Modélisation continue de la dynamique du biofilm bactérien

I°) Introduction. Hypothèses du modèle.

Pour une première approche de notre problème en termes mathématiques, nous présentons un modèle simplifié nous permettant de rendre compte de la prolifération de la bactérie *Legionella* au sein du biofilm déposé sur la conduite.

Nos hypothèses sont les suivantes :

- Le biofilm se forme sur une conduite plane, et se développe perpendiculairement à celle-ci : le modèle est spatialement unidimensionnel. On note z la coordonnée d'espace utilisée.
- Nous considérerons qu'au sein du biofilm bactérien, n'existent que trois types de cellules :
  - Les bactéries *Legionella pneumophila* (Objet central de l'étude), dont la concentration massique est notée L=L(z,t).
  - Les amibes *Hartmannella vermiformis* (protozoaires qui forment des lieux de prolifération idéaux pour *L. pneumophila*), dont la concentration massique est notée A=A(z,t).
  - Les nutriments (indispensables à la multiplication des espèces précédentes), dont la concentration massique est notée N=N(z,t).
- Le volume total du biofilm à un instant donné est constitué par les amibes et les bactéries (la taille des nutriments étant négligée devant celle de *L. pneumophila* et *H. vermiformis*) : c'est l'hypothèse de biofilm « dense ».

II°) Etablissement des équations aux dérivées partielles

A – Bilan de masse pour les bactéries

Effectuons un bilan de masse pour l'espèce *L. pneumophila*, dans la tranche de biofilm de section S comprise entre z et z+dz (durée dt) :

$$d(S.dz.L(z,t)) = S.(g_L(z,t) - g_L(z+dz,t)).dt + S.dz.\mu_{0,L}(z,t).L(z,t).dt$$

, où $\overrightarrow{g_L} = g_L.\overrightarrow{e_z}$ (kg.m^{-2}.s^{-1}) désigne le vecteur densité de flux de masse associé aux bactéries et $\mu_{0,L}$ (s^{-1}) leur taux de croissance spécifique. Il vient :

$$\frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{\partial g_L}{\partial z} + \mu_{0,L}.L$$

Or, notant $\vec{u} = u(z,t).\overrightarrow{e_z}$ (m.s^1) la vitesse de déplacement de la biomasse (bactérie et amibes), on a :

$$\overrightarrow{g_L}(z,t) = L(z,t).\vec{u}(z,t)$$

D'où :

$$\boxed{\frac{\partial L}{\partial t} = -u.\frac{\partial L}{\partial z} + (\mu_{0,L} - \frac{\partial u}{\partial z}).L \qquad (1)}$$

B – Bilan de masse pour les amibes

De même, le bilan de masse pour l'espèce *H. vermiformis* nous amène à l'équation aux dérivées partielles :

$$\boxed{\frac{\partial A}{\partial t} = -u.\frac{\partial A}{\partial z} + (\mu_{0,A} - \frac{\partial u}{\partial z}).A \qquad (2)}$$

, où l'on a défini le taux de croissance relatif aux amibes $\mu_{0,A} = \mu_{0,A}(z,t)$ (s^{-1}).

C – Equation pour le champ de vitesses

Selon l'hypothèse de biofilm « dense », c'est-à-dire dont tout le volume est occupé par les légionnelles L et les amibes A, on vérifie que :

$$\frac{L}{\rho_L} + \frac{A}{\rho_A} = 1$$

, ρ_L et ρ_A (kg.m^{-3}) désignant les masses volumiques respectives de *L. pneumophila* et *H. vermiformis.*

De sorte que l'équation $\frac{1}{\rho_L} * (1) + \frac{1}{\rho_A} * (2)$ donne accès à la dérivée spatiale $\frac{\partial u}{\partial z}$:

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \left[\mu_{0,L}.\frac{L}{\rho_L} + \mu_{0,A}.\frac{A}{\rho_A}\right] = \overline{\mu_0}(z,t)$$

Comme $u(0,t) = 0$ alors :

$$\boxed{u(z,t) = \int_0^z \overline{\mu_0}(z',t)\,.dz' \qquad (3)}$$

D – Epaisseur du biofilm

Notons $e = e(t)$ l'épaisseur du biofilm. La vitesse de déplacement de l'interface biofilm / liquide est donnée par :

$$u_e(t) = \frac{de}{dt} = u(e(t),t) - \lambda . e(t)^2$$

, le coefficient λ ($m^{-1}.s^{-1}$) traduisant dans l'équation un phénomène d'arrachement de la surface du biofilm lorsque celui-ci devient très étendu spatialement (dû par exemple à l'écoulement du liquide dans la conduite). Compte-tenu de (3), il vient alors :

$$\boxed{\frac{de}{dt} = \int_0^e \overline{\mu_0}(z',t)\,.\,dz' - \lambda . e^2 \qquad (4)}$$

E – Bilan de masse pour les nutriments

Nous avons émis l'hypothèse que les nutriments sont de dimensions beaucoup plus petites que les amibes et légionnelles. Dans ces conditions, effectuons un bilan de masse, de la même manière que précédemment.

$$d(S.dz.N(z,t)) = S.(g_N(z,t) - g_N(z+dz,t)).dt + S.dz.r_N(z,t).dt$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{\partial g_N}{\partial z} + r_N$$

On a noté $r_N = r_N(z,t)$ ($kg.m^{-3}.s^{-1}$) le taux de conversion des nutriments, et $\overrightarrow{g_N} = g_N.\overrightarrow{e_z}$ ($kg.m^{-2}.s^{-1}$) le vecteur densité de flux de masse pour les nutriments.

D'après la loi de Fick (dont l'utilisation est justifiée du fait de la taille des nutriments) :

$$g_N(z,t) = -D.\frac{\partial N}{\partial z}$$

D ($m^2.s^{-1}$) est un coefficient de diffusion propre aux nutriments. Il vient, en supposant $D = Cte$:

$$\boxed{\frac{\partial N}{\partial t} = D.\frac{\partial^2 N}{\partial z^2} + r_N \qquad (5)}$$

F – Expressions des taux de croissance ou conversion

A présent, précisons les expressions des divers taux de création (algébrique) de légionnelles, amibes, nutriments. Celles-ci sont issues du modèle de Monod :

$$\mu_{0,L}(z,t) = \frac{k_1.N(z,t)}{k_2+N(z,t)} + \frac{k_3.A(z,t)}{k_4+A(z,t)} \qquad (6)$$

$$\mu_{0,A}(z,t) = \frac{k_5.N(z,t)}{k_6+N(z,t)} - \frac{k_3.L(z,t)}{k_4+A(z,t)} \qquad (7)$$

$$r_N(z,t) = -\frac{k_1.N(z,t).L(z,t)}{k_2+N(z,t)} - \frac{k_5.N(z,t).A(z,t)}{k_6+N(z,t)} \qquad (8)$$

G – Synthèse du modèle

Finalement, le modèle mathématique adopté pour notre problème est le suivant.

- *Variables* : z, t.
- *Inconnues* : champs de concentrations L(z,t), A(z,t), N(z,t), champ de vitesses u(z,t), épaisseur du biofilm $e(t)$.
- *Constantes* : k_1, k_2, k_3, k_4, k_5, k_6, D, ρ_L, ρ_A, λ
- *Equations aux dérivées partielles* :
  - ✓ $$\frac{\partial L}{\partial t} = -u.\frac{\partial L}{\partial z} + (\frac{k_1.N}{k_2+N} + \frac{k_3.A}{k_4+A} - \frac{\partial u}{\partial z}).L \quad (\alpha)$$
  - ✓ $$\frac{\partial A}{\partial t} = -u.\frac{\partial A}{\partial z} + (\frac{k_5.N}{k_6+N} - \frac{k_3.L}{k_4+A} - \frac{\partial u}{\partial z}).A \quad (\beta)$$
  - ✓ $$u(z,t) = \int_0^z \left[\left(\frac{k_1.N}{k_2+N} + \frac{k_3.A}{k_4+A}\right).\frac{L}{\rho_L} + \left(\frac{k_5.N}{k_6+N} - \frac{k_3.L}{k_4+A}\right).\frac{A}{\rho_A}\right] \quad (\gamma)$$
  - ✓ $$\frac{de}{dt} = \int_0^e \left[\left(\frac{k_1.N}{k_2+N} + \frac{k_3.A}{k_4+A}\right).\frac{L}{\rho_L} + \left(\frac{k_5.N}{k_6+N} - \frac{k_3.L}{k_4+A}\right).\frac{A}{\rho_A}\right] - \lambda.e^2 \quad (\delta)$$
  - ✓ $$\frac{\partial N}{\partial t} = D.\frac{\partial^2 N}{\partial z^2} - \left(\frac{k_1.L}{k_2+N} + \frac{k_5.A}{k_6+N}\right).N \quad (\varepsilon)$$

III°) Discrétisation des équations pour la résolution numérique

Discrétisons ce problème, à l'aide de la méthode des différences finies, pour envisager sa résolution numérique sous SCILAB :

-Temps (t) ➔ intervalle [0,T] ; pas $\Delta t = \frac{T}{n+1}$; $t_j = j.\Delta t, \forall\, j \in [\![0; n+1]\!]$; exposant *j*.

-Espace (z) ➔ intervalle [0,H] ; pas $\Delta z = \frac{H}{m+1}$; $z_i = i.\Delta z, \forall\, i \in [\![0; m+1]\!]$; indice *i*.

On note donc, pour tous $i \in [\![0; m+1]\!], j \in [\![0; n+1]\!]$:

$$\boxed{L_i^j = L(z_i, t_j) \;\; ; \;\; A_i^j = A(z_i, t_j) \;\; ; \;\; u_i^j = u(z_i, t_j) \;\; ; \;\; N_i^j = N(z_i, t_j) \; ; \; e^j = e(t_j)}$$

Il vient :

$$\forall\, j \in [\![0; n]\!], \forall\, i \in [\![1; m]\!],$$

$$L_i^{j+1} - L_i^j = \Delta t.\left[-u_i^j.\frac{L_{i+1}^j - L_{i-1}^j}{2.\Delta z} + L_i^j.\left(-\frac{u_{i+1}^j - u_i^j}{\Delta z} + \frac{k_1.N_i^j}{k_2 + N_i^j} + \frac{k_3.A_i^j}{k_4 + A_i^j}\right)\right]$$

$$L_0^0 = L_1^0 = L_{ini}, \text{ et } \forall\, i \in [\![2; m+1]\!], L_i^0 = 0 \;\; \textit{(C.I.)}$$

$$\forall j \in [\![0; n+1]\!], L_0^j = L_1^j \;\textit{(C.L.)}$$

$$\forall\, j \in [\![0; n]\!], \forall\, i \in [\![1; m]\!],$$

$$A_i^{j+1} - A_i^j = \Delta t. \left[-u_i^j . \frac{A_{i+1}^j - A_{i-1}^j}{2.\Delta z} + A_i^j . \left(-\frac{u_{i+1}^j - u_i^j}{\Delta z} + \frac{k_5 1.N_i^j}{k_6 + N_i^j} - \frac{k_3.L_i^j}{k_4 + A_i^j} \right) \right]$$

$$A_0^0 = A_1^0 = A_{ini}, \text{ et } \forall\, i \in [\![2; m+1]\!], A_i^0 = 0 \ \textit{(C.I.)}$$

$$\forall j \in [\![0; n+1]\!], A_0^j = A_1^j \ \textit{(C.L.)}$$

$$\forall\, j \in [\![1; n+1]\!], \forall\, i \in [\![0; m]\!],$$

$$u_{i+1}^j = u_i^j + \frac{\Delta z}{\rho_L} . \left(\frac{k_1.\left(\frac{N_i^j + N_{i+1}^j}{2}\right)}{k_2 + \left(\frac{N_i^j + N_{i+1}^j}{2}\right)} + \frac{k_3.\left(\frac{A_i^j + A_{i+1}^j}{2}\right)}{k_4 + \left(\frac{A_i^j + A_{i+1}^j}{2}\right)} \right) . \left(\frac{L_i^j + L_{i+1}^j}{2}\right)$$
$$+ \frac{\Delta z}{\rho_A} . \left(\frac{k_5.\left(\frac{N_i^j + N_{i+1}^j}{2}\right)}{k_6 + \left(\frac{N_i^j + N_{i+1}^j}{2}\right)} - \frac{k_3.\left(\frac{L_i^j + L_{i+1}^j}{2}\right)}{k_4 + \left(\frac{A_i^j + A_{i+1}^j}{2}\right)} \right) . \left(\frac{A_i^j + A_{i+1}^j}{2}\right)$$

$$\forall\, i \in [\![0; m+1]\!], u_i^0 = 0 \ \textit{(C.I.)}$$

$$\forall\, j \in [\![0; n+1]\!], u_0^j = 0 \ \textit{(C.L.)}$$

$$\forall\, j \in [\![0; n]\!],$$

$$e^{j+1} = e^j + \Delta t. \left(u_{m+1}^j - \lambda . \left(e^j\right)^2 \right)$$

$$e^0 = \Delta z$$

$$\forall\, j \in [\![0; n]\!], \forall\, i \in [\![1; m]\!],$$

$$N_i^{j+1} - N_i^j = \Delta t. \left[D. \frac{N_{i+1}^j + N_{i-1}^j - 2.N_i^j}{\Delta z^2} - N_i^j . \left(\frac{k_1.L_i^j}{k_2 + N_i^j} + \frac{k_5.A_i^j}{k_6 + N_i^j} \right) \right]$$

$$N_0^0 = N_1^0 = N_{ini}, \text{ et } \forall\, i \in [\![2; m+1]\!], N_i^0 = 0 \ \textit{(C.I.)}$$

$$\forall\, j \in [\![0; n+1]\!], N_{m+1}^j = N_m^j \ \textit{(C.L.)}$$

On introduit les matrices suivantes, de taille (m+2)*(n+2) (la ligne i correspond aux valeurs prises par l'inconnue en z_{i-1}, aux différents instants $t_1, t_2, \dots, t_{n+1}$; la colonne j correspond aux valeurs prises par l'inconnue à l'instant t_{j-1}, aux différentes cotes $z_1, z_2, \dots, z_{m+1}$) :

$$L = \left(L_i^j\right)_{1 \leq i \leq m+2\,;\,1 \leq j \leq n+2} \ ; \ \mathrm{A} = \left(A_i^j\right)_{1 \leq i \leq m+2\,;\,1 \leq j \leq n+2} \ ;$$

$$N = \left(N_i^j\right)_{1 \leq i \leq m+2\,;\,1 \leq j \leq n+2} \ ; \ u = \left(u_i^j\right)_{1 \leq i \leq m+2\,;\,1 \leq j \leq n+2}$$

Ainsi que le vecteur colonne :

$$e = \left(e^j\right)_{0 \leq j \leq n+1}$$

Nous avons réalisé à partir de ces équations discrétisées un programme SCILAB permettant de modéliser la dynamique du biofilm bactérien. Le script est fourni en annexe.