique, cela revient à résoudre à stabiliser s au s_{opt} qui maximise $\Delta(s)$. En reprenant la dynamique, on a donc :

$$\begin{aligned}
s &= s_{opt} \\
\iff \dot{s} &= 0 \\
\iff (s_{in} - s_{opt})D_s(t) - \rho_1(s_{opt})x_1(t) - \rho_2(s_{opt})x_2(t) &= 0 \\
\iff \frac{\rho_1(s_{opt}) \times x_1(t) + \rho_2(s_{opt}) \times x_2(t)}{s_{in} - s_{opt}} &= D_s(t)
\end{aligned}$$

On retiendra donc la formule suivante qui nous donne bien la formule de l'arc singulier

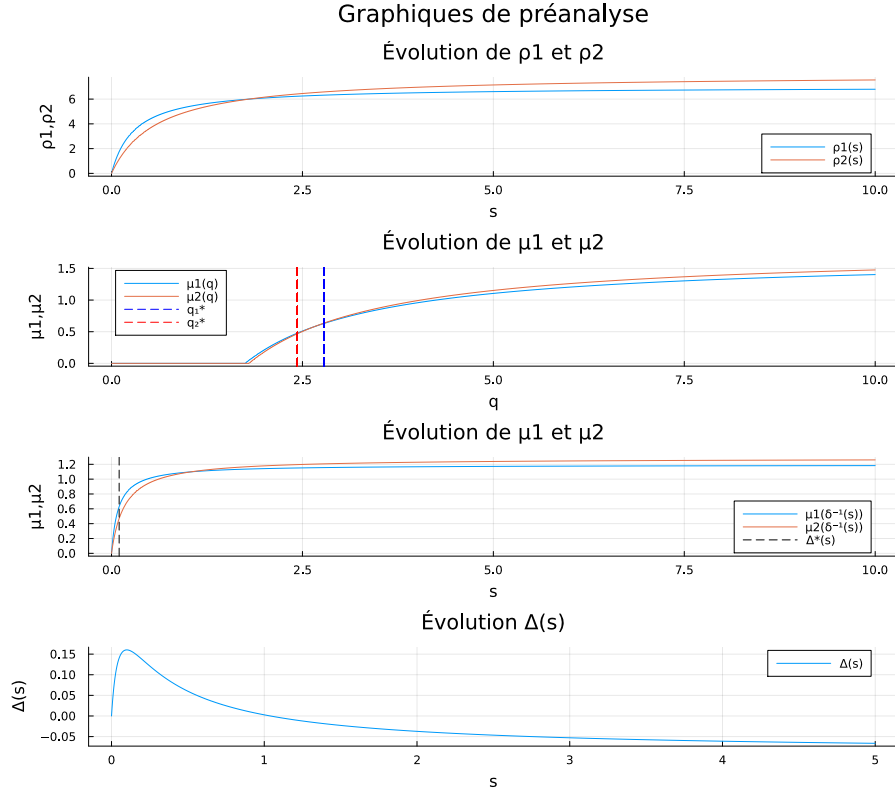


FIG. 3 – Modèle de Droop : les fonctions de base décrivant l’absorption des nutriments et la croissance des algues vérifient les hypothèses énoncées dans [10]. En particulier, la différence entre les taux de croissance à l’équilibre peut être positive ou négative, ce qui garantit que le problème de contrôle optimal est bien posé : chaque espèce peut dominer la compétition pour différentes valeurs du taux de dilution D .

$$D_s(t) = \frac{\rho_1(s_{opt}) \times x_1(t) + \rho_2(s_{opt}) \times x_2(t)}{s_{in} - s_{opt}} \quad (13)$$

Notons néanmoins que cette formulation bien qu’efficace (et utilisée dans le code) nécessite une estimation à priori de s_{opt} (faite en préanalyse) et n’est pas aussi formelle que la formulation rigoureuse se basant sur le Principe du Maximum de Pontryagine (PMP), qui nécessite une analyse mathématique plus lourde impliquant l’Hamiltonien.

Solutions numérique

L’évolution des variables suit les équations différentielles du modèle de Droop, discrétisées via Crank-Nicolson, une méthode numérique stable pour intégrer les équations différentielles du modèle.

```

1 # Crank-Nicolson scheme (nonlinear constraints)
2 @NLconstraints(sys, begin
3   con_ds[i = 1 :N], s[i+1] == s[i] + Δt * (ds[i] + ds[i+1]) / 2.0
4   con_dq1[i = 1 :N], q1[i+1] == q1[i] + Δt * (dq1[i] + dq1[i+1]) / 2.0
5   con_dx1[i = 1 :N], x1[i+1] == x1[i] + Δt * (dx1[i] + dx1[i+1]) / 2.0
6   con_dq2[i = 1 :N], q2[i+1] == q2[i] + Δt * (dq2[i] + dq2[i+1]) / 2.0
7   con_dx2[i = 1 :N], x2[i+1] == x2[i] + Δt * (dx2[i] + dx2[i+1]) / 2.0
8 end)

```

Graphique d'états et d'états duels

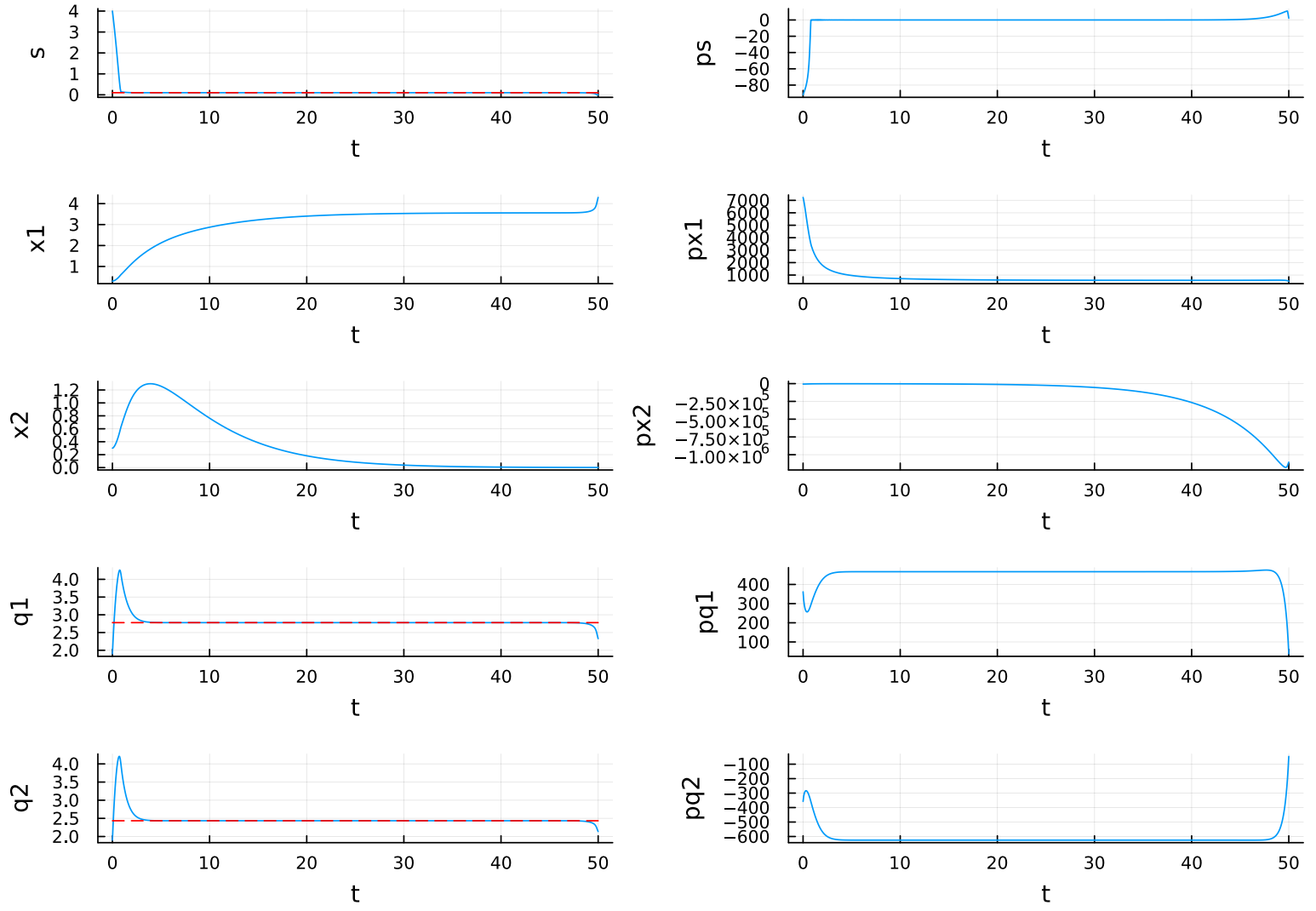


FIG. 4 – Modèle de Droop : state plots et solutions analytiques, les courbes en pointillés rouges représentent les valeurs des différentes composantes à l'équilibre optimale. On remarque que les fonctions s , q_1 , q_2 correspondent à ces valeurs la majeure partie du temps (phénomène de turnpike).

Graphique comparatif entre le contrôle optimal numérique
et le contrôle optimal analytique

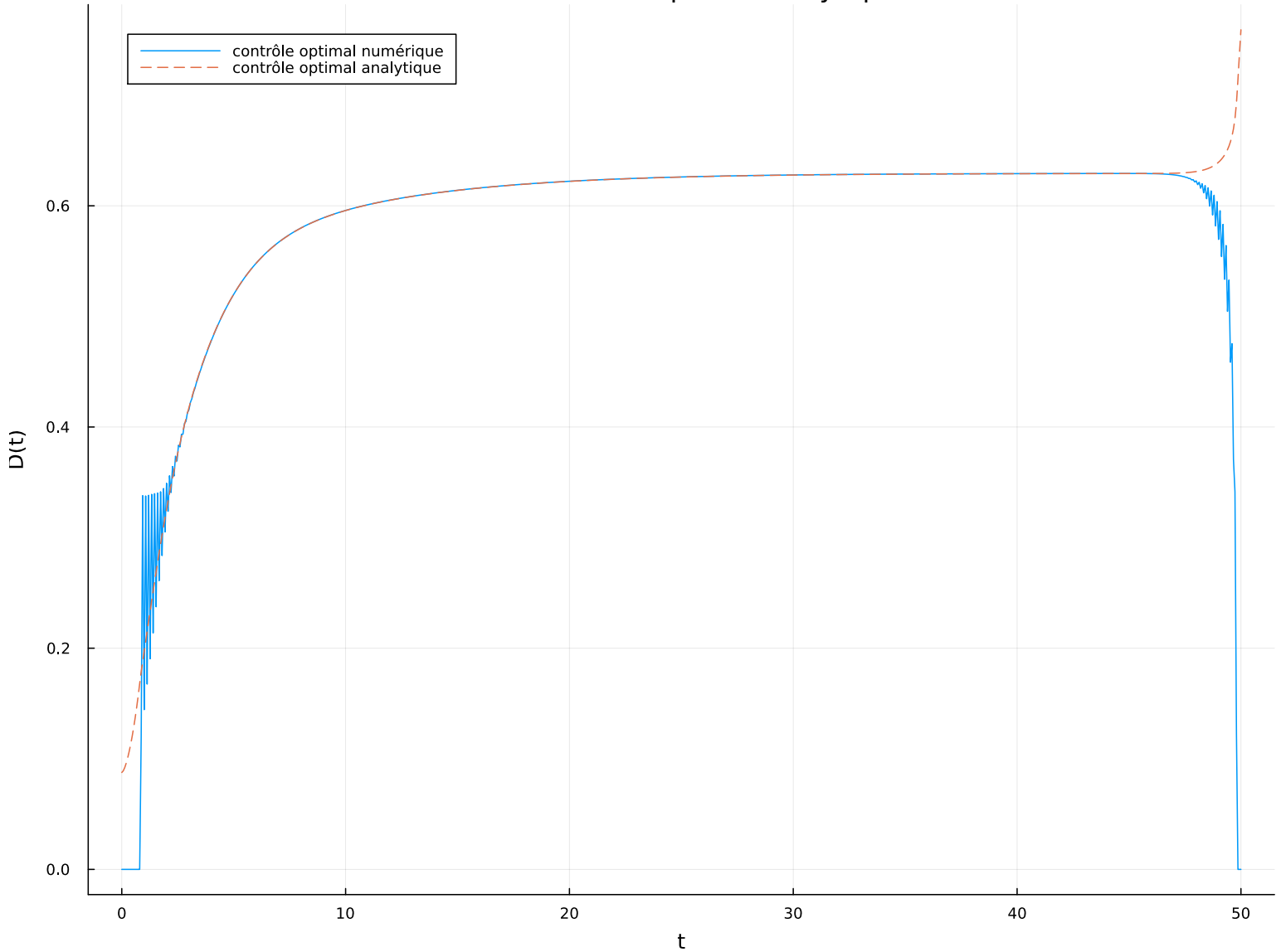


FIG. 5 – Solution obtenue pour le modèle de Droop : contrôle optimal obtenu par méthode directe (en bleu) et comparaison avec la solution analytique singulière issue du PMP (en orange). On observe que l'arc singulier théorique coïncide parfaitement avec la phase singulière obtenue par l'optimisation directe. Toutefois, quelques oscillations et artefacts numériques apparaissent dans la solution en bleu, un phénomène fréquent avec ces algorithmes d'optimisation directe. Pour y remédier, on combine généralement l'optimisation directe avec une approche indirecte (méthode de tir, ou shooting method, comme utilisé dans Caillau et al. [7]). Dans cette approche hybride, la solution directe sert à identifier la structure du contrôle optimal (ici bang-singulier) et à fournir une bonne initialisation pour la méthode de tir, permettant ainsi d'obtenir des résultats bien plus précis.

4 Modèle Photosensible

Les modèles classiques, comme ceux de Monod et de Droop, ont largement contribué à notre compréhension de la croissance microbienne en fonction des ressources limitantes, notamment les nutriments (s). Le modèle de Droop est particulièrement adapté aux algues, pour lesquelles l'introduction du quota interne est importante (voir [2]). Cependant, il ne prend pas réellement en compte l'effet de la lumière, qui est supposée constante, ni la synthèse dynamique des pigments (absence d'adaptation à la lumière). Ainsi, les modèles de Monod et de Droop ne considèrent pas la capacité des micro-organismes à ajuster dynamiquement leur physiologie en réponse aux variations lumineuses, un aspect central de la photoacclimation.

Dans cette section, nous proposons une approche différente pour étudier la compétition entre deux espèces de microalgues. Nous supposons ici que les nutriments ne sont plus limitants (pour simplifier l'analyse), mais nous introduisons des variations de lumière dans le photobioréacteur. Ce modèle vise à capturer, de manière simplifiée, comment l'ajustement des pigments influence non seulement la croissance individuelle, mais aussi les interactions compétitives entre espèces.

Ce modèle est qualifié de **photosensible** et non pas de **photoacclimatation** car :

- Absence d'Ajustement Dynamique :
 - Le modèle ne prend pas en compte l'ajustement dynamique du quota de pigments en fonction du paramètre I^* .
 - I^* représente l'intensité lumineuse optimale à laquelle une espèce ajuste son quota de pigments pour maximiser sa croissance. Dans ce modèle, I^* n'est pas explicitement intégré, ce qui limite la capacité à capturer un processus d'acclimatation progressive.
- Les quotas de pigments $\theta_i(I)$ sont des fonctions statiques de l'intensité lumineuse I , sans mécanisme de rétroaction ou d'adaptation temporelle.
- L'accent est mis sur la réponse instantanée à la lumière, plutôt que sur un processus d'acclimatation progressive.

4.1 Contexte et Objectif du Modèle

La photosensibilité influence directement la croissance des microalgues et leur capacité à rivaliser avec d'autres espèces pour cette ressource. Par exemple, dans des conditions de faible luminosité, les microalgues augmentent leur concentration en pigments pour maximiser l'absorption de lumière. En revanche, sous une lumière intense, elles réduisent ce quota pour éviter les dommages cellulaires et économiser de l'énergie.

L'objectif de cette section est de modéliser la dynamique de deux espèces de microalgues en compétition pour la lumière, en tenant compte de leur capacité à s'acclimater aux conditions lumineuses. Nous cherchons à comprendre comment la photoacclimation affecte les taux de croissance, la dominance des espèces et la stabilité des écosystèmes. En explorant ces dynamiques, nous visons à fournir des insights utiles pour des applications biotechnologiques, comme l'optimisation de la production de biomasse ou la dépollution des eaux.

4.2 Description du modèle

Le modèle utilise les variables et paramètres suivants pour décrire la dynamique des populations et l'ajustement des pigments :

Variables d'État :

— $x_1(t)$ et $x_2(t)$: Biomasses des deux espèces de microalgues au temps t .

Variable de Contrôle :

— $I(t)$: Intensité lumineuse disponible au temps t

Quota de Pigments :

Le quota de pigments $\theta_i(I)$ décrit comment une espèce de microalgue ajuste sa quantité de pigments en fonction de la lumière disponible. Il est donné par :

$$\theta_i(I) = \theta_{0_i} \cdot \frac{K_i}{K_i + I}$$

où :

- θ_{0_i} est le quota maximal de pigments que l'espèce peut produire, - K_i représente sa sensibilité à la lumière.

Quand la lumière est faible ($I \ll K_i$), les microalgues produisent un maximum de pigments ($\theta_i(I) \approx \theta_{0_i}$) pour capter autant de lumière que possible. En revanche, quand la lumière est forte ($I \gg K_i$), elles réduisent leur quota de pigments pour économiser de l'énergie, car la lumière est abondante.

Taux de Croissance Effectif :

Le taux de croissance effectif $\mu_{g_i}(I)$ suit une dynamique de type Monod :

$$\mu_{g_i}(I) = \mu_{m_i} \cdot \frac{I \cdot \theta_i(I)}{I \cdot \theta_i(I) + K_{s_i}}$$

où :

— μ_{m_i} : Taux de croissance maximal de l'espèce i .

— K_{s_i} : Constante de demi-saturation pour la lumière de l'espèce i .

Taux de Croissance Net :

Le taux de croissance net $\mu_{n_i}(I)$ reflète la croissance d'une espèce de microalgue en tenant compte à la fois de sa capacité à absorber la lumière et du coût énergétique lié à la production de pigments. Il est défini par :

$$\mu_{n_i}(I) = \mu_{g_i}(I) - \alpha_i \cdot I \cdot \theta_i(I)$$

où :

- $\mu_{g_i}(I)$ est le taux de croissance effectif, qui dépend de la lumière I et du quota de pigments $\theta_i(I)$.

- $\alpha_i \cdot I \cdot \theta_i(I)$ représente le coût énergétique de produire et maintenir les pigments. Plus la lumière est intense et plus les pigments sont nombreux, plus ce coût est élevé.

Cette formulation capture un équilibre biologique : les microalgues doivent absorber suffisamment de lumière pour croître, mais elles doivent aussi "payer" un prix énergétique pour leurs pigments. Ainsi, $\mu_{n_i}(I)$ diminue si le coût dépasse les bénéfices, ce qui explique pourquoi les microalgues ajustent leur quota de pigments en fonction de la lumière disponible.

Dynamique des Populations :

Les populations x_1 et x_2 évoluent selon les équations différentielles suivantes :

$$\frac{dx_1}{dt} = (\mu_{n_1}(I) - D) \cdot x_1$$

$$\frac{dx_2}{dt} = (\mu_{n_2}(I) - D) \cdot x_2$$

où D est le taux de dilution du système qui est, considéré ici, comme une valeur constante, simulant un environnement de type chimostat.

4.3 Méthodologie Numérique

Discrétisation du Modèle :

Pour résoudre numériquement les équations différentielles du modèle, nous avons utilisé une méthode de discrétisation basée sur le schéma de Crank-Nicolson, comme pour nos deux modèles précédents.

Les équations différentielles sont discrétisées en temps avec un pas de temps Δt , ce qui permet de transformer les équations continues en un système d'équations algébriques. Par exemple, pour la population x_1 , la discrétisation donne :

$$x_1^{n+1} = x_1^n + \frac{\Delta t}{2} [(\mu_{n_1}(I^n) - D) \cdot x_1^n + (\mu_{n_1}(I^{n+1}) - D) \cdot x_1^{n+1}]$$

où n représente l'étape temporelle.

Formulation du Problème d'Optimisation : L'objectif de notre étude est de comprendre comment l'une des deux espèces de microalgues peut coexister ou dominer dans un environnement où la lumière est limitée. Pour cela, nous avons formulé un problème d'optimisation sous contraintes, où nous cherchons à :

$$\text{Maximiser } \frac{x_1(T) + \epsilon}{x_2(T) + \epsilon}$$

à un temps final T , avec une petite constante ϵ pour éviter les divisions par zéro.

Contraintes :

- Bornes sur l'intensité lumineuse : $I_{\min} \leq I(t) \leq I_{\max}$.
- Conditions initiales : $x_1(0) = 0.4$, $x_2(0) = 0.3$.

Paramètres Numériques :

- $T_{\max} = 50$: Temps final de simulation.
- $N = 2500$: Nombre de pas de temps.
- $\Delta t = \frac{T_{\max}}{N}$: Pas de temps.
- $I_{\max} = 100$
- $I_{\min} = 2.967$, calculé dans le code avant optimisation
- $D = 0.8$: taux de dilution constant.

4.3.1 Préanalyse et Validation du modèle

Avant de passer à l'optimisation, nous avons vérifié que notre modèle reproduisait bien les comportements biologiques attendus. Pour cela, nous avons analysé plusieurs graphiques clés qui montrent comment les deux espèces réagissent à la lumière.

Différence des Taux de Croissance (Δ) : Le graphique de la différence des taux de croissance $\Delta = \mu_1 - \mu_2$ révèle des tendances intéressantes :

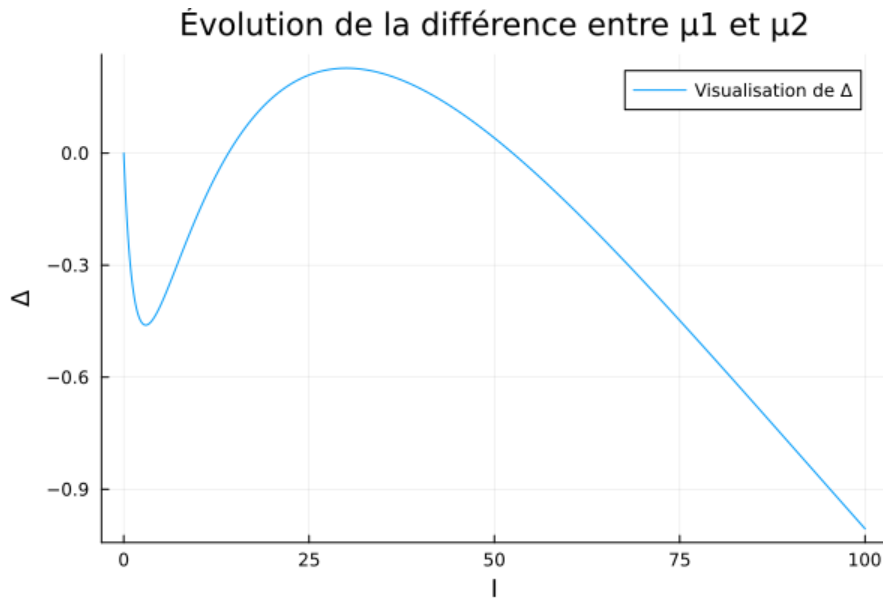


FIG. 6 – Évolution des taux de croissance en fonction de I

- Quand la lumière est faible ($I \approx 0$), Δ atteint un minimum local. Cela signifie que l'espèce 2 est légèrement favorisée dans ces conditions.
- Ensuite, Δ atteint un maximum global pour une intensité lumineuse modérée ($I \approx 26$). À ce stade, l'espèce 1 domine clairement.
- Enfin, quand la lumière devient très intense ($I \approx 100$), Δ chute fortement, montrant que l'espèce 2 reprend un avantage relatif.

Ces résultats confirment que la compétition entre les deux espèces dépend beaucoup de la quantité de lumière disponible. Chaque espèce a ses moments de domination selon les conditions.

Taux de Croissance Nets (μ_1 et μ_2) : Les courbes des taux de croissance nets μ_1 et μ_2 montrent des dynamiques similaires, mais avec quelques différences :

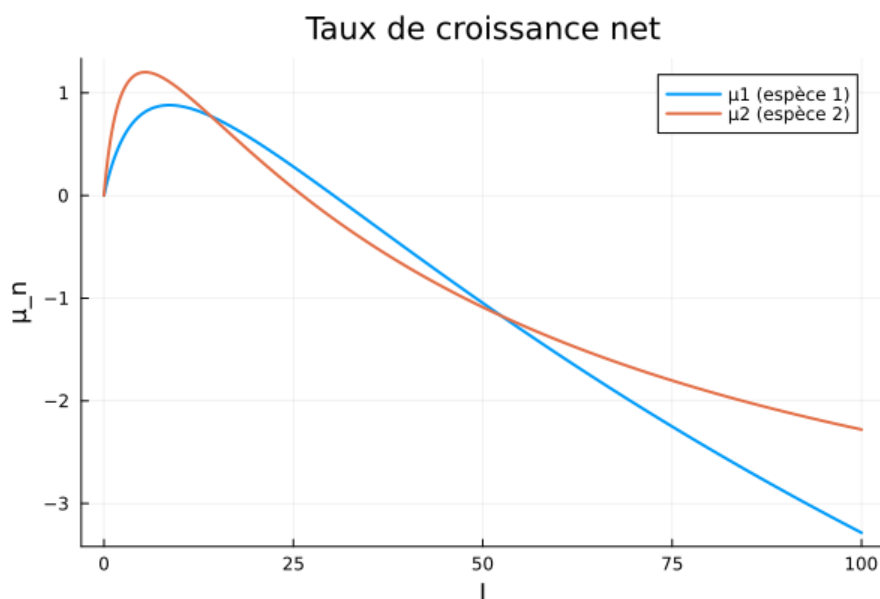


FIG. 7 – Taux de croissance net $\mu_{n_i}(I)$ pour chaque espèce

- Les deux espèces atteignent leur meilleure croissance pour la même intensité lumineuse, mais l'espèce 2 a un taux de croissance plus élevé à ce point.
- Quand la lumière est très forte ($I \approx 100$), μ_2 diminue moins vite que μ_1 . Cela suggère que l'espèce 2 est mieux adaptée aux environnements très lumineux.

Ces observations nous confirment que pour un I optimal proche de 25, l'espèce 1 domine.

Quotas en Pigments (θ_1 et θ_2) : L'évolution des quotas en pigments θ_1 et θ_2 révèle des stratégies d'adaptation différentes :

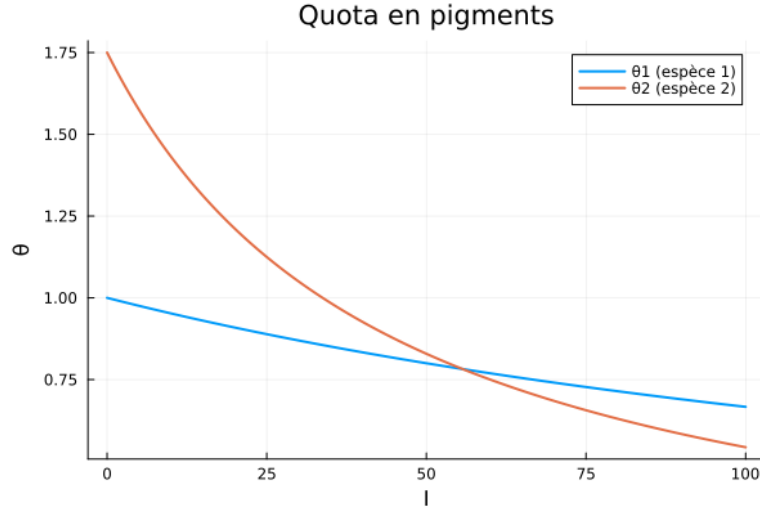


FIG. 8 – Quota en pigments pour chaque espèce

- L'espèce 2 commence avec un quota de pigments plus élevé ($\theta_2 = 1.75$), mais celui-ci diminue rapidement. Elle croise θ_1 autour de $I = 55$.
- Pour des intensités lumineuses supérieures à 55, θ_1 devient plus élevé que θ_2 . Cela montre que l'espèce 1 continue à investir davantage dans les pigments, même sous une lumière intense.

Ces résultats démontrent que l'espèce 1 a un coût énergétique plus faible pour $I \in [0, 50]$.

Ces analyses graphiques confirment que notre modèle fonctionne bien :

- Sans compétition, chaque espèce atteint un équilibre qui dépend de la lumière disponible.
- La photoacclimation permet aux espèces de moduler leur croissance en fonction de la lumière, avec des avantages qui varient selon les conditions.

4.4 Résultats et Analyse numérique

Les résultats de l'optimisation nous permettent de tirer plusieurs conclusions importantes sur la dynamique des deux espèces en compétition pour la lumière. Tout d'abord, la dominance claire de l'espèce 1, x_1 , avec une croissance exponentielle face à la décroissance rapide de l'espèce 2, x_2 , confirme que x_1 est mieux adaptée aux conditions lumineuses optimales identifiées. Cela suggère que, dans un environnement contrôlé où la lumière est ajustée autour de 24.9, l'espèce 1 a un avantage compétitif significatif.

Dynamique des Biomasses et Variables duales : Cette figure illustre l'évolution des biomasses x_1 et x_2 ainsi que leurs variables duales associées ρ_{x_1} et ρ_{x_2} . On observe que les variables duales ρ_{x_1} et ρ_{x_2} montre que l'espèce 1 est un peu moins sensible aux contraintes du système, tandis que l'espèce 2 est fortement impactée. Cela explique pourquoi x_2 décroît rapidement malgré un taux de croissance net initialement plus élevé, et également que x_1 croît de manière exponentielle.

Graphique d'états et d'états duels

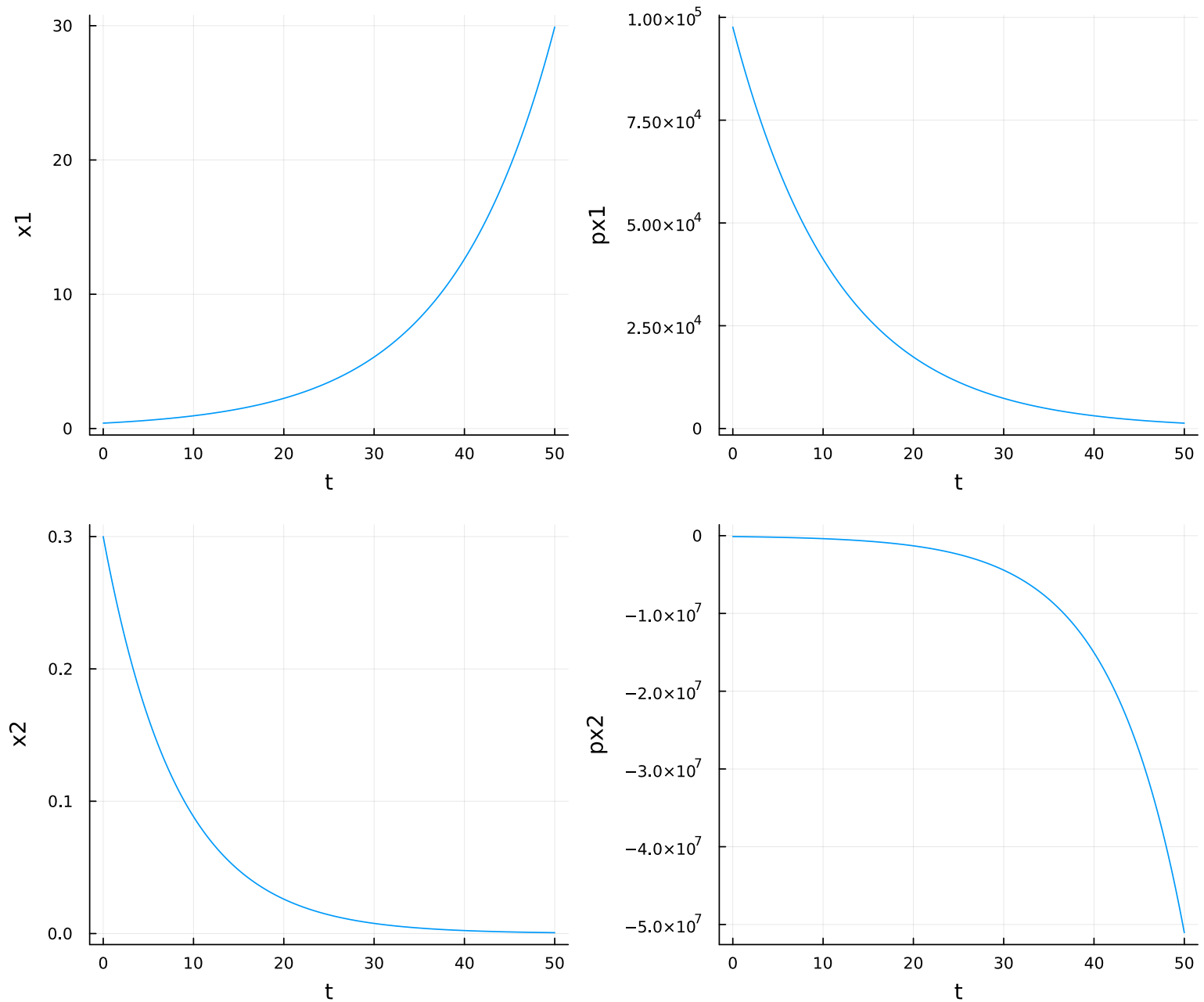


FIG. 9 – Dynamique des Biomasses et de leurs variables duales

Intensité lumineuse Optimale : Ici, notre graphe nous montre que l'intensité lumineuse I présente des variations brusques au début et à la fin de la simulation, tout en restant majoritairement constant autour de 24.9 environ.

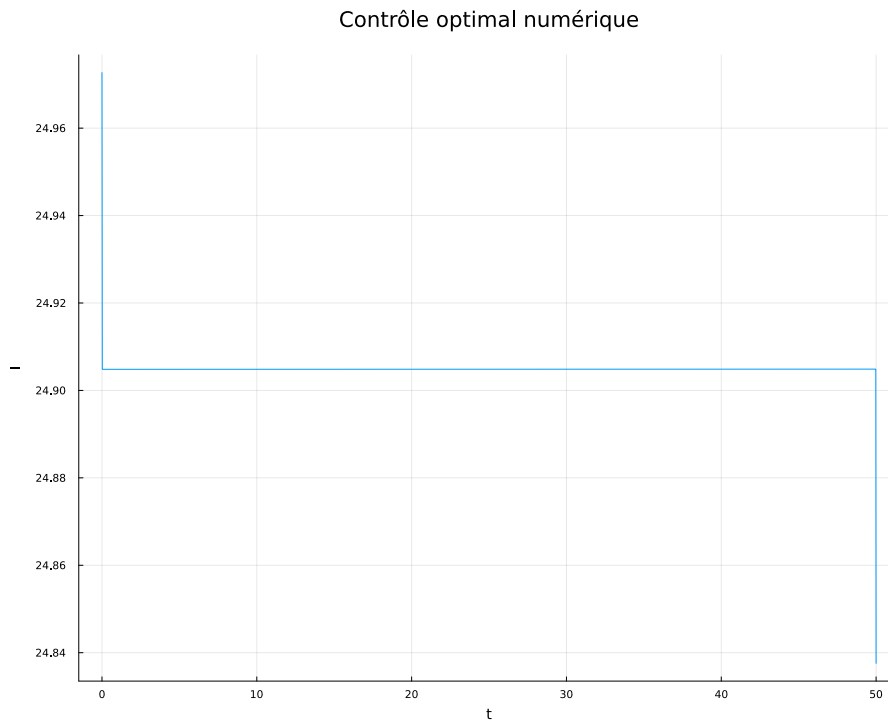


FIG. 10 – Intensité lumineuse I

Ce comportement ne correspond pas à un contrôle de type "bang-bang" classique, où la variable de contrôle alterne entre des valeurs minimales et maximales de manière répétée. On pourrait plutôt qualifier ce phénomène de **turnpike**. Cela reflète l'idée que l'intensité lumineuse reste proche d'une valeur optimale fixe pendant la majeure partie de la simulation, tout en présentant des ajustements rapides aux extrémités.

Cette stratégie de contrôle suggère que le système cherche à maintenir une intensité lumineuse optimale pour maximiser la performance du système.

5 Modèle de Photoacclimatation

Dans cette section, nous étudions un modèle de photoacclimatation où deux espèces ajustent dynamiquement leur quota de pigments photosynthétiques en réponse à la lumière disponible. Contrairement au modèle photosensible précédent, ce modèle intègre un mécanisme d'adaptation temporelle via les variables I_1^* et I_2^* , qui représentent les intensités lumineuses optimales pour chaque espèce.

5.1 Description du Modèle

Le modèle est défini par les équations suivantes :

Quota de Pigments :

$$\theta_i(I_i^*) = \theta_{0i} \cdot \frac{K_i}{K_i + I_i^*}$$

où θ_{0i} est le quota maximal de pigments et K_i est la constante d'acclimatation.

Taux de Croissance Effectif :

$$\mu_{g_i}(I, I_i^*) = \mu_{m_i} \cdot \frac{I \cdot \theta_i(I_i^*)}{I \cdot \theta_i(I_i^*) + K_s}$$

où μ_{m_i} est le taux de croissance maximal et K_s est la constante de demi-saturation.

Taux de Croissance Net :

$$\mu_{n_i}(I, I_i^*) = \mu_{g_i}(I, I_i^*) - \alpha_i \cdot I \cdot \theta_i(I_i^*)$$

où α_i représente le coût énergétique lié à la production de pigments.

Dynamique des Populations :

$$\frac{dx_i}{dt} = (\mu_{n_i}(I, I_i^*) - D) \cdot x_i$$

où D est le taux de dilution.

Dynamique des Intensités Optimales :

$$\frac{dI_i^*}{dt} = \gamma_i \cdot (I - I_i^*)$$

où γ_i est un taux d'ajustement.

Préanalyse du Modèle : Avant de procéder à l'optimisation, nous avons réalisé une préanalyse du modèle pour comprendre comment les deux espèces réagissent à la lumière et identifier les conditions favorables à leur croissance. Cette analyse repose sur l'étude de la différence des taux de croissance nets entre les deux espèces, notée :

$$\Delta = \mu_1 - \mu_2,$$

en considérant l'intensité lumineuse I comme une variable de contrôle. L'objectif est de prédire une valeur optimale de I pour maximiser la performance du système.

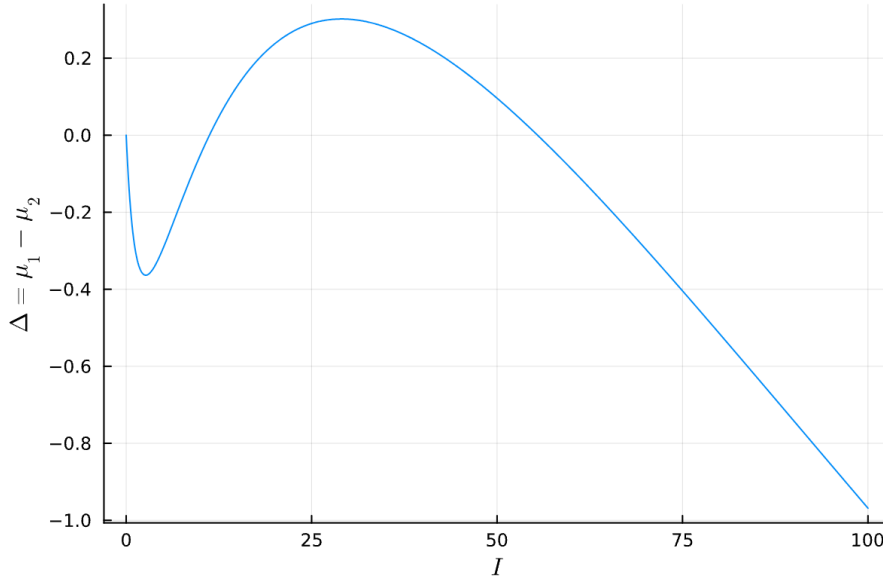


FIG. 11 – Graphique de Δ en Fonction de l'Intensité Lumineuse I

Cette préanalyse permet d'identifier une valeur optimale de I pour maximiser la performance du système.

Intensité Lumineuse Optimale : $I \approx 26 - 27$. À cette intensité, Δ est maximisé, ce qui signifie que l'espèce 1 (x_1) domine et que le système atteint sa meilleure performance. Cette valeur servira de point de référence pour l'optimisation, où I sera ajustée dynamiquement pour maintenir cette condition optimale.

Dynamique de la Compétition entre Espèces : Ces résultats guident l'optimisation en identifiant les plages d'intensité lumineuse où chaque espèce est susceptible de dominer :

- Faible Lumière ($I \approx 0$) : L'espèce 2 est favorisée grâce à un quota de pigments plus élevé.
- Lumière Modérée ($I \approx 26 - 27$) : L'espèce 1 domine, probablement en raison d'un meilleur équilibre entre absorption de lumière et coût énergétique.
- Forte Lumière ($I > 27$) : L'espèce 2 reprend l'avantage, suggérant une meilleure adaptation aux conditions lumineuses intenses.

5.2 Résultats Numériques

Les résultats de l'optimisation montrent des comportements intéressants :

Dynamique des Biomasses : x_1 décroît rapidement vers zéro, tandis que x_2 atteint un pic autour de $t = 25$ avant de décroître. Cela suggère que l'espèce 2 est temporairement favorisée dans des conditions lumineuses spécifiques.

Variables Duales :

- ρ_{x_1} reste proche de zéro, indiquant que x_1 est peu sensible aux contraintes.
- ρ_{x_2} est négatif et croît vers zéro, reflétant l'impact des contraintes sur x_2 .

Intensités Optimales I_1^* et I_2^* : Les deux variables suivent un comportement de type "bang-bang", passant brusquement de 0 à environ 26-27, puis oscillant. Cela indique que les espèces ajustent rapidement leur quota de pigments pour maximiser leur croissance.

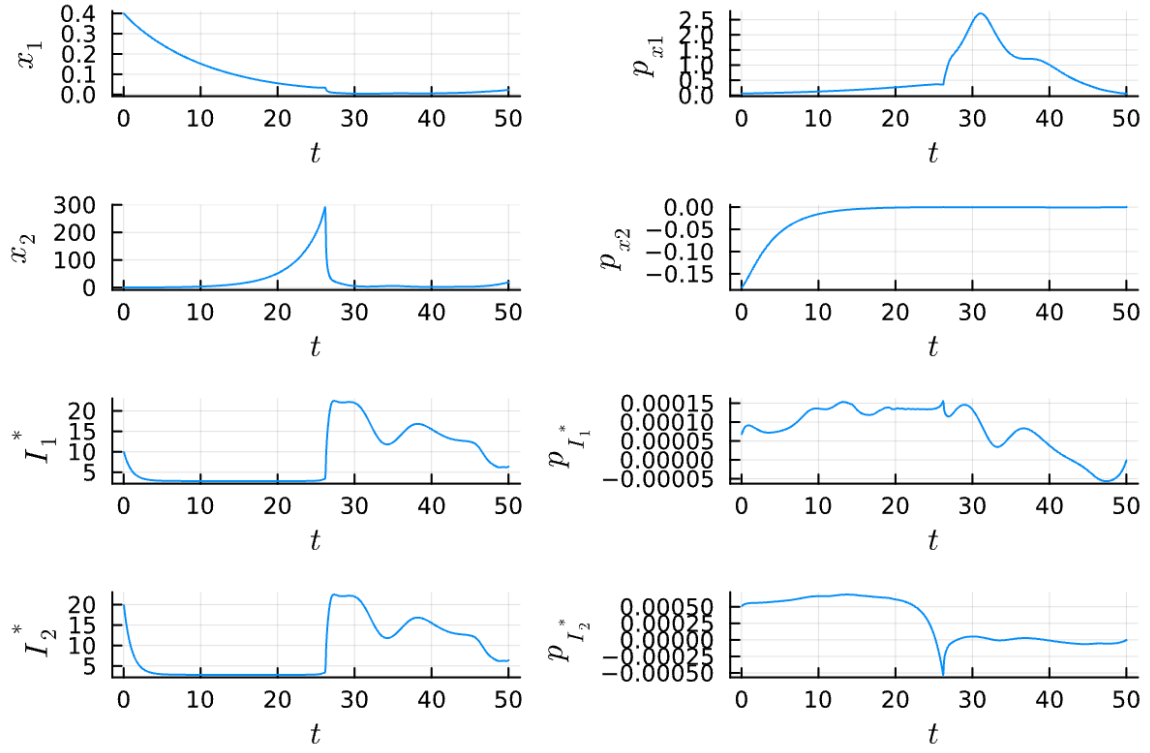


FIG. 12 – Dynamique des Biomasses et de leurs variables duales

Intensité Lumineuse I présente un pic abrupt à $t = 25 - 26$, atteignant environ 80, avant de redescendre et d'osciller. Ce comportement est inattendu et pourrait être dû à des contraintes du modèle ou à des instabilités numériques.

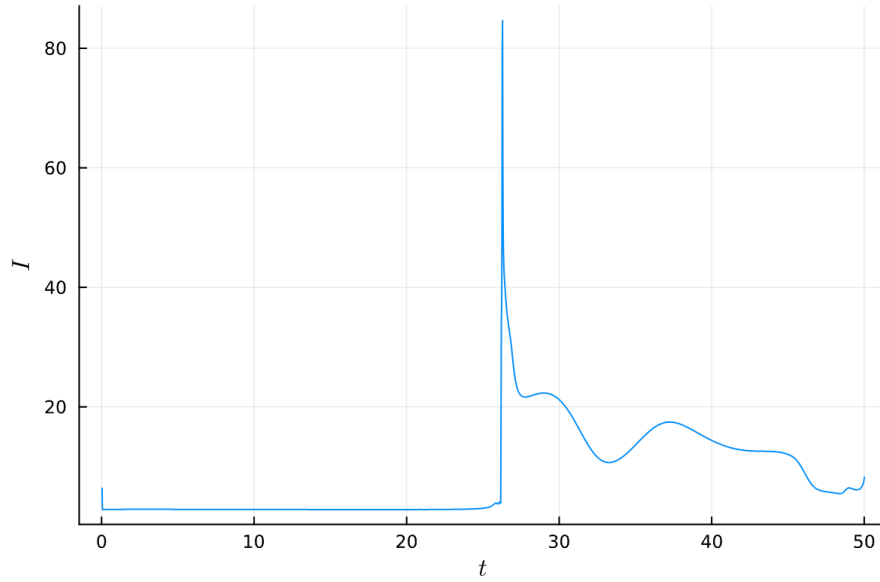


FIG. 13 – Intensité Lumineuse I

5.3 Incohérences et Points Inattendus

- **Comportement de I** : Le pic abrupt et les oscillations de I ne correspondent pas à un comportement biologique réaliste. Cela pourrait indiquer un problème dans les contraintes du modèle ou dans la formulation de l'optimisation.
- **Dynamique de x_2** : Bien que x_2 atteigne un pic, sa décroissance ultérieure semble contre-intuitive, car on s'attendrait à une stabilisation si l'espèce est bien adaptée.
- **Oscillations de I_1^* et I_2^*** : Ces oscillations pourraient être le résultat d'une instabilité numérique ou d'un manque de convergence de l'optimisation.

Le modèle de photoacclimation capture la dynamique complexe de deux espèces en compétition pour la lumière, avec des ajustements temporels de leurs quotas de pigments. Cependant, certains résultats, comme les oscillations de I et I_i^* , soulèvent des questions sur la robustesse du modèle et la robustesse du langage Julia, au vue de certaines instabilités numériques surprenantes.

6 Conclusion

Ce projet a modélisé et optimisé la sélection d'espèces microbiennes en compétition dans un chimostat à l'aide des modèles de Monod, Droop et photoacclimation. Les résultats ont validé des stratégies de contrôle optimal pour favoriser une espèce, avec des structures bang-singulier et des ajustements dynamiques de la lumière. L'apprentissage de Julia a été essentiel pour implémenter les simulations et résoudre les problèmes d'optimisation. Ce travail nous ouvre des perspectives pour des innovations futures sur des écosystèmes microbiens complexes.

Références

- [1] Bayen, T. and Mairet, F., 2014. Optimization of the separation of two species in a chemostat. *Automatica*, 50(4), pp.1243-1248.
- [2] Bernard, O., 2011. Hurdles and challenges for modelling and control of microalgae for CO₂ mitigation and biofuel production. *Journal of Process Control*, 21(10), pp.1378-1389.
- [3] Ashraf, N., Ahmad, F. and Lu, Y., 2023. Synergy between microalgae and microbiome in polluted waters. *Trends in microbiology*, 31(1), pp.9-21.
- [4] Darvehei, P., Bahri, P.A. and Moheimani, N.R., 2018. Model development for the growth of microalgae : A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 97, pp.233-258.
- [5] Singh, S.P. and Singh, P., 2015. Effect of temperature and light on the growth of algae species : A review. *Renewable and sustainable energy reviews*, 50, pp.431-444.
- [6] Dochain, D. ed., 2013. Automatic control of bioprocesses. John Wiley & Sons.
- [7] Caillaud, J.B., Ferretti, R., Trélat, E. and Zidani, H., 2023. An algorithmic guide for finite-dimensional optimal control problems. In *Handbook of Numerical Analysis* (Vol. 24, pp. 559-626). Elsevier.
- [8] Smith, H.L. and Waltman, P., 1995. The theory of the chemostat : dynamics of microbial competition (Vol. 13). Cambridge university press.
- [9] Wächter, A. and Biegler, L.T., 2006. On the implementation of an interior-point filter line-search algorithm for large-scale nonlinear programming. *Mathematical programming*, 106, pp.25-57.
- [10] Djema, W., Bayen, T. and Bernard, O., 2022. Optimal darwinian selection of microorganisms with internal storage. *Processes*, 10(3), p.461.
- [11] Wächter, Andreas and Biegler, Lorenz T. On the implementation of an interior-point filter line-search algorithm for large-scale nonlinear programming, *Mathematical programming*, 106, p.25 ;57, 2006.