

SUR L'UTILITE DE LA MODELISATION ET DE L'ANALYSE ASYMPTOTIQUE

Emmanuel Frénod¹

Résumé : Nous montrons comment la modélisation et l'analyse asymptotique aident à comprendre des phénomènes, à tester des hypothèses et à améliorer des outils de simulation. Nous nous appuyons sur des exemples pour illustrer le propos

Abstract. We show how modeling and asymptotic analysis helps to understand phenomena to test hypotheses and to improve simulation tools. We illustrate this using examples.

¹ LMBA (Laboratoire de Mathématiques de Bretagne Atlantique), UMR CNRS 6205, Université de Bretagne-Sud, Vannes, France.

1 – Introduction

La modélisation est un formidable outil pour aider à comprendre les phénomènes. La première raison de cela est que, pour atteindre son objectif, à savoir la simulation d'un phénomène donné, le modélisateur est amené à poser des questions un peu différentes de celles que se posent les scientifiques du domaine qui l'étudie habituellement. Cela aide à comprendre le paradigme servant à aborder le phénomène en question.

Une fois modélisé sous la forme d'un modèle mathématique, généralement continu ou de très grande taille, des méthodes de discrétisation permettent de construire des modèles du phénomène de taille plus petite, donc traduisibles en logiciels. Les logiciels construits permettent alors de faire des simulations du phénomène qui, via des méthodes de visualisation, peuvent être interprétées. La conséquence de telle ou telle modification des conditions du phénomène peut alors être étudiée.

D'autre part, elle permet de tester des hypothèses. Face à un phénomène incompris ou mal compris, une hypothèse peut être émise sur le fonctionnement de ce phénomène. Un modélisateur peut ensuite traduire cette hypothèse sous la forme d'un modèle qui peut alors être implémenté. A l'aide du logiciel résultant, des simulations peuvent être réalisées. Si elles sont conformes à certains aspects du phénomène, il est possible de conclure que l'hypothèse formulée n'est pas complètement irréaliste.

L'analyse asymptotique est un outil de modélisation mathématique. Elle permet de déduire des modèles à partir d'autres et de hiérarchiser les modèles décrivant un phénomène donné.

Elle permet également d'améliorer les performances de logiciels de simulation. Un logiciel de simulation, basé sur un modèle

efficace, qui fonctionne correctement dans la plupart des situations, peut s'effondrer lorsque le phénomène à simuler contient ou génère des oscillations dont la période caractéristique est très petite devant l'échelle globale du phénomène. La raison de cela est que, dans ce cas, l'espace supportant le phénomène doit être divisé en un très grand nombre de cellules, petite devant la taille caractéristique de la période d'oscillation, et donc extrêmement petite en regard de l'échelle à laquelle la simulation doit avoir lieu. Les simulations deviennent alors beaucoup trop coûteuses en temps de calcul pour être menées. Face à ce problème, des méthodes d'analyse asymptotique permettent de retirer des modèles la présence explicite des oscillations pour ne garder que leur effet moyen. Ainsi en remplaçant le modèle sur lequel est basé le logiciel par un modèle ne contenant que l'effet moyen des oscillations permet au logiciel d'aborder le phénomène, même lorsque ce dernier contient ou génère des oscillations.

2 - Comprendre des phénomènes

Pour réaliser une simulation, en premier lieu, il est nécessaire de disposer d'un modèle mathématique du support physique où le phénomène a lieu. Ensuite il faut utiliser ou construire un modèle mathématique du phénomène à simuler, cohérent avec le modèle du support physique. Le modèle issu du couplage de ces deux derniers doit être discrétisé avant d'être implémenté.

Un exemple de simulation est donné en figure 1, constituée d'images extraites d'un film fait par DHI. L'image en haut à gauche montre le haut d'une vallée quelques instants après la rupture d'un barrage. Sur les images suivantes, la suite de la simulation de l'écoulement vers le fond de la vallée est montrée.

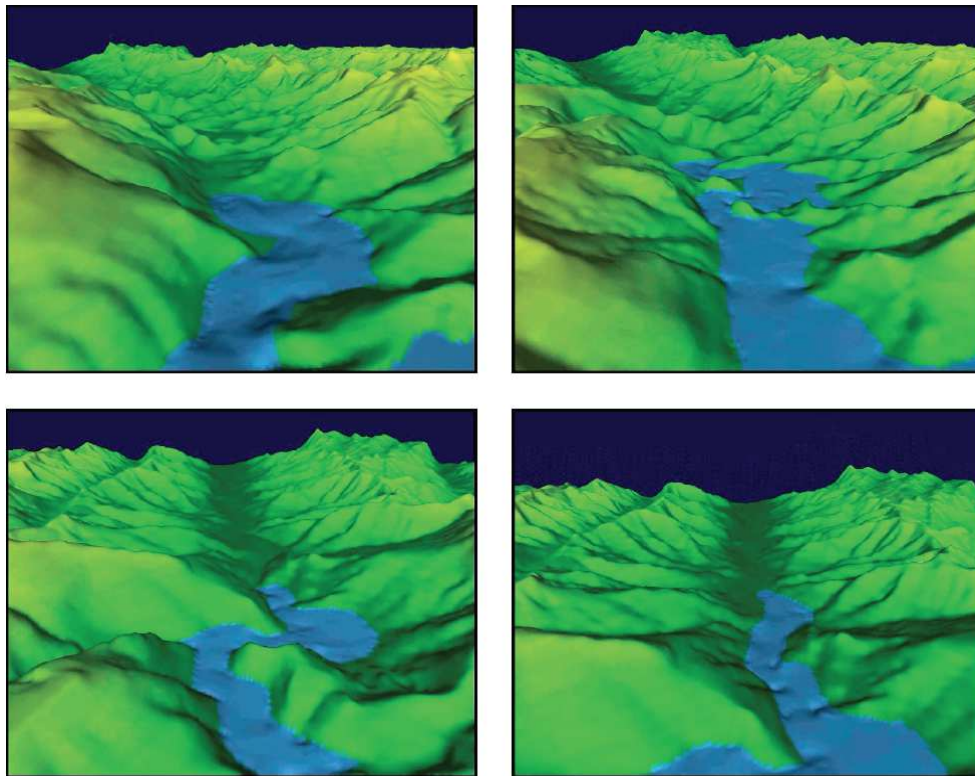


Fig. 1 – Simulation d'un écoulement d'eau dans une vallée suite à la rupture d'un barrage.
(Extrait d'un film fait par DHI¹.)

Dans cet exemple, le support physique où le phénomène à lieu est l'ensemble constitué des montagnes et de la vallée où l'écoulement se produit. Le modèle mathématique de ce support est une fonction de deux variables donnant, pour chaque point horizontal, son altitude. Le modèle mathématique du phénomène est le système d'équations aux dérivées de Saint-Venant, c.f. Saint-Venant [16], Gerbeau & Perthame [8] et Bouchut *et al.* [4] (ou Shallow-Water Equations en anglais).

Le modèle mathématique est discrétisé par une méthode de volumes finis, cf. LeVeque [13]. L'ensemble est intégré dans un logiciel commercial de bonne qualité, nommé Mike® 2D, cf. [1]

Il n'est pas utile d'argumenter longtemps pour expliquer l'intérêt pour un service public ou une collectivité publique, à proximité d'un barrage, de disposer d'un tel outil. Cela peut lui permettre de mettre au point des protocoles d'évacuation, d'étudier

la réalisation d'ouvrage d'art pour influencer l'écoulement en cas d'accident, etc. Cette démarche d'utilisation de la simulation pour comprendre les phénomènes peut être étendue à tous les problèmes liés à des phénomènes naturels, industriels, économiques, etc.

3 - Tester des hypothèses

L'utilisation de la modélisation afin de tester des hypothèses sera illustrée au travers du travail de recherche exposé dans Frénod & Sire [7] et qui concerne l'essai de la bactérie *Proteus mirabilis*, c.f. par exemple : Shapiro & Dworkin [17], Esipov & Shapiro [6], Rauprich *et al.* [15] et Matsuyama *et al.* [14].

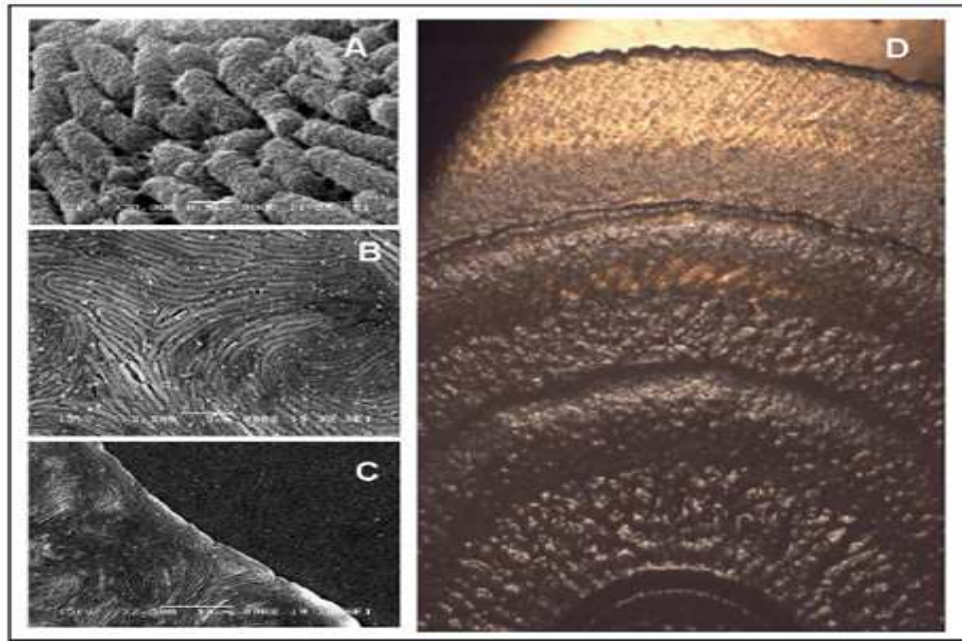


Fig. 2 – Bactéries *Proteus mirabilis* sous forme végétative (A) et sous forme différenciée (B). Front d'une colonie de bactéries *Proteus mirabilis* (C). Colonie de bactéries *Proteus mirabilis* (D). (Extrait de [7].)

Dans des conditions usuelles *proteus mirabilis* se présente sous la forme d'une cellule de quelques dixièmes de micromètres, nommée "végétative", visible sur l'image A de la figure 2. Dans certaines conditions, en particulier lorsqu'une goutte de solution contenant des bactéries est déposée sur un substrat solide, par exemple un gel d'agar dans une boîte de pétrie, certaines cellules connaissent un phénomène de différenciation. Ce phénomène est le résultat du fait que la division cellulaire ne s'accomplit pas totalement. Ainsi, au lieu de générer deux cellules filles, la cellule mère génère une cellule deux fois plus longue. En itérant ce processus, des bactéries de plusieurs dizaines de micromètres finissent par être générées. Ces bactéries, nommées "bactéries différenciées", visibles sur l'image B, sont sujettes à une oscillation individuelle qui peut provoquer un mouvement collectif de la colonie de bactéries. L'image C montre le front d'une colonie de bactéries. La partie droite (sombre) est le milieu non encore colonisé et la partie gauche est le front de la colonie, majoritairement constitué de bactéries différenciées, qui progressent vers la droite.

Ce phénomène d'essaimage ne se produit pas de manière continue dans le temps, mais des phases pendant lesquelles seules des bactéries sous forme végétative sont présentes et pendant lesquelles aucun mouvement de la colonie n'est perceptible, des phases sans mouvement de la colonie pendant lesquelles les bactéries s'allongent, des phases d'essaimage, et des phases pendant lesquelles les bactéries différenciées se transforment en cellule végétative par achèvement de la division cellulaire alternent de façon plus ou moins périodique. Du fait de cette alternance de phases, une fois la colonisation achevée, la colonie de bactéries présente une variation d'épaisseur visible sur l'image D. Cette variation d'épaisseurs est connue sous le nom de "phénomène de terrassement".

Depuis sa découverte par Hauser [9], à la fin du XIX^{ième} siècle, ce phénomène a été beaucoup étudié. La première raison de cela est médicale. En effet, *Proteus mirabilis* est un agent pathogène des reins et des voies urinaires, fréquemment impliqué dans les infections urinaires. Ainsi, comprendre son mode de colonisation a une importance pour lutter contre ces infections. La

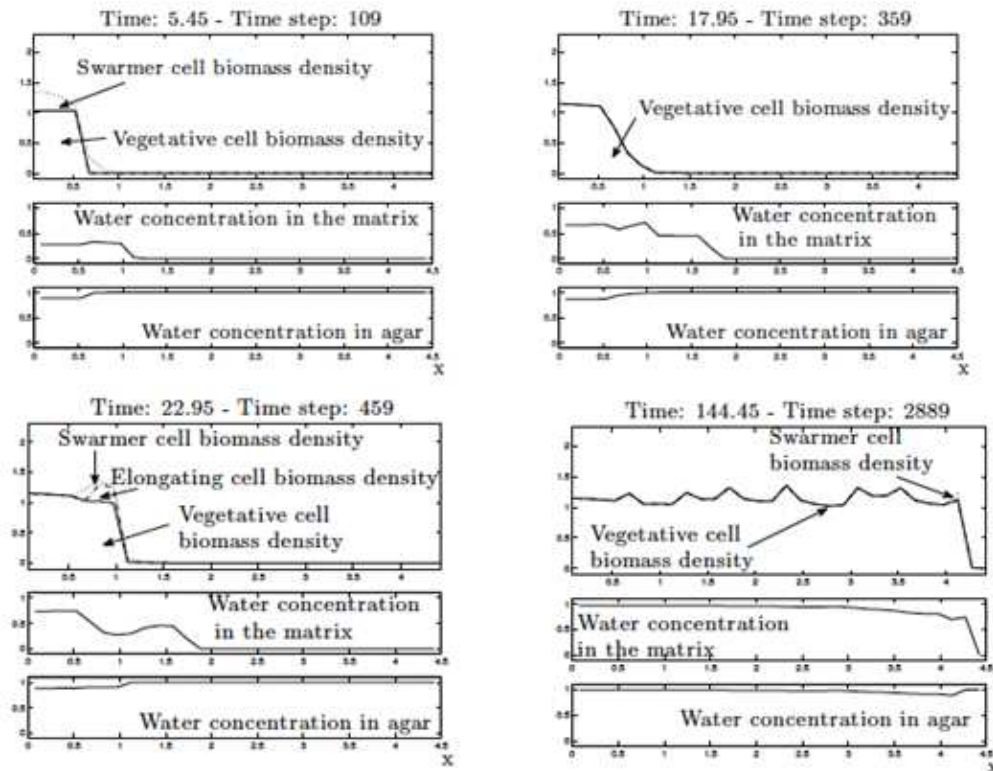


Fig. 3 – Simulation d'un essaimage de bactéries *Proteus mirabilis*. (Extrait de [7].)

deuxième raison est que, les bactéries qui sont unicellulaires présentent, dans ce phénomène d'essaimage, un comportement collectif. Une colonie de bactéries *Proteus mirabilis* semble donc être un chaînon intermédiaire entre les règnes de la vie unicellulaire et ceux de la vie pluri-cellulaire. Ainsi comprendre le phénomène de l'essaimage de *Proteus mirabilis* peut contribuer à apporter des réponses concernant les mécanismes de l'émergence de la vie pluri-cellulaire. La troisième raison de la forte mobilisation de la communauté scientifique sur ce phénomène est la fascination qu'exercent les systèmes extrêmement simples qui génèrent des formes complexes, régulières, ou esthétiques. C'est le même type de fascination qui a induit les efforts de recherche mathématique dans les domaines des fractals ou de la morphogénèse.

L'étude de ce phénomène à beaucoup portée sur les aspects biologiques et biochimiques mais assez peu de travaux portent sur les phénomènes biophysiques sur lesquels l'essaimage s'appuie. Assez

récentement plusieurs travaux, cf. Lahaye *et al.* [12, 11], Keirsse *et al.* [10], Berg [3] et Chen *et al.* [5], ont mis en évidence que la concentration en eau de la matrice dans laquelle la colonie des bactéries baigne jouait un rôle biophysique important dans le phénomène d'essaimage. Cependant, certains aspects du phénomène d'essaimage restaient mal expliqués. En particulier, le fait que la phase d'essaimage prenne fin alors que de nombreuses bactéries différenciées sont encore présentes dans le front semblait assez obscur.

Dans Frenod & Sire [7], l'hypothèse suivante a été émise : Lorsque la matrice est peu hydratée il y a en son sein des quasi-cristaux. Le mouvement d'oscillation individuel des bactéries en s'appuyant sur ces quasi-cristaux génère le mouvement collectif de la colonie. En revanche lorsque la matrice est hydratée, il n'y a pas de quasi-cristaux et le mouvement d'oscillation individuel des bactéries ne génère pas de mouvement collectif.

Cette hypothèse a ensuite été traduite en un modèle fait de cinq équations : une équation intégro-différentielle modélisant l'évolution de la densité des bactéries végétatives en chaque point ; une équation aux dérivées partielles modélisant la population, structurée en âge de bactéries en phase d'élongation, en chaque point ; une équation aux dérivées partielles décrivant l'évolution de la population structurée en âge des bactéries différenciées (capables de migrer) sur l'ensemble du domaine ; une équation aux dérivées partielles modélisant l'évolution de l'hydratation de la matrice extracellulaire ; et, une équation différentielle ordinaire décrivant, en chaque point, l'évolution de la concentration en eau dans le gel d'agar.

Ce modèle a été discrétisé, puis implémenté dans l'environnement Matlab® 7. La simulation dont la figure 3 donne un extrait montre que, quelques instant après qu'une goutte d'eau contenant des bactéries ait été posée sur le gel d'agar, des bactéries différenciées apparaissent et commencent à essaimer car l'hydratation de la matrice est faible (cf. image en haut à gauche).

Du fait la réhydratation de la matrice, l'essaimage s'interrompt puis les bactéries différenciées se dé-différencient pour donner des bactéries végétatives (cf. image en haut à droite).

Ensuite le phénomène reprend (cf. image en bas à gauche). A la fin du processus (cf. image en bas à droite) l'ensemble du milieu est colonisé et la colonie présente des variations d'épaisseurs rappelant le phénomène de terrassement.

La conclusion de ce travail est que l'hypothèse émise ci-dessus est crédible.

4 - Améliorer les outils de simulation

L'utilisation de l'analyse asymptotique, qui est un outil de modélisation, afin d'améliorer les outils de simulation s'appuiera sur le travail exposé dans Ailliot, Frenod & Monbet [2].

La courbe continue de la figure 4 est la trajectoire, sur un intervalle de temps de quelques semaines, d'un objet partiellement immergé dans l'océan, à proximité des côtes. Cette trajectoire est la conséquence de l'action conjuguée de la marée, imprimant l'oscillation rapide, et du vent, imprimant des variations lentes. Pour simuler cette trajectoire par une méthode numérique classique, il est nécessaire d'utiliser un pas de temps notablement plus petit que la période de l'oscillation principale, à savoir la période de la marée. Cela rend la simulation coûteuse en temps de calcul.

Dans la suite ε désigne un petit paramètre qui est, essentiellement, le rapport entre la période de marée et la longueur de l'intervalle de temps pendant lequel la trajectoire est observée. En décomposant le champs de vitesse de l'eau en un terme exclusivement dû à la marée $\mathbf{M}(t, \frac{t}{\varepsilon}, X)$, qui est périodique de période la période de la marée et d'amplitude modulée par le temps t et la position \mathbf{X} , et une perturbation $\varepsilon \mathbf{N}(t, \frac{t}{\varepsilon}, \mathbf{X})$ due aux autres facteurs, c'est à dire en écrivant cette vitesse $\mathbf{M}(t, \frac{t}{\varepsilon}, \mathbf{X}) + \varepsilon \mathbf{N}(t, \frac{t}{\varepsilon}, \mathbf{X})$, la trajectoire adimensionnée $\mathbf{X}(t)$ de l'objet est solution du système suivant :

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{V}, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{dV}{dt} = & \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \theta} (t, \frac{t}{\varepsilon}, \mathbf{X}) + \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} (t, \frac{t}{\varepsilon}, \mathbf{X}) + \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial \theta} (t, \frac{t}{\varepsilon}, \mathbf{X}) + (\nabla \mathbf{M}(t, \frac{t}{\varepsilon}, \mathbf{X})) \mathbf{V} + \\ & \mathbf{W}(t, \frac{t}{\varepsilon}, \mathbf{x}) - \mathbf{V} + \varepsilon \left(\frac{\partial \mathbf{N}}{\partial t} (t, \frac{t}{\varepsilon}, \mathbf{X}) + (\nabla \mathbf{N}(t, \frac{t}{\varepsilon}, \mathbf{x})) \mathbf{V} \right) \end{aligned} \quad (2)$$

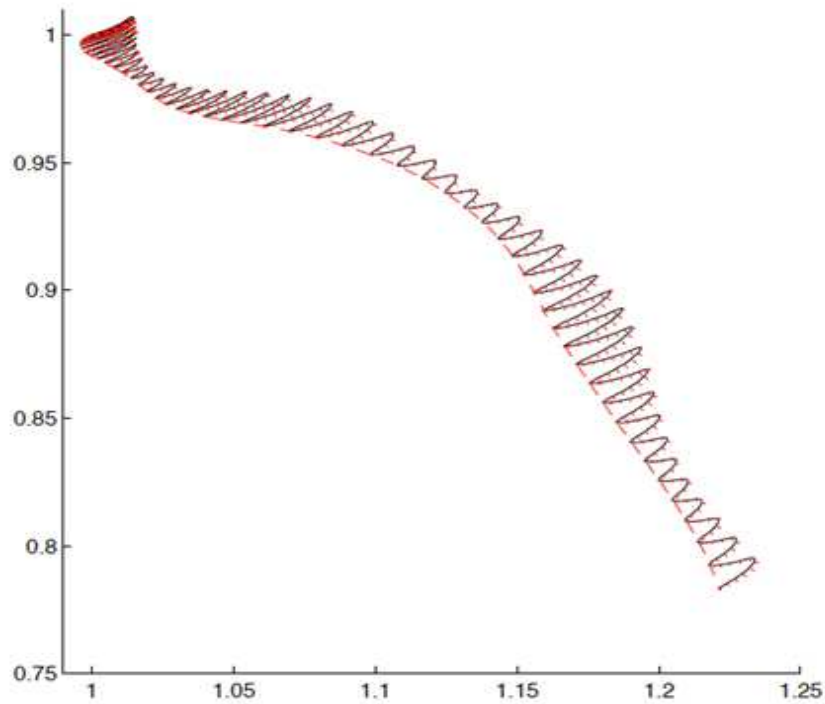


Fig. 4 – Courbe continue : X Courbe en tirets : $Y^0(t)+\epsilon Y^1(t)$.
 Courbe en pointillés : $Y^0(t)+\epsilon Y^1(t) + o(\frac{t}{\epsilon})$. (Extrait de [2].)

La première équation dit simplement que la dérivée de la position de l'objet est sa vitesse. La seconde dit que son accélération est celle de l'océan constituée des termes du membre de droite de la première et de la troisième ligne, auxquels s'ajoute la force exercée par le vent qui est proportionnelle à la différence entre la vitesse du vent $W(t, \frac{t}{\epsilon}, X)$ et la vitesse de l'objet. Le fait que pour simuler cette équation il faille utiliser un pas de temps très petit devant ϵ est matérialisé par la présence du facteur $\frac{t}{\epsilon}$ dans la seconde équation.

Ce qui est démontré dans Ailliot, Frenod & Monbet [2] c'est que $x(t)$ peut se développer asymptotiquement sous la forme :

$$X(t)=Y^0(t)+\epsilon Y^1(t)+ o(\frac{t}{\epsilon}) + \dots ,$$

Et que $V(t)$ se développe également de la façon suivante :

$$V(t)=V^0(t, \frac{t}{\epsilon}) + \epsilon V^1(t, \frac{t}{\epsilon}) + \dots ,$$

Où o est une fonction donnée explicitement. D'autre part les équations vérifiées par $Y^0(t)$, $Y^1(t)$, $V^0(t, \theta)$ et $V^1(t, \theta)$ sont établies. Ces dernières ne contiennent ni ne génèrent d'oscillation à haute fréquence, ainsi elles peuvent être simulées à un coût en temps inférieur à celui nécessaire pour simuler (1)-(2).

Un regard sur la figure 4 montre la qualité de l'approximation. En effet la courbe en tirets représente $Y^0+\epsilon Y^1$ et clairement elle reste très proche de la tendance de X . De plus si la trajectoire est reconstituée en effectuant $Y^0(t)+\epsilon Y^1(t)+ o(\frac{t}{\epsilon})$, qui est matérialisée par la courbe en pointillés, la superposition avec X est très bonne.

Ainsi, remplacer la résolution de (1)-(2) par celle du système satisfait par $Y^0(t)$, $Y^1(t)$, $V^0(t, \theta)$ et $V^1(t, \theta)$ en la couplant à la reconstitution $Y^0(t)+\epsilon Y^1(t)+ o(\frac{t}{\epsilon})$, permet de réduire le coût de calcul sans nuire à la précision du résultat

Références

- [1] Mike 21hd-Flow Model-Scientific Documentation. Technical Report, Danish hydraulic Institute, 2006.
- [2] P. Ailliot, E. Frenod, and V. Monbet. Long term object drift forecast in the ocean with tide and wind. *Multiscale Model. Simul.* 5(2):514-531, 2006.
- [3] H. C. Berg. Swarming motility: it better be wet. *Curr.Biol.*, 15:R599-600, 2005.
- [4] F. Bouchut, A. Mangeney-Castelnaud, B. Perthame, and J. P. Vilotte. A new model of Saint Venant Savage-Hutter type of gravity driven shallow water flow. *C.R.Acad.Sci.Paris, Ser.I*, 336:531-536, 2003.
- [5] B. G. Chen, L. Turner, and H. C. Berg. The waiting agent required for swarming in *Salmonella enteric* serovar tiphimurium is not a surfactant. *J. Bact.*, 189:8750-8753, 2007.
- [6] S. E. Esipov and J. A. Shapiro. Kinetic model of proteus mirabilis swarm colony development. *J.Math.Biol.* 36: 249-268, 1998.
- [7] E. Frenod and O. Sire. An explanatory model to validate the way water activity rules periodic terrace generation in *proteus mirabilis* swarm. *J.Math.Biol*, 59(4):439-467, 2009.
- [8] J.F. Gerbeau and B. Perthame. Derivation of viscous Saint-Venant system for laminar shallow water; numerical validation. *Discrete Contin Dyn. Syst. Ser. B*, 1:89-102, 2001.
- [9] G. Hauser. *Über Fauslnisbakterien und deren Beziehung zur Septicämie* FGW Vogel Leipzig Germany, 1985.
- [10] J. Keirsse, E. Lahaye, A. Bouter, V. Dupont, C. Boussard-Plédel, B. Bureau, J. L. Adam, V. Monbet, and O. Sire. Mapping bacterial surface population physiology in real-time: Infrared spectroscopy of *proteus mirabilis* swarm colonies. *Appl.Spectrosc.* 60:584-591, 2006.
- [11] E. Lahaye, T. Aubry, V. Fleury, and O. Sire. Does water activity rule *P.mirabilis* periodic swarming? II. Viscoelasticity and water balance during swarming *Biomacromolecules*, 8:1228-1235, 2007.
- [12] E. Lahaye, T. Aubry, N. Kervarec, P. Douzenel and O. Sire. Does water activity rule *P.mirabilis* periodic swarming? I. Biochemical and functional properties of the extracellular matrix *Biomacromolecules*, 8:1218-1227, 2007.
- [13] R. J. Leveque. *Finite volume methods for hyperbolic problems*. Cambridge University press 2002.
- [14] T. Matsuyama, Y. Takagi, Y. Nakagawa, H. Itoh, J. Matsuyama, and M. Wakita. Dynamic aspects of the structured cell population in a swarming colony of *proteus mirabilis*. *J. Bact.* 182:385-393, 2000.
- [15] O. Rauprich, M. Matsuchita, C. J. Weijer, F. Siegert, S. E. Epinov, and J. A. Shapiro. Periodic phenomena in *proteus mirabilis* swarm colony development. *J. Bact.* 178:6525-6538, 1996.
- [16] A. J. C. Saint-Venant. Théorie du mouvement non permanent des eaux avec application aux crues des rivières et à l'introduction des marées dans leur lit. *C. R. Acad. Sc. Paris*, 73 :147-154 ,1871.
- [17] J. A. Shapiro and M. Dworkin, editors. *Bacteria as Multicellular Organisms*. Oxford University Press, 1997.