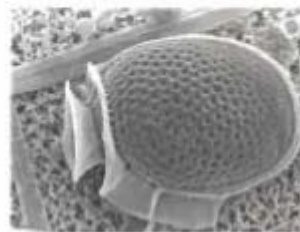


Découvrez un ensemble de documents, scientifiques ou techniques,  
dans la base Archimer : <http://www.ifremer.fr/docelec/>

Université de Rennes 1

Stage effectué à l'IFREMER (centre de Brest),  
département d'écologie côtière,  
encadré par Alain Menesguen et Geneviève Arzul

## Ajustement de modèles mathématiques de la croissance d'algues phytoplanctoniques en Culture



**Jérôme Le Berre**

F951  
LEB  
A

# Remerciements

Tout d'abord, je tiens à remercier tout particulièrement Alain Ménesguen pour avoir accepté de m'accueillir alors qu'il avait déjà d'autres stagiaires à sa charge.

J'aimerais également remercier Geneviève Arzul pour m'avoir gentiment fait visiter les laboratoires et permis de mettre mon œil dans les microscopes.

Enfin, je remercie tout le personnel de la DEL pour son accueil chaleureux, en particulier Philippe Cann avec qui j'ai pu pratiquer la plongée au sein du club de l'IFREMER, et Philippe Cugier pour son aide.

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>4</b>
<b>I Présentation</b>	<b>5</b>
<b>1 L'IFREMER</b>	<b>6</b>
1.1 Ses missions . . . . .	6
1.2 Son implantation . . . . .	6
1.3 Son organisation . . . . .	7
1.4 Le département d'Ecologie Côtière . . . . .	7
<b>2 Présentation du travail</b>	<b>9</b>
2.1 Cadre général . . . . .	9
2.2 Les campagnes Bioseine et Nutriseine . . . . .	10
2.3 Suivi des pesticides en baie de Morlaix . . . . .	10
2.4 Objectifs . . . . .	11
<b>II Facteurs nutritifs limitant la production primaire en baie de Seine</b>	<b>12</b>
<b>1 Le modèle mathématique</b>	<b>13</b>
1.1 Premier modèle . . . . .	13
1.2 Second modèle . . . . .	14
1.3 Pré-estimation des paramètres . . . . .	14
<b>2 L'ajustement du modèle</b>	<b>16</b>
2.1 La méthode de Newton-Marquardt . . . . .	16
2.1.1 L'algorithme de Newton . . . . .	16
2.1.2 Mise en œuvre . . . . .	17
2.2 La méthode du simplex de Nelder et Mead . . . . .	18
2.2.1 La méthode du simplex . . . . .	18
2.2.2 L'amélioration de Nelder et Mead . . . . .	19
2.3 Mise en œuvre et exemple de code . . . . .	20
2.4 Modification du modèle . . . . .	21
<b>3 Les résultats obtenus</b>	<b>23</b>

<b>III Effet des herbicides sur le développement des microalgues marines</b>	<b>27</b>
<b>1 Le modèle logistique</b>	<b>28</b>
<b>2 Les résultats</b>	<b>29</b>
2.1 Effet des herbicides sur les paramètres . . . . .	30
2.2 Interprétation . . . . .	32
<b>Conclusion</b>	<b>33</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>34</b>
<b>Annexes</b>	<b>36</b>
<b>Lexique</b>	<b>40</b>

# Introduction

Ce document est le compte-rendu de stage de fin de deuxième année du magistère de mathématiques et modélisation informatique de l'Université de Rennes 1. Ce stage de deux mois a été effectué au centre IFREMER de Brest, au département d'écologie côtière.

L'IFREMER participe, au titre de ses missions institutionnelles, à l'observation et à la surveillance de la mer côtière, dans le but d'améliorer la connaissance, les méthodes de protection et de restauration de l'environnement marin. La prolifération du phytoplancton marin est un sujet d'étude important car elle est susceptible d'être génératrice de nuisances, à la fois pour l'homme, consommateur des produits de la mer, et pour l'écosystème. Régulièrement, à la période du printemps et de l'été, les coquillages sont rendus impropres à la consommation, du fait de la présence d'algues phytoplanctoniques productrices de toxines.

On sait aujourd'hui que les rejets occasionnés par l'activité domestique, industrielle et agricole, peuvent favoriser la croissance d'algues phytoplanctoniques. En effet, la majeure partie des polluants rejetés dans l'environnement parvient au milieu marin, soit indirectement par les rivières, le ruissellement ou l'atmosphère, soit directement par les rejets à la mer. C'est pourquoi des études ont été menées en 1993 et 1994 dans la Baie de Seine, à l'embouchure d'un des fleuves les plus pollués d'Europe, afin d'étudier l'influence des rejets polluants sur la croissance du phytoplancton marin. Des populations de phytoplancton ont été soumises, en culture, à des conditions nutritives différentes. Par ailleurs, des études ont été menées entre 1998 et 1999 afin de déterminer les effets des herbicides sur le développement des microalgues marines toxiques dans les eaux de la baie de Morlaix.

Le propos de ce travail est de tester l'apport de diverses méthodes d'optimisation à l'amélioration de la formulation de modèles mathématiques simples de croissance phytoplanctonique en culture. La première partie de ce document présente l'organisme d'accueil où le stage a été effectué. Dans la deuxième partie, on introduit le modèle mathématique envisagé pour l'évolution du phytoplancton en présence de polluants et on détaille les techniques d'optimisation qui lui ont été appliquées. L'exploitation des mesures concernant l'effet des herbicides sur les microalgues fait l'objet de la troisième partie.

# Première partie

## Présentation

# Chapitre 1

## L'IFREMER

Etablissement public à caractère industriel et commercial, l'IFREMER (Institut Français de Recherche pour l'Exploitation de la MER) est le seul organisme français à vocation entièrement maritime. Il est placé sous tutelle conjointe des ministères de l'Education nationale, de la Recherche et de la Technologie, de l'Agriculture et de la Pêche, de l'Equipe-ment, des Transports et du Logement.

Avec 72 laboratoires ou services de recherche, l'IFREMER compte 1700 cadres, chercheurs, ingénieurs, marins, techniciens et administratifs, pour un budget annuel d'un milliard de francs.

### 1.1 Ses missions

Les missions de l'IFREMER sont :

- connaître, évaluer, mettre en valeur et rationaliser l'exploitation des ressources de l'océan,
- améliorer la connaissance, les méthodes de protection et de restauration de l'environnement marin,
- favoriser le développement socio-économique du monde maritime,
- apporter son concours à l'Etat, aux professions maritimes et aux autres organismes scientifiques, techniques et économiques concernés,
- créer et gérer les équipements d'intérêt général (flotte),
- recueillir, diffuser, valoriser les informations nationales et internationales,
- s'associer à l'élaboration d'accords et de conventions de coopération internationale dans le domaine marin.

### 1.2 Son implantation

L'IFREMER est présent dans 24 sites répartis sur tout le littoral métropolitain et dans les DOM-TOM. L'Institut est composé de 5 centres (Boulogne, Brest, Nantes, Toulon et Tahiti) et d'une vingtaine de stations rattachées à ces centres. Le Siège est situé à Paris (Issy-les-Moulineaux).

Le Centre de Brest est le plus important des sites IFREMER. Il regroupe environ 1000 personnes autour de tous les thèmes de l'océanologie. Le Centre accueille de plus un certain nombre de laboratoires d'autres centres de recherche (comme l'IRD -ex ORSTOM-, le



FIG. 1.1 – Implantation de l'IFREMER en métropole.

BRGM, l'IFRTP et l'AFSSA -ex CNEVA-) qui mènent, en collaboration avec l'IFREMER, des programmes de recherche en océnologie.

### 1.3 Son organisation

L'IFREMER est structuré en six grandes directions opérationnelles :

- la Direction de l'Environnement et de l'aménagement Littoral (DEL),
- la Direction des Ressources Vivantes (DRV),
- la Direction des Recherches Océaniques (DRO),
- la Direction de la Technologie Marine et des Systèmes d'Information (TMSI),
- la Direction des Navires océanographiques et de l'Intervention Sous-marine (DNIS),
- la Direction des Moyens et Opérations Navals (DMON).

Des directions fonctionnelles complètent cette organisation.

### 1.4 Le département d'Ecologie Côtière

Le département "Ecologie Côtière" fait partie de la Direction de l'Environnement et l'Aménagement du Littoral, il est situé sur le Centre Ifremer de Brest.

Ce département développe une connaissance multidisciplinaire quantitative de la dynamique des écosystèmes côtiers. Il se focalise plus particulièrement sur les processus susceptibles d'être générateurs de nuisances, soit pour l'homme (prolifération d'espèces toxiques, cas de *Dinophysis sp.* et d'*Alexandrium minutum*), soit pour l'écosystème (altérations de la biodiversité par l'eutrophisation ou l'invasion d'une espèce introduite, exemple de *Sargassum muticum* et de *Caulerpa taxifolia*).

Aussi, il met en œuvre des projets de recherche associant :

- des observations in situ, souvent au moyen d'une instrumentation innovante,
- des expérimentations en laboratoire
- les observations régulières des Laboratoires Côtiers de l'IFREMER.



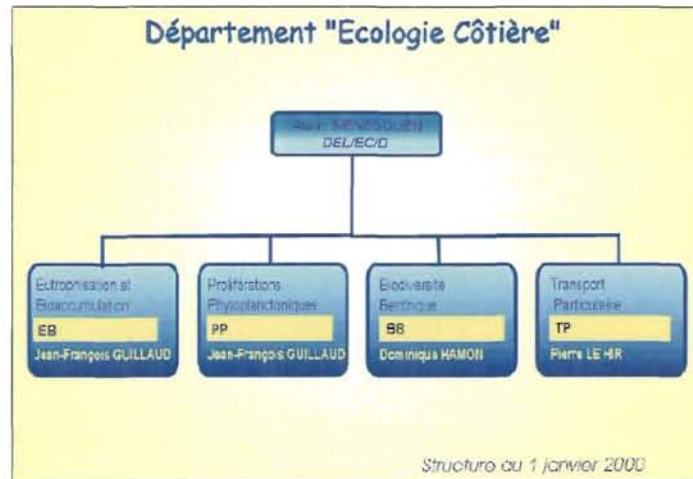


FIG. 1.2 – Organigramme du département Ecologie Côtière.

Le département utilise la modélisation mathématique :

- pour fédérer les connaissances mono disciplinaires,
- pour les coupler aux processus physiques,
- pour tester la capacité des schémas conceptuels à expliquer les phénomènes observés.

Après avoir été validés, ces modèles sont utilisés pour prévoir :

- les conséquences de certaines actions sur le milieu,
- les effets météorologiques sur les écosystèmes.

# Chapitre 2

## Présentation du travail

### 2.1 Cadre général

Le département d'écologie côtière réalise depuis de nombreuses années des études sur l'écologie du phytoplancton marin, en se focalisant en particulier sur les cas de dérèglement de la succession saisonnière "normale" des populations phytoplanctoniques. Dans les eaux côtières, ces dysfonctionnements peuvent se traduire essentiellement par deux types de phénomènes :

- La prolifération excessive d'espèces d'algues unicellulaires dans la colonne d'eau aboutissant à la coloration de l'eau de mer en vert, brun ou rouge selon les espèces en cause. Ce phénomène d'eaux colorées est souvent lié à l'enrichissement excessif d'une zone à l'eau insuffisamment renouvelée par les courants, et correspond donc en général au processus d'eutrophisation\*. Ces eaux colorées peuvent conduire à une hypoxie\* des eaux de fond, voire une anoxie\* mortelle pour la faune marine.
- Le déplacement progressif de la composition spécifique locale du plancton végétal au profit d'espèces soit introduites accidentellement, soit autochtones mais plus adaptées au nouvel environnement nutritif créé par des apports terrigènes déséquilibrés. On suspecte ainsi les apports croissants de fertilisants azotés et phosphorés, voire les effets sélectifs des herbicides amenés à la mer par les eaux de ruissellement, d'avoir favorisé les espèces ne nécessitant pas d'incorporation de silicium aux dépens des diatomées siliceuses. Parmi ces espèces non siliceuses, plusieurs sont toxiques pour la vie marine ou pour le consommateur de produits de la mer.



FIG. 2.1 – Phénomène d'eaux colorées.

Pour mieux comprendre la dynamique de ces phénomènes de croissance végétale sous diverses conditions environnementales, le département d'Ecologie Côtière utilise en parallèle des mesures in situ, des expériences de cultures en laboratoire et des modèles mathématiques. L'un des buts est en effet de déduire des expériences en milieu contrôlé une formulation mathématique adéquate des principaux processus écophysologiques en jeu pour pouvoir, en les couplant ensuite à des modèles hydrodynamiques de zones côtières réelles, reproduire les phénomènes observés in situ.

## 2.2 Les campagnes Bioseine et Nutriseine

Au cours de deux années consécutives (1993 et 1994), six campagnes ont été effectuées, en collaboration entre l'IFREMER et l'Université de Bretagne Occidentale, à des moments différents de l'année, chacune en deux ou trois stations situées sur un gradient de dilution des eaux de la Seine en Manche [5]. Elles ont été menées par Christiane Videau (Université de Bretagne Occidentale) et Alain Ménesguen dans la partie orientale de la baie de Seine, entre Le Havre et Antifer, zone soumise périodiquement à d'importants développements phytoplanctoniques. La Seine est, en effet, un des fleuves les plus pollués d'Europe. Les eaux de la Seine sont, entre autres éléments, enrichies d'une part en azote et phosphore provenant des déchets de l'activité domestique, industrielle et agricole, et d'autre part, en silicium dû au lessivage naturel des sols. Rejetés en Manche Orientale, ces éléments sont autant de facteurs favorisant la croissance du phytoplancton marin et l'eutrophisation du milieu proche de l'estuaire. Le but de ces campagnes était, entre autre, de déterminer les facteurs nutritifs limitant la production primaire dans le panache de la Seine.

Pour cela, des populations phytoplanctoniques naturelles ont été soumises à des conditions nutritives différentes selon la technique des bioessais. Outre le milieu marin naturel du prélèvement, quatre milieux différemment enrichis en sels nutritifs ont été utilisés pour la mise en culture au laboratoire :

0. milieu naturel (culture témoin),
1. milieu avec enrichissement complet,
2. milieu complet sans nitrate,
3. milieu complet sans phosphate,
4. milieu complet sans silice.

Des mesures journalières ont été effectuées afin de suivre l'évolution des concentrations en sels nutritifs (nitrate, phosphate et silicate) et de la biomasse (donnée par la concentration en chlorophylle a) dans les cultures.

## 2.3 Suivi des pesticides en baie de Morlaix

On soupçonne l'apport de pesticides dans l'environnement d'être un facteur de sélection des espèces phytoplanctoniques. Outre la diminution de la production chlorophyllienne que leur présence peut entraîner, il apparaît un risque de sélection d'espèces dont la prolifération est indésirable en raison de leurs effets nuisibles.

La baie de Morlaix constitue une zone estuarienne où se déversent deux rivières enrichies par les apports agricoles : la Penzé et la rivière de Morlaix. Dans le cadre d'un projet d'étude interagences mené par Gaël Durand (Pôle Analytique des Eaux), Geneviève Arzul (IFREMER) et Christiane Videau (UBO), des échantillons d'algues y ont été prélevés en différents points pour une mise en culture dans des conditions d'enrichissement en herbicides différentes. Les herbicides choisis pour les tests sont les plus couramment utilisés sur les cultures intensives : l'atrazine, le 2,4-D, la trifluraline, l'alachlore, le métolachlore et le diuron.

Les espèces phytoplanctoniques étudiées sont des espèces remarquables, en particulier par leur toxicité, le but étant de comparer leurs réponses [6].

## 2.4 Objectifs

Le but de ce travail est l'ajustement d'un modèle différentiel non linéaire de l'évolution de la biomasse et des sels nutritifs dans les cultures. On désire obtenir les valeurs optimales de paramètres intervenant dans la modélisation par différentes techniques d'optimisation, pour que les simulations s'approchent au mieux des mesures. On cherchera également à obtenir des intervalles de confiance.

Ces valeurs de paramètres clés intervenant dans la modélisation de croissance phytoplanctonique pourront être utilisées dans la réalisation d'un modèle de production primaire en Manche. Ce modèle, plus global, sera conçu pour décrire l'évolution du phytoplancton dans toute la Manche.

## Deuxième partie

# Facteurs nutritifs limitant la production primaire en baie de Seine

# Chapitre 1

## Le modèle mathématique

Le modèle présenté ci-dessous avait déjà été formulé avant le début du stage.

### 1.1 Premier modèle

Une première approche du problème consiste à envisager l'interaction entre la biomasse et les sels nutritifs comme étant directe : tant que la culture est riche en nutriments, les algues peuvent se reproduire avec un taux de croissance  $r$  (phase exponentielle). Les concentrations en sels diminuent en fonction de la taille de la population. Lorsqu'elles deviennent faibles, le taux de croissance tend vers 0.

$$\begin{cases} \frac{dChla}{dt} = r \min \left( \frac{N}{K_N+N}, \frac{P}{K_P+P}, \frac{S_i}{K_{S_i}+S_i} \right) Chla \\ \frac{dS}{dt} = -V_{max_S} r \min \left( \frac{N}{K_N+N}, \frac{P}{K_P+P}, \frac{S_i}{K_{S_i}+S_i} \right) Chla \end{cases}$$

où :

- $Chla$  désigne la concentration en chlorophylle a,
- $N$ ,  $P$  et  $S_i$  désignent les concentrations respectives en nitrate, phosphate et silice,
- $S$  est le symbole générique désignant la concentration en un sel,
- $r$  est le *taux de croissance*,
- $K_S$  est la *constante de Michaelis* associée au sel  $S$ ,
- $V_{max_S}$  est la *vitesse maximale d'assimilation* du sel  $S$  par les algues.

Ce modèle présente un terme dépendant des concentrations en sels nutritifs qui traduit le fait que le sel le plus limitant stoppe l'évolution des algues.

Trop simpliste, ce modèle n'est pas adapté car il ne tient pas compte du fait que les algues ne consomment pas directement les sels nutritifs dans la culture mais puisent dans des réserves intracellulaires qu'elles approvisionnent par ponction dans le milieu environnant. Ainsi, la croissance du phytoplancton ne dépend pas directement de la concentration du milieu en tel ou tel élément mais de la concentration interne des cellules. Ces réserves, appelées quotas, effectuent une sorte d'effet tampon qui explique l'évolution des concentrations en éléments nutritifs. Ils sont limités par un minimum vital et un maximum liés à la physiologie de l'algue. Malheureusement, aucune mesure de ces quotas n'a été effectuée. On ne pourra donc en tenir compte pour l'ajustement du modèle.

## 1.2 Second modèle

On introduit ainsi trois nouvelles variables d'état : les quotas en chaque sel nutritif.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dChla}{dt} = \left( \overbrace{r \min \left( \frac{\frac{q_N - q_{min_N}}{q_N}}{\frac{q_{max_N} - q_{min_N}}{q_{max_N}}}, \frac{\frac{q_P - q_{min_P}}{q_P}}{\frac{q_{max_P} - q_{min_P}}{q_{max_P}}}, \frac{\frac{q_{Si} - q_{min_{Si}}}{q_{Si}}}{\frac{q_{max_{Si}} - q_{min_{Si}}}{q_{max_{Si}}}} \right)}^{\text{terme limitant quand les quotas s'épuisent}} - m \right) Chla \\ \frac{dS}{dt} = -V_{max_S} \frac{S}{K_S + S} (q_S < q_{max_S}) Chla \\ \frac{dq_S}{dt} = \underbrace{V_{max_S} \frac{S}{K_S + S} (q_S < q_{max_S})}_{\text{consommation dans le milieu}} - r \min \left( \frac{\frac{q_N - q_{min_N}}{q_N}}{\frac{q_{max_N} - q_{min_N}}{q_{max_N}}}, \frac{\frac{q_P - q_{min_P}}{q_P}}{\frac{q_{max_P} - q_{min_P}}{q_{max_P}}}, \frac{\frac{q_{Si} - q_{min_{Si}}}{q_{Si}}}{\frac{q_{max_{Si}} - q_{min_{Si}}}{q_{max_{Si}}}} \right) q_S \end{array} \right.$$

où :

- $m$  désigne le *taux de mortalité* des algues,
- $q_{min_S}$  est le quota minimal en sel  $S$ ,
- $q_{max_S}$  est le quota maximal en sel  $S$ ,
- $(q_S < q_{max_S})$  vaut 1 si le quota est inférieur à sa valeur maximale, 0 sinon.

Ce terme exprime le fait que la consommation des sels dans le milieu n'a lieu que si les quotas ne sont pas à leur maximum.

## 1.3 Pré-estimation des paramètres

Certains paramètres du modèle peuvent faire l'objet d'une pré-estimation grâce aux mesures, dans le but d'avoir un ordre de grandeur de la valeur optimale recherchée dans l'ajustement du modèle.

Les taux de croissance  $r$  et de mortalité  $m$  caractérisent un comportement de type exponentiel de la variable  $Chla$  en début de culture (phase exponentielle) et fin de culture. En effet, en début de culture, les quotas en sels nutritifs sont supposés être maximaux ce qui permet l'approximation :

$$\frac{\frac{q_S - q_{min_S}}{q_S}}{\frac{q_{max_S} - q_{min_S}}{q_{max_S}}} \simeq 1$$

d'où :

$$\frac{dChla}{dt} = (r - m) Chla \quad \rightsquigarrow \quad Chla = A e^{(r-m)t}$$

Une régression linéaire sur les premières mesures permet de déterminer  $r - m$ .

En fin de culture, le quota du sel limitant devient proche du quota minimal ; le terme limitant s'annule :

$$\frac{dChla}{dt} = -m Chla \quad \rightsquigarrow \quad Chla = A e^{-mt}$$

On évalue  $m$  grâce aux dernières mesures, d'où on déduit  $r$ .

**Exemple.** Un exemple de détermination de  $r$  et  $m$  sous Excel est donné à la figure 1.1.

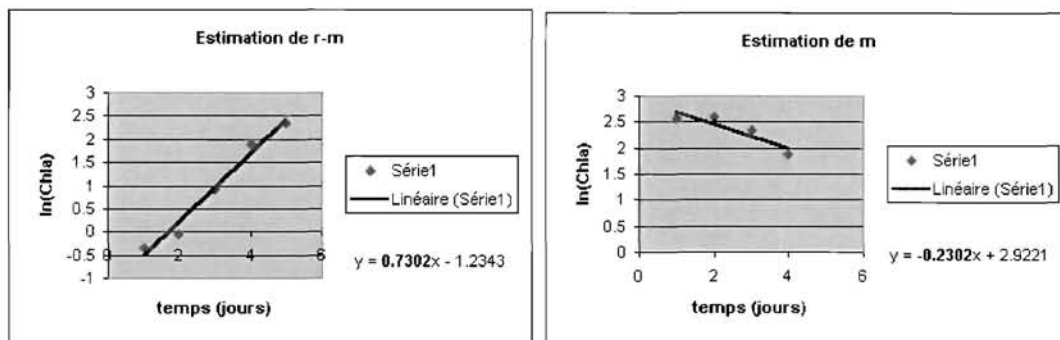


FIG. 1.1 – Estimation des taux de croissance et de mortalité sous Excel.

On peut considérer que durant la phase de croissance, jusqu'au pic de chlorophylle, les quotas en sel non limitant sont à leur maximum. La disparition des sels correspond à la naissance de nouvelles cellules qui remplissent leur quota au maximum. Ainsi, la consommation par algue produite durant cette phase de croissance correspond au quota maximal. On estime les valeurs des quotas maximaux pour les sels non limitant dans la culture par le rapport entre la quantité totale d'algues produites durant la phase de croissance et la quantité totale de sel consommé :

$$q_{maxS} = \frac{S_0 - S_{final}}{Chla_{max} - Chla_0}$$

On émet l'hypothèse qu'il existe un rapport constant entre les valeurs maximale et minimale des quotas ce qui permet de déduire les  $q_{minS}$ .



# Chapitre 2

## L'ajustement du modèle

Le but de cette manœuvre est d'ajuster les paramètres régissant le modèle (taux de croissance, taux de mortalité, constantes de Michaelis,...) de manière à ce que les solutions s'apparentent au mieux aux mesures réelles. Cela revient à minimiser "l'écart" entre modèle et mesures. Nous utiliserons l'écart quadratique entre les variables solutions et les mesures associées (méthode des "moindres carrés"), qui sera pondéré par la moyenne des mesures de manière à ce que la contribution des variables de valeurs faibles ne soit pas négligée. Il s'agit alors de minimiser cette fonction dépendant des paramètres du modèle pour en obtenir les valeurs optimales. Notant  $E(p)$  la fonction écart considérée (où  $p \in \mathbb{R}^n$  représente les paramètres du modèle), le problème s'écrit :

$$\min_{p \in \mathbb{R}^n} E(p).$$

La fonction  $E$  sera estimée par intégration numérique des équations grâce à la méthode de Runge et Kutta (à pas fixe ou adaptatif), et calcul de la différence aux mesures.

Deux techniques d'optimisation ont été envisagées : une méthode de descente, la méthode de Newton, et une méthode d'exploration directe, la méthode du simplex.

### 2.1 La méthode de Newton-Marquardt

#### 2.1.1 L'algorithme de Newton

On supposera ici que  $E$  est deux fois différentiable sur  $\mathbb{R}^n$ .

Le principe de la méthode de Newton est de minimiser successivement les approximations au second ordre de la fonction  $E$  [1].

**Algorithme.** (*Algorithme de Newton*)

– soit  $p^0 \in \mathbb{R}^n$ , par un développement de Taylor au second ordre au voisinage de  $p^0$ , on obtient :

$$E^0(p) = E(p^0) + \nabla E(p^0) (p - p^0) + \frac{1}{2} (p - p^0)^T E''(p^0) (p - p^0).$$

On minimise la fonction quadratique  $E^0(p)$  ce qui donne un vecteur  $p^1$ , solution du système linéaire :

$$E''(p^0) p^1 = E''(p^0) p^0 - \nabla E(p^0)$$

soit

$$p^1 = p^0 - E''(p^0)^{-1} \nabla E(p^0).$$

- à la  $k^{\text{ième}}$  itération, on construit  $E^k$ , approximation quadratique de  $E$  au voisinage de  $p^k$ , que l'on minimise pour obtenir  $p^{k+1}$  défini par :

$$p^{k+1} = p^k - E''(p^k)^{-1} \nabla E(p^k)$$

### 2.1.2 Mise en œuvre

L'implémentation de cet algorithme a été effectuée par Alain Ménesguen grâce au logiciel Mathcad qui offre un langage de programmation suffisant ainsi que des outils graphiques et de calcul formel et numérique puissants.

Les dérivées partielles par rapport aux paramètres ont été estimées par différence finie :

$$\frac{\partial f}{\partial p_i}(p) = \frac{f(p_1, \dots, p_i + h_i, \dots, p_n) - f(p)}{h_i}$$

avec  $h_i$  suffisamment petit.

Le gradient et la matrice hessienne de  $E$  sont calculés avec l'approximation de Marquardt qui s'applique aux fonctions quadratiques. On a :

$$E(p) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (y_i - f_p(x_i))^2$$

où  $y_i$  représente les mesures et  $f_p(x_i)$  la solution du modèle.

Par suite

$$\nabla E(p) = - \sum_{i=1}^n \nabla_p f_p(x_i) (y_i - f_p(x_i)) \quad (2.1)$$

et

$$E''(p) = - \sum_{i=1}^n f''_p(x_i) (y_i - f_p(x_i)) + \sum_{i=1}^n \nabla_p f_p(x_i) \cdot \nabla_p f_p(x_i)^T$$

L'approximation de Marquardt consiste à négliger le premier terme que l'on désire être très petit. Alors :

$$E''(p) \simeq \sum_{i=1}^n \nabla_p f_p(x_i) \cdot \nabla_p f_p(x_i)^T$$

Le calcul du gradient des solutions du modèle par rapport aux paramètres permet donc d'estimer la dérivée seconde de  $E$ , ainsi que le gradient de  $E$  d'après la formule 2.1, l'inversion de la hessienne étant réalisée par une fonction de Mathcad.

Les équations différentielles non linéaires ont été intégrées numériquement par la méthode de Runge et Kutta grâce à une fonction offerte par Mathcad. La possibilité de choisir entre une méthode à pas constant et à pas adaptatif existe. Nous avons opté pour un pas constant assez faible, de manière à ne pas augmenter les temps de calcul, ceux-ci s'élevant déjà à environ trois heures.

Pour déterminer des intervalles de confiance, on estime la matrice de covariance des paramètres en partant de l'information de Fisher [10]:

$$I(p) = \frac{1}{s^2} (Z^T Z)$$

avec  $Z = (Z_{i,j})$  où  $Z_{i,j}$  est la dérivée partielle de la  $i^{\text{ème}}$  observation par rapport au  $j^{\text{ème}}$  paramètre:

$$Z_{i,j} = \frac{\partial f_p(x_i)}{\partial p_j}$$

et  $s^2$  est l'écart quadratique moyen.

La matrice de covariance asymptotique des paramètres étant, d'après le théorème central limite, l'inverse de l'information de Fisher, on a:

$$\text{cov}(p) = (Z^T Z)^{-1} s^2$$

On obtient ainsi l'écart-type  $\sigma_i$  de chaque paramètre ce qui permet de déduire un intervalle de confiance à 95% (ie au niveau 1-0,05) pour le paramètre  $p_i$ :

$$[p_i - qt_{0,975}(n)\sigma_i, p_i + qt_{0,975}(n)\sigma_i]$$

où  $qt_{0,975}(n)$  est le quantile d'ordre 0,975 associé à la loi de Student à  $n$  degrés de liberté (c'est-à-dire  $F^{-1}(0,975)$  si  $F$  est la fonction de répartition de la loi de Student à  $n$  degrés de liberté). Le nombre de degrés de liberté pour notre système est ici égal au nombre de mesures moins le nombre de paramètres.

## 2.2 La méthode du simplex de Nelder et Mead

### 2.2.1 La méthode du simplex

Dans la méthode du simplex [2], on calcule les valeurs prises par la fonction  $E$  en  $n+1$  points mutuellement équidistants dans l'espace des  $n$  paramètres; on dit que ces points constituent les sommets d'un simplex régulier. Un simplex régulier à deux dimensions est un triangle équilatéral, et à trois dimensions, un tétraèdre régulier.

On commence par mettre en place un simplex régulier dans l'espace des  $n$  paramètres et on calcule la valeur prise par la fonction en chaque sommet. On itère ensuite en appliquant les règles suivantes:

- (i) Déterminer le sommet en lequel la fonction  $E$  prend la valeur la plus forte et trouver le symétrique de ce point par rapport au centre de gravité des autres sommets. On forme ainsi un nouveau simplex.
- (ii) Calculer la valeur de la fonction en ce nouveau sommet et revenir à l'étape (i).

Au cas où ce nouveau sommet donnerait à  $E$  sa plus forte valeur dans le nouveau simplex, c'est sur lui que se ferait la symétrie suivante et la procédure bouclerait sans progresser. Pour éviter cette situation, on introduit la règle supplémentaire:

- (iii) Si le sommet choisi en (i) est celui qui a été introduit en dernier dans le simplex, effectuer la symétrie sur le sommet donnant la deuxième plus grande valeur à la fonction.

**Exemple.** Un exemple d'exécution dans le cas d'une fonction de deux variables est représenté à la figure 2.1.

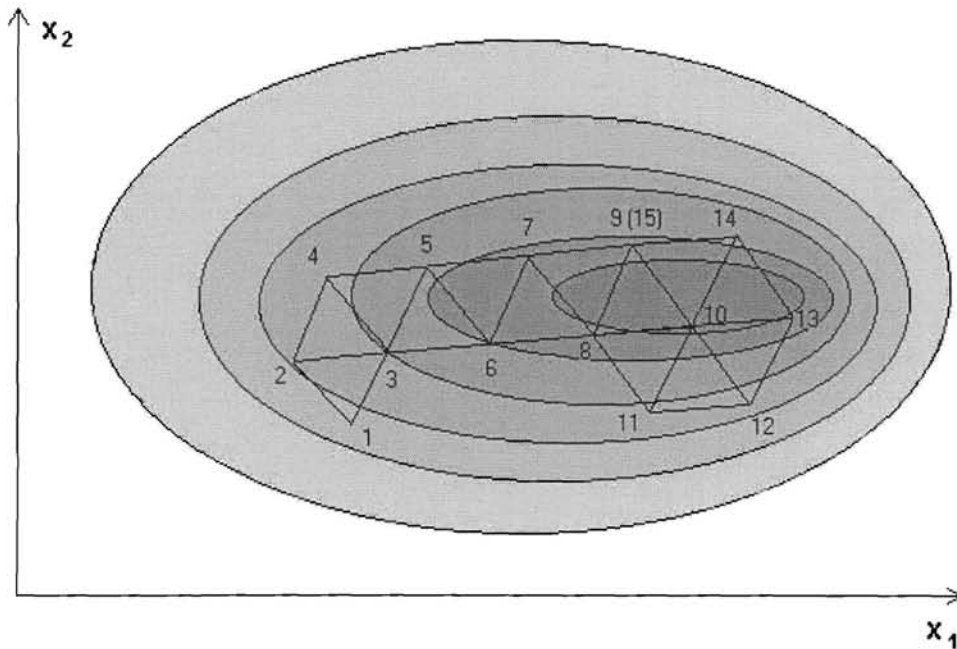


FIG. 2.1 – Exemple d'exécution de la méthode du simplex dans le cas d'une fonction de deux variables. Les numéros correspondent à l'ordre d'apparition des sommets.

- (iv) Si un sommet du simplex n'est pas modifié au cours de  $M$  itérations successives, réduire la taille du simplex en diminuant de moitié les distances qui le séparent des autres sommets, puis revenir en (i).  
 $M$  est à fixer en fonction de  $n$ .

### 2.2.2 L'amélioration de Nelder et Mead

Cette version permet une plus grande souplesse dans l'évolution de la taille du simplex. Elle pourra se réduire pour progresser à l'intérieur d'un couloir étroit, mais aussi s'accroître ensuite pour progresser plus rapidement. Nous abandonnerons l'idée de conserver la régularité du simplex.

Désignons par  $S_i$  les sommets du simplex et par  $E_i$  les valeurs correspondantes de la fonction pour  $i = 0, 1, \dots, n$ . Soit  $g, h$  et  $s$  les indices des sommets correspondants respectivement à la plus grande valeur de la fonction  $E$ , à celle qui la suit dans l'ordre décroissant et à la plus petite valeur de  $E$ . Soit  $G$  le centre de gravité de l'ensemble des sommets privé de  $S_g$ .

**Algorithme.** (*Algorithme du simplexe de Nelder et Mead*)

1. Au départ,  $S_g$  se réfléchit par rapport à  $G$  pour donner un nouveau sommet  $R$  tel que :

$$R = (1 + \alpha)G - \alpha S_g$$

où  $\alpha$  est appelé coefficient de réflexion.

2. Si  $E_s \leq E_R < E_h$ , alors  $R$  remplace  $S_g$  et le processus se poursuit.  
Si  $E_R < E_s$ , ie si la réflexion engendre un nouveau minimum, il est intéressant de rechercher si un nouveau pas dans cette direction serait avantageux. On effectue alors une expansion en calculant un nouveau point  $X$  prolongeant la ligne  $S_gGR$  tel que :

$$X = \gamma R + (1 - \gamma)G$$

où  $\gamma$  est le coefficient d'expansion. Si la nouvelle valeur  $E_X$  est plus petite que  $E_R$ , l'expansion est avantageuse et  $X$  remplace  $S_g$ . Sinon,  $R$  remplace  $S_g$ .

Si  $E_h \leq E_R$ , on commence par remplacer  $S_g$  par  $R$  si  $E_R < E_g$ , mais pas dans le cas contraire. Puis on effectue une contraction en calculant un point  $C$  tel que :

$$C = \beta S_g + (1 - \beta)G$$

où  $\beta$  est le coefficient de contraction. Si  $E_C < E_g$ , la contraction est avantageuse et  $C$  remplace  $S_g$ . Sinon, on établit une nouvelle configuration en réduisant de moitié les distances de  $S_s$  aux autres sommets du simplexe. Puis le processus reprend.

Pour tester la convergence, on compare l'écart-type des valeurs de la fonction  $E$  aux  $n+1$  sommets du simplexe courant :

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n+1} (E_i - \bar{E})^2}{n}}$$

avec une valeur fixée à l'avance, par exemple une fraction de la valeur moyenne  $\bar{E}$  de  $E$  sur le simplexe.

## 2.3 Mise en œuvre et exemple de code

J'ai programmé cet algorithme sous Mathcad. Un exemple de code Mathcad est disponible en annexe A.

Pour initialiser le simplexe, on tire au hasard les points du simplexe dans un domaine suffisamment précis estimé autour du point optimal.

Pour les coefficients opératoires, les valeurs utilisées sont :

$$\alpha = 1, \quad \beta = \frac{1}{2} \quad \text{et} \quad \gamma = 2$$

## 2.4 Modification du modèle

Les premiers résultats obtenus par ajustement grâce aux méthodes précédentes montrent clairement que notre modèle est trop simpliste pour décrire parfaitement l'évolution des algues et des sels nutritifs dans la culture. Un exemple de résultat peu satisfaisant est présenté à la figure 2.3.

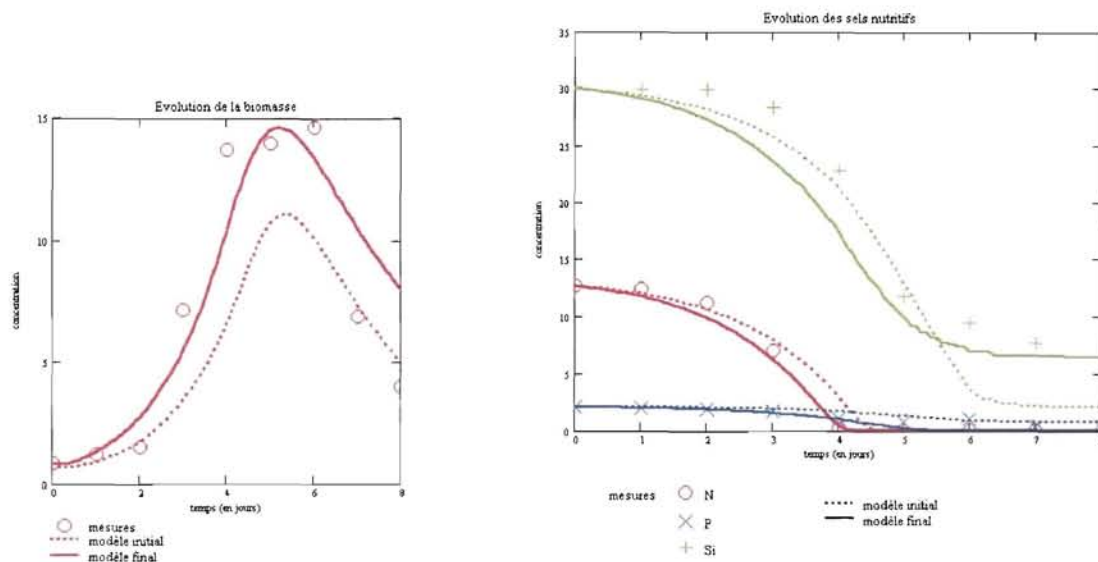


FIG. 2.2 – Evolution de la biomasse et des sels nutritifs dans un milieu enrichi en silice.

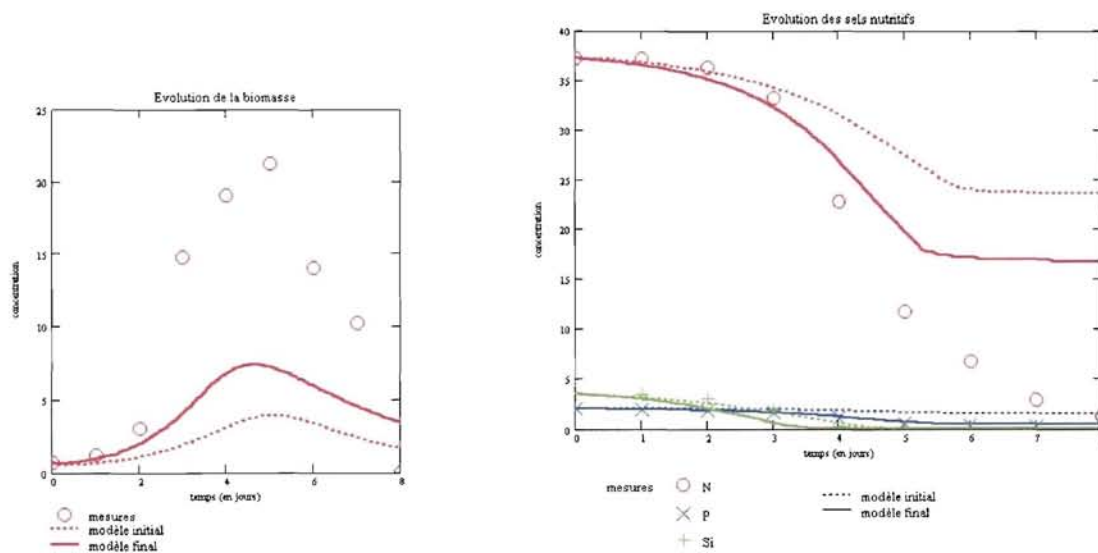


FIG. 2.3 – Evolution de la biomasse et des sels nutritifs dans un milieu limité en silice.

On constate que, si l'ajustement du modèle s'effectue correctement pour un milieu riche en silice, le modèle n'est pas capable de reproduire ce qui se passe dans un milieu limité par la silice. Ceci s'explique par le fait que la population d'algues mises en culture n'est pas

homogène. Constituée, en majorité, d'algues diatomées, elle contient également en plus faible quantité des algues non siliceuses (flagellés, chlorophycées). Une fois les réserves en silice épuisées, les diatomées meurent par manque de nutriments indispensables, alors que ces espèces non siliceuses peuvent encore se développer. Ceci explique le pic de chlorophylle et la baisse des sels nutritifs en fin de culture dont le modèle ne rend pas compte. Nous sommes donc amenés à introduire une nouvelle variable décrivant l'évolution des algues non siliceuses, régie par une équation du même type que pour les diatomées :

$$\frac{dChla'}{dt} = \left( r' \min \left( \frac{\frac{q'_N - q'_{min_N}}{q'_N}}{\frac{q'_{max_N} - q'_{min_N}}{q'_{max_N}}}, \frac{\frac{q'_P - q'_{min_P}}{q'_P}}{\frac{q'_{max_P} - q'_{min_P}}{q'_{max_P}}} \right) - m' \right) Chla'.$$

De même, cette seconde espèce est caractérisée par des quotas en nitrate et en phosphate, régis par des équations du même type que pour les quotas des diatomées. Nous aboutissons finalement au système :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dChla}{dt} = \left( r \min \left( \frac{\frac{q_N - q_{min_N}}{q_N}}{\frac{q_{max_N} - q_{min_N}}{q_{max_N}}}, \frac{\frac{q_P - q_{min_P}}{q_P}}{\frac{q_{max_P} - q_{min_P}}{q_{max_P}}}, \frac{\frac{q_{Si} - q_{min_{Si}}}{q_{Si}}}{\frac{q_{max_{Si}} - q_{min_{Si}}}{q_{max_{Si}}}} \right) - m \right) Chla \\ \frac{dChla'}{dt} = \left( r' \min \left( \frac{\frac{q'_N - q'_{min_N}}{q'_N}}{\frac{q'_{max_N} - q'_{min_N}}{q'_{max_N}}}, \frac{\frac{q'_P - q'_{min_P}}{q'_P}}{\frac{q'_{max_P} - q'_{min_P}}{q'_{max_P}}} \right) - m' \right) Chla' \\ \frac{dS}{dt} = -V_{max_S} \frac{S}{K_S + S} (q_S < q_{max_S}) Chla - V'_{max_S} \frac{S}{K'_S + S} (q'_S < q'_{max_S}) Chla' \quad \text{pour N et P} \\ \frac{dS_i}{dt} = -V_{max_{S_i}} \frac{S_i}{K_{S_i} + S_i} (q_{S_i} < q_{max_{S_i}}) Chla \\ \frac{dq_S}{dt} = V_{max_S} \frac{S}{K_S + S} (q_S < q_{max_S}) - r \min \left( \frac{\frac{q_N - q_{min_N}}{q_N}}{\frac{q_{max_N} - q_{min_N}}{q_{max_N}}}, \frac{\frac{q_P - q_{min_P}}{q_P}}{\frac{q_{max_P} - q_{min_P}}{q_{max_P}}}, \frac{\frac{q_{Si} - q_{min_{Si}}}{q_{Si}}}{\frac{q_{max_{Si}} - q_{min_{Si}}}{q_{max_{Si}}}} \right) q_S \\ \frac{dq'_S}{dt} = V'_{max_S} \frac{S}{K'_S + S} (q'_S < q'_{max_S}) - r' \min \left( \frac{\frac{q'_N - q'_{min_N}}{q'_N}}{\frac{q'_{max_N} - q'_{min_N}}{q'_{max_N}}}, \frac{\frac{q'_P - q'_{min_P}}{q'_P}}{\frac{q'_{max_P} - q'_{min_P}}{q'_{max_P}}} \right) q'_S \end{array} \right.$$

On introduit ainsi 8 nouveaux paramètres ; notre modèle présente désormais 19 paramètres et 10 variables d'état.

# Chapitre 3

## Les résultats obtenus

Nous présentons ici le type de résultats que nous avons pu obtenir avec des temps de calcul de l'ordre d'une vingtaine d'heures. L'optimisation par la méthode du simplex a été opérée sur le modèle à 10 variables appliqué simultanément, avec les mêmes valeurs pour les 19 paramètres, aux cinq ballons de culture constituant un bioessai.

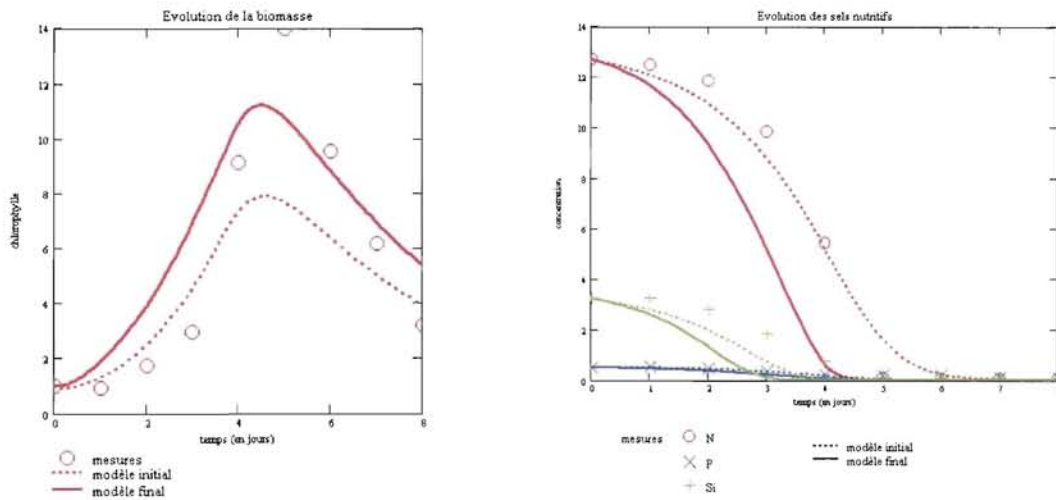


FIG. 3.1 – Evolution de la biomasse et des sels nutritifs dans le milieu 0 (témoin).

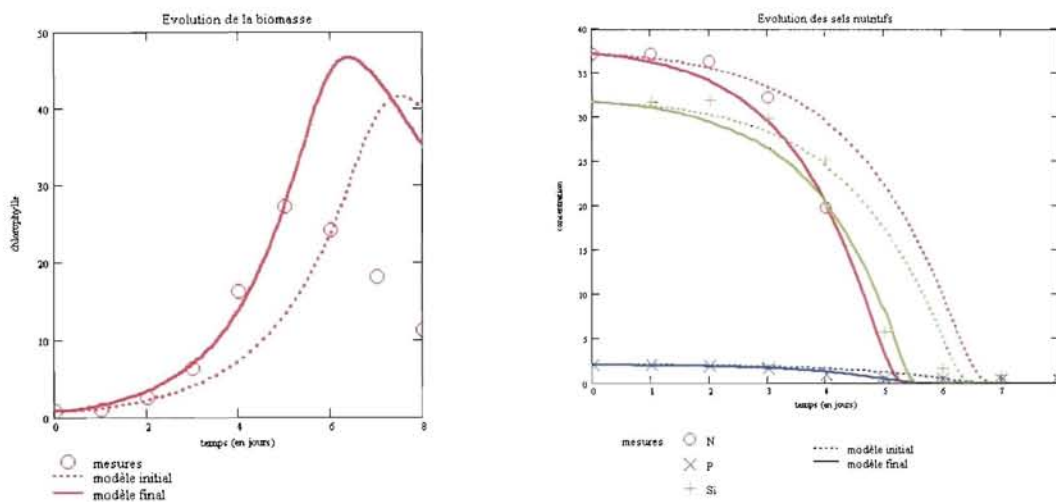


FIG. 3.2 – Evolution de la biomasse et des sels nutritifs dans le milieu 1 (complet).



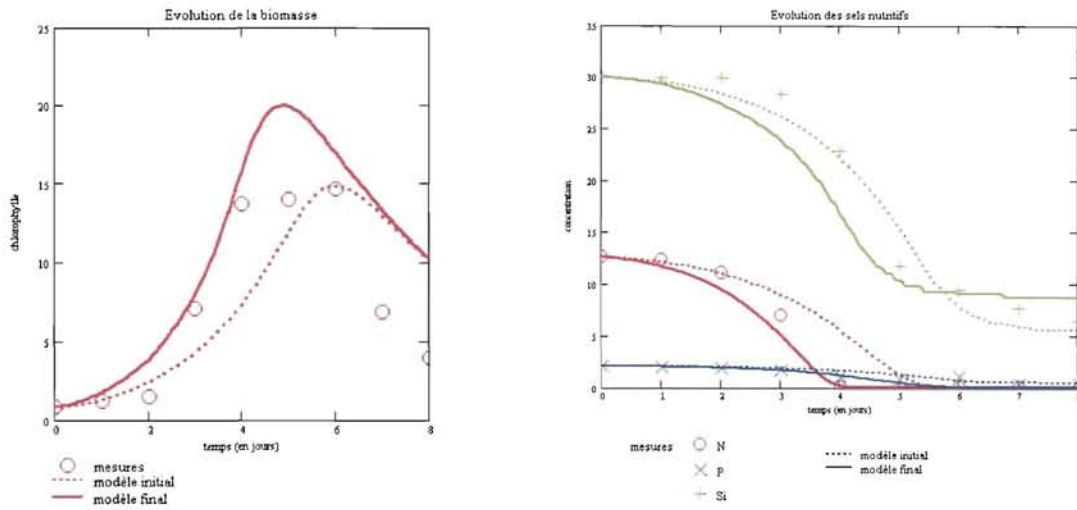


FIG. 3.3 – Evolution de la biomasse et des sels nutritifs dans le milieu 2 (sans Nitrate).

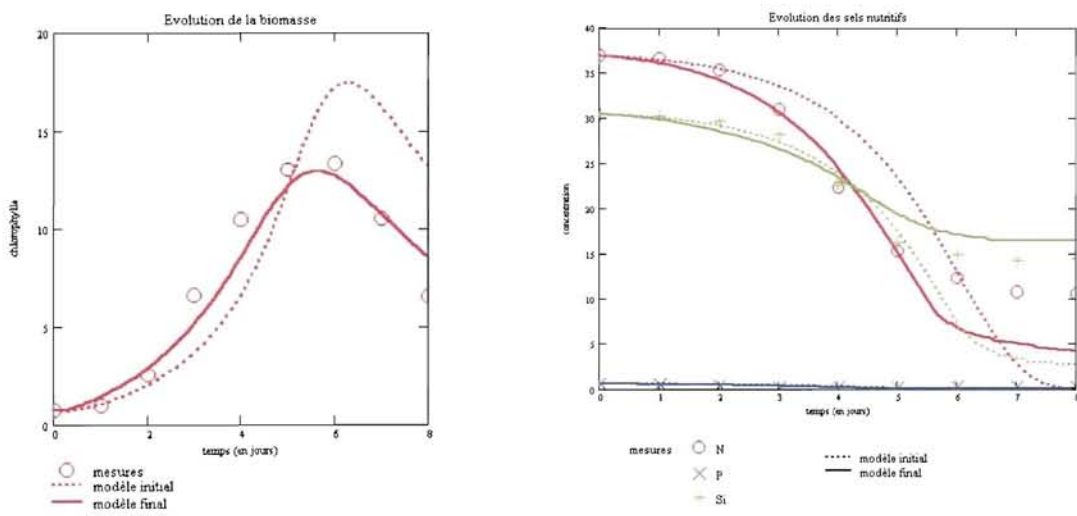


FIG. 3.4 – Evolution de la biomasse et des sels nutritifs dans le milieu 3 (sans phosphate).

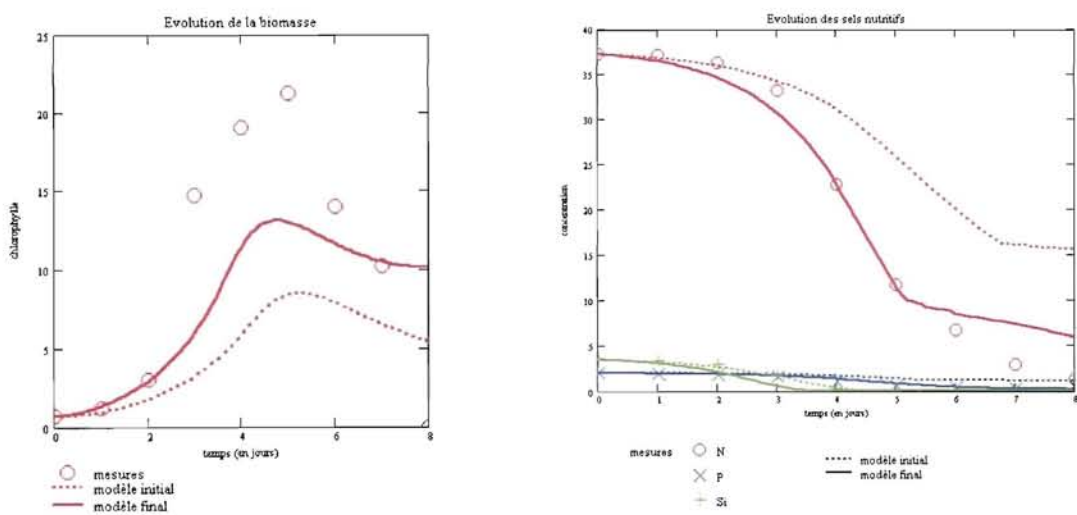


FIG. 3.5 – Evolution de la biomasse et des sels nutritifs dans le milieu 4 (sans silice).

Les paramètres trouvés lors de l'ajustement sont les suivants :

r	1.536
VmaxN	1.048
VmaxP	0.05
VmaxSi	0.855
Kn	1.96
Kp	0.231
Ksi	1.196
QminN	0.317
QminSi	0.021
QminP	0.136
m	0.271
r'	0.761
VmaxN'	0.542
VmaxP'	0.037
Kn'	3.024
Kp'	0.216
QminN'	0.318
QminP'	0.018
m'	0.193
E	2.61

On constate que l'ajustement ne se fait pas très bien de manière globale. Le modèle reproduit correctement ce qui se passe dans certains bioessais mais l'algorithme ne parvient pas à ajuster toutes les courbes en même temps.

Il se peut que l'algorithme s'avère incapable de trouver le minimum global ; il ne fait qu'exhiber un minimum local dans l'espace des paramètres (qui est de dimension 19!). La non-linéarité du système rend la dépendance de l'écart quadratique par rapport aux paramètres très complexe et la pré-estimation de certains paramètres n'est certainement pas assez précise pour restreindre suffisamment le domaine de recherche autour du minimum.

Par ailleurs, notre modèle, bien qu'assez complexe, n'est sans doute pas adapté pour reproduire tous les phénomènes intervenant dans les bioessais. Les résultats semblent montrer une certaine hétérogénéité dans le comportement dans les différents milieux. Il est inévitable que les populations d'algues qui se développent dans les différentes cultures ne soient pas composées exactement des mêmes espèces dans les mêmes proportions.

Enfin, l'algorithme parvient parfois à ajuster très correctement les courbes décrivant l'évolution des sels nutritifs mais pas celle décrivant la production primaire (figure 3.5) : la consommation en sels décrite par le modèle correspond à la réalité mais elle ne suffit pas à expliquer la production d'algues constatée dans les mesures. Cela nous amène à penser qu'un autre phénomène, non pris en compte par le modèle, intervient dans les cultures.

Les figures 3.6 à 3.8 donnent l'évolution simulée des quotas, sans possibilité de validation puisqu'aucune mesure n'avait été faite.

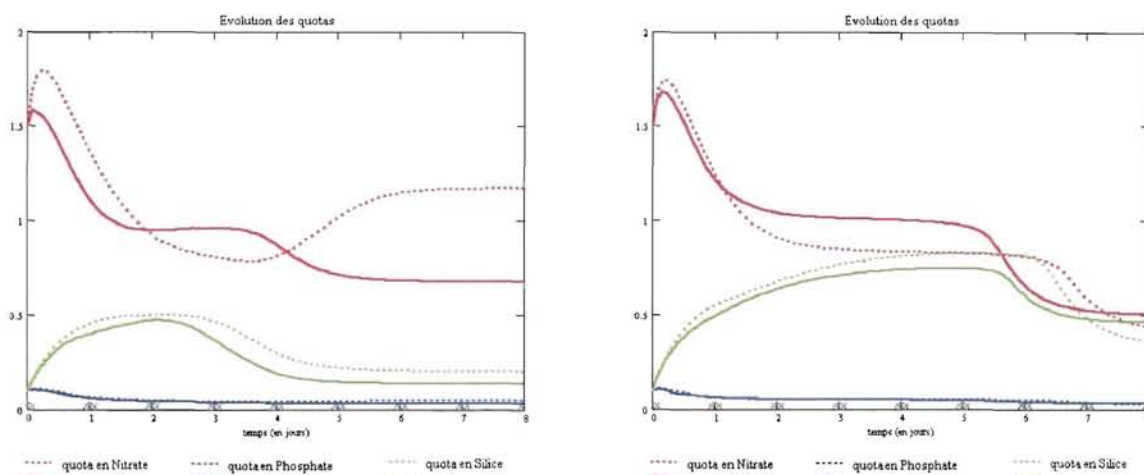


FIG. 3.6 – Evolution des quotas dans les milieux 0 et 1.

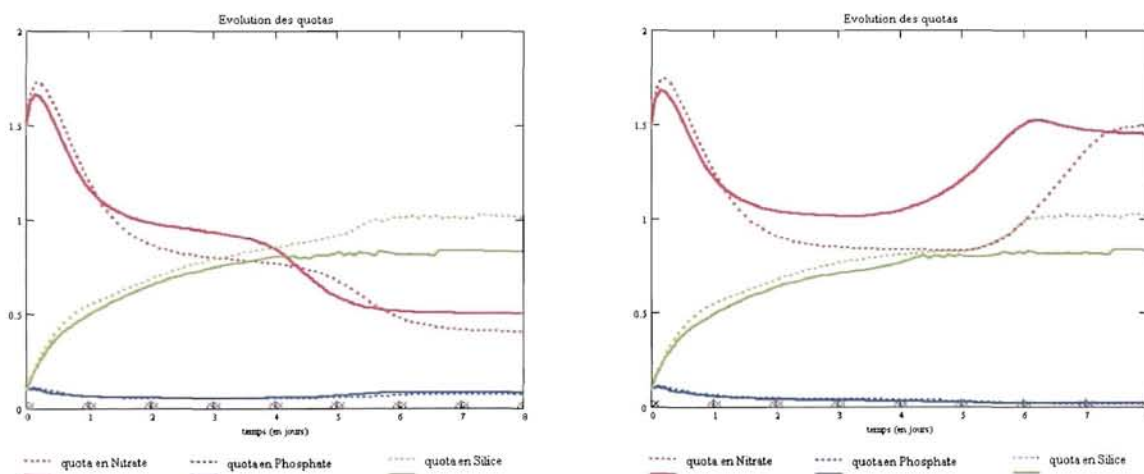


FIG. 3.7 – Evolution des quotas dans les milieux 2 et 3.

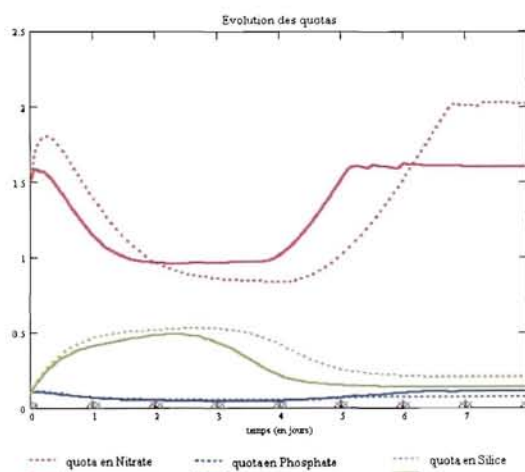


FIG. 3.8 – Evolution des quotas dans le milieu 4.

## Troisième partie

# Effet des herbicides sur le développement des microalgues marines

# Chapitre 1

## Le modèle logistique

On ne modélise ici que l'évolution de la biomasse dans la culture, le but étant de déterminer l'effet des différents herbicides et de leur concentration sur la croissance des algues. On s'intéresse donc à l'influence de la teneur initiale de la culture en pesticides sur les paramètres intervenant dans le modèle.

On constate que la population de phytoplancton connaît, en début de culture, une croissance de type exponentiel puis se stabilise en fin de culture. Cette évolution est parfaitement reproduite par le modèle logistique. L'équation différentielle est :

$$\frac{dChla}{dt} = r Chla \left( 1 - \frac{Chla}{K} \right)$$

qui peut être intégrée :

$$Chla = Chla_0 \exp(rt) \left( \frac{K}{K - Chla_0 + Chla_0 \exp(rt)} \right)$$

où :

- $Chla_0$  est la valeur initiale de la concentration en chlorophylle,
- $r$  est le *taux de croissance*,
- $K$  est la *capacité limite du milieu*.

Ces trois paramètres peuvent être estimés pour l'ajustement du modèle.

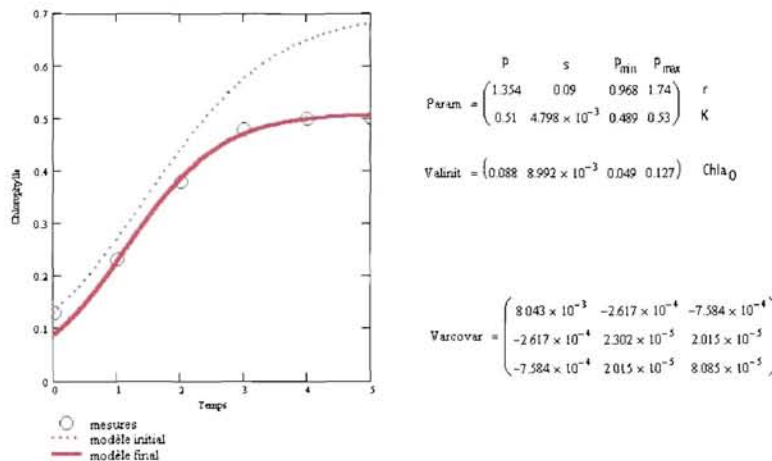


FIG. 1.1 – Exemple d'ajustement de courbe logistique. Valeurs optimales ( $p$ ), écarts-type ( $s$ ) et intervalles de confiance à 95% ( $[p_{min}, p_{max}]$ ) des paramètres. Matrice de covariance.

# Chapitre 2

## Les résultats

Nous présentons ici le type de résultats que nous avons pu obtenir par optimisation avec la méthode de Newton. Le modèle étant très simple, les temps de calcul sont assez courts : de l'ordre de quelques dizaines de minutes pour un jeu complet de mesures.

Les résultats présentés concernent l'influence de plusieurs herbicides sur la croissance de l'espèce *Chaetoceros gracile* dans des conditions nutritives différentes.

Les différents milieux étudiés sont :

- milieu minimal : milieu pauvre en sels nutritifs simulant une situation estivale.

Eléments	$NO_3$	$PO_4$	Métaux	Vitamines
Doses	0,8 $\mu M$	0,23 $\mu M$	f/2	f/2

FIG. 2.1 – *Composition nutritive des cultures utilisées : milieu pauvre.*

- milieu maximal : milieu riche, concentrations mesurées dans les eaux de la Penzé.

Eléments	$NO_3$	$PO_4$	Métaux	Vitamines
Doses	23 $\mu M$	0,4 $\mu M$	f/2	f/2

FIG. 2.2 – *Composition nutritive des cultures utilisées : milieu riche.*

- milieu optimal : milieu le plus favorable à la croissance des algues.

Eléments	$NO_3$	$PO_4$	Métaux	Vitamines
Doses	880 $\mu M$	36 $\mu M$	f/2	f/2

FIG. 2.3 – *Composition nutritive des cultures utilisées : milieu optimal.*

NB : f/2 correspond à des valeurs d'enrichissement type en métaux et vitamines.

## 2.1 Effet des herbicides sur les paramètres

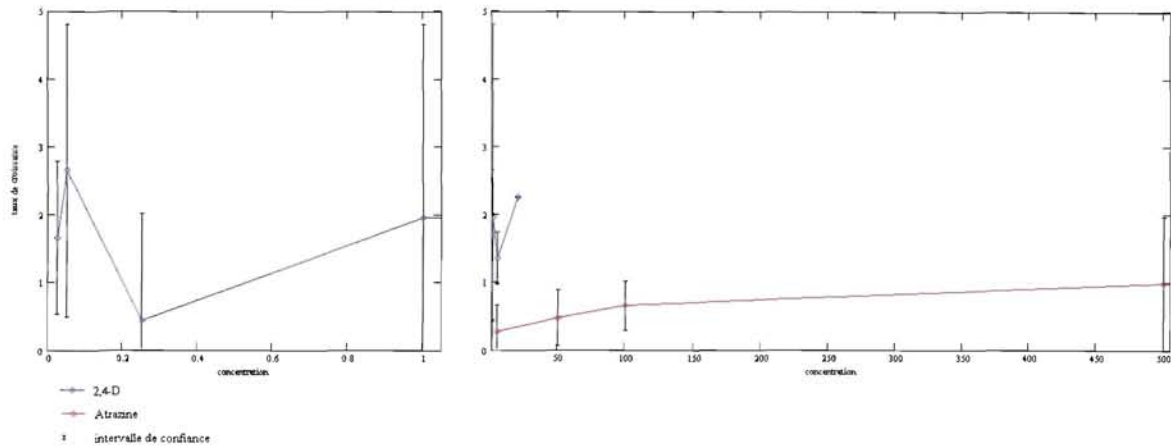


FIG. 2.4 – *Milieu minimal*. Evolution de  $r$  en fonction de la concentration en herbicide (en  $\mu\text{g.L}^{-1}$ ).

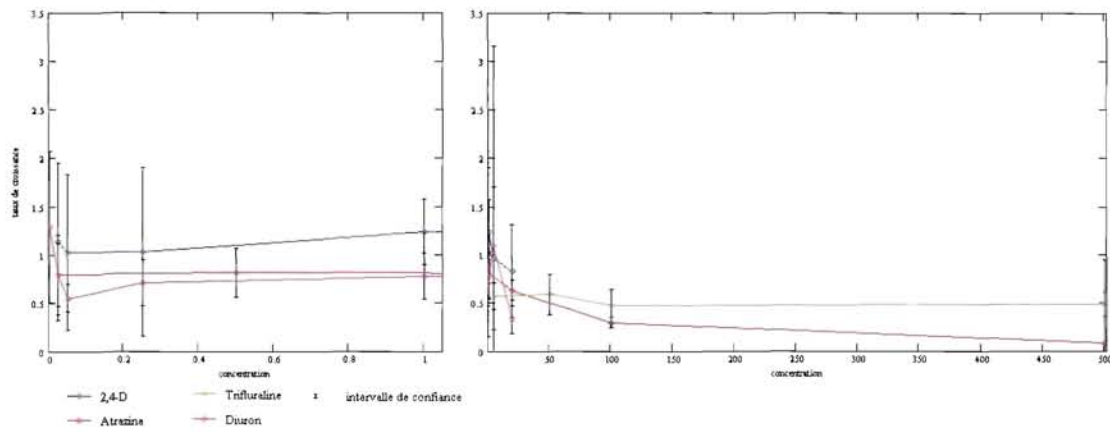


FIG. 2.5 – *Milieu maximal*. Evolution de  $r$  en fonction de la concentration en herbicide (en  $\mu\text{g.L}^{-1}$ ).

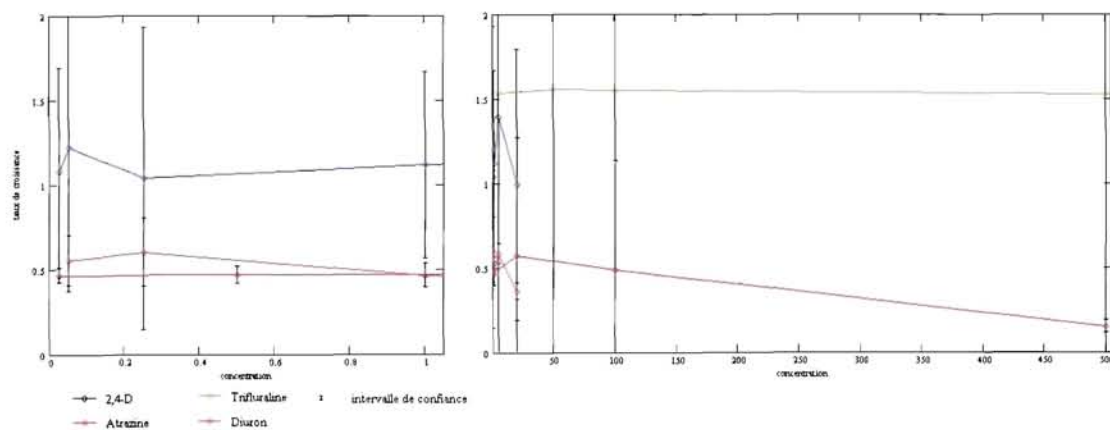


FIG. 2.6 – *Milieu optimal*. Evolution de  $r$  en fonction de la concentration en herbicide (en  $\mu\text{g.L}^{-1}$ ).

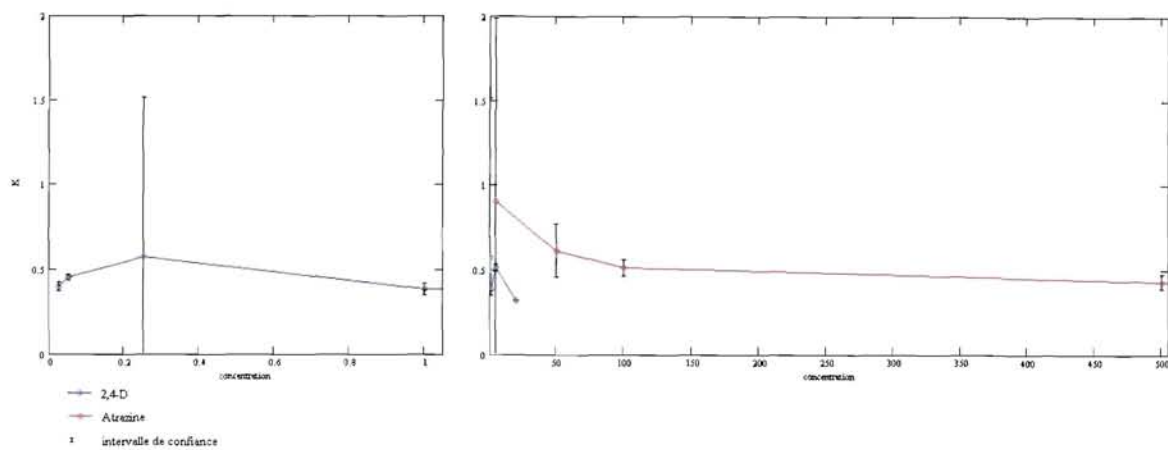


FIG. 2.7 – Milieu minimal. Evolution de  $K$  en fonction de la concentration en herbicide (en  $\mu\text{g.L}^{-1}$ ).

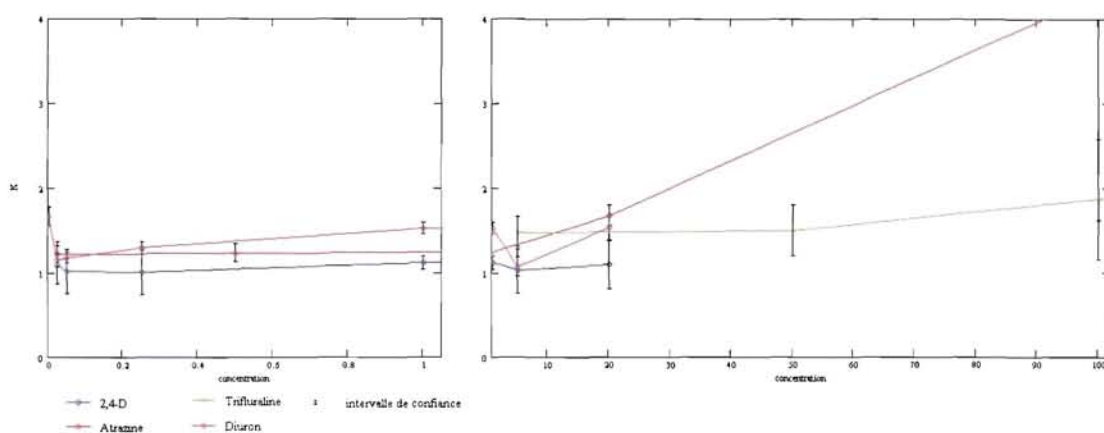


FIG. 2.8 – Milieu maximal. Evolution de  $K$  en fonction de la concentration en herbicide (en  $\mu\text{g.L}^{-1}$ ).

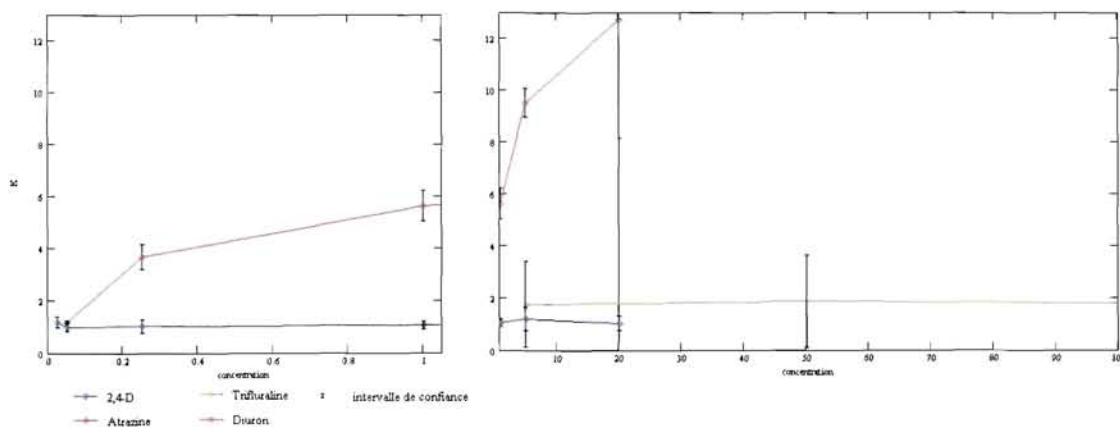


FIG. 2.9 – Milieu optimal. Evolution de  $K$  en fonction de la concentration en herbicide (en  $\mu\text{g.L}^{-1}$ ).



## 2.2 Interprétation

L'interprétation des résultats nécessite de considérer le mode d'action des différents herbicides. Certains sont des inhibiteurs de la croissance :

- la trifluraline bloque la division cellulaire,
- le 2,4-D, une hormone de synthèse, agit au niveau cellulaire sur l'activité de la RNase.

D'autres sont des inhibiteurs de la photosynthèse :

- l'atrazine inhibe le transfert d'électrons et par conséquent la photosynthèse, et peut modifier la concentration chlorophyllienne cellulaire,
- le diuron agit, comme l'atrazine, au niveau de la photosynthèse.

On constate que les herbicides ont tendance à faire baisser le taux de croissance lorsqu'ils sont présents à des concentrations assez élevées. L'atrazine est celui qui a l'effet le plus notable sur l'espèce considérée : le taux de croissance est diminué de manière importante dans tous les milieux. Le 2,4-D, le diuron et la trifluraline affectent également la croissance des algues dans une moindre mesure.

Les effets des herbicides sur le paramètre  $K$  ne sont pas notables même si on peut constater une augmentation dans certains cas. L'atrazine semble réduire le pic de chlorophylle en milieu minimum pour des concentrations élevées.

Compte tenu de la taille de certains intervalles de confiance, ces résultats sont à juger avec discernement.

# Conclusion

Ce stage aura été pour moi une première découverte de ce qu'est la recherche appliquée, en profitant de la qualité de l'environnement qu'offre un organisme tel que l'IFREMER. J'ai été confronté à des problèmes complexes concrets dont on ne peut espérer une résolution parfaite en peu de temps, mais pour lesquels il faut faire preuve de persévérance et d'intuition. Ce stage m'aura également permis de découvrir un domaine des mathématiques appliquées : l'optimisation est une tâche délicate pour laquelle il n'existe pas de méthode universelle et qui nécessite une adaptation aux particularités du problème envisagé.

L'essentiel du travail prévu a été traité, mais le temps a manqué pour tirer profit au maximum de ce travail. Il aurait, en effet, été intéressant de tester la sensibilité du problème aux données afin de déterminer la manière optimale d'effectuer les mesures en vue d'une modélisation ultérieure : Sur quelle variable d'état faire porter l'effort de mesure ? Avec quelle fréquence d'échantillonnage (éventuellement variable au cours du déroulement de la culture) ? Les mesures utilisées durant ce stage n'ont pas été réalisées dans le but de calibrer un modèle complet ce qui peut expliquer la difficulté à obtenir des résultats très satisfaisants.

# Bibliographie

- [1] J.C. CULIOLI, *Introduction à l'optimisation*, Ellipses, 1994.
- [2] M.J. BOX, D. DAVIES & W.H. SWANN, *Mathématiques et statistiques pour l'industrie : Techniques d'optimisation non linéaire*, Entreprise moderne d'édition, 1971.
- [3] J.D. LEBRETON & C. MILLIER, *Modèles dynamiques déterministes en biologie*, Masson, 1982.
- [4] J. LEGRAS, *Algorithmes et programmes d'optimisation non linéaires avec contraintes. Application au contrôle optimal*, Masson, 1979.
- [5] C. VIDEAU & A. MÉNESGUEN, *Facteurs nutritifs limitant la production primaire en baie de Seine - Synthèse des résultats des campagnes Bioseine et Nutriseine (1993-1994)*, Université de Bretagne occidentale, 1995.
- [6] G. DURAND, G. ARZUL & C. VIDEAU, *Effet des herbicides détectés dans les eaux de la baie de Morlaix sur le phytoplancton marin toxique pouvant contaminer les coquillages consommables*, Projet d'étude interagences, 2000.
- [7] G. ARZUL, *Effet des herbicides sur la croissance in vitro d'*Alexandrium minutum**, Etude interagences, 1998.
- [8] G. ARZUL & G. DURAND, *An in vitro study of the role of herbicides in the selection of harmful marine phytoplankton species*, Environmental Toxicology and Chemistry, 1999.
- [9] L. ELLIOT SHUBERT, *Algae as ecological indicators*, Academic press, 1984.
- [10] D.K. KIMURA, *Likelihood methods for the von Bertalanffy growth curve*, Fishery bulletin, 1979.
- [11] *Mathcad 2000 - User's guide*, Mathsoft, 1999.

# Annexes

# Annexe A : code Mathcad

## Ajustement de bioessai par la méthode du simplexe

### A.1 Initialisation des données

```

data := C:\jerome\bio11.xls      nvar := 10
                                     npar := 19
Nt := rows(data) - 2

initdonnees(data, Nt, k) :=
  for i ∈ 0..Nt
    for j ∈ 1..3
      Yi,j ← datai+1,5(j-1)+k+1
      Yi,4 ← datai+1,20+k+1
    for j ∈ 5..nvar
      Yi,j ← 0
  Y

k := 0..4      i := 0..Nt
Yk := initdonnees(data, Nt, k)      Ti := i

j := 0..3      Xj,k := (Yk)0,j+1
j := 4..28     Xj,k := valesestimj-4

```

1.5	Qno		
.1	Qpo		
.1	Qsio		
.2	Chla'o		
.1	Qn'o		
.1	Qp'o		
1.5	r	1.4	1.6
.9	VmaxN	.75	1.1
.05	VmaxP	.03	.08
.7	VmaxSi	.6	.8
.2	Kn	1.9	2.1
.25	Kp	.2	.4
1.2	Ksi	1.1	1.3
.4	QminN	.1	.6
.014	QminP	.01	.05
.2	QminSi	.1	.5
.28	m	.2	.4
.6	r'	.5	.8
.4	VmaxN'	.3	.6
.05	VmaxP'	.02	.07
.3	Kn'	2.8	3.2
.2	Kp'	.1	.4
.4	QminN'	.2	.6
.01	QminP'	.008	.03
.2	m'	.1	.3

vales<sub>estim</sub> :=

bornes :=



## A.2 Optimisation des paramètres

Calcul de l'écart quadratique en un point :

```

ecart(P, X, Y, T, D, nvar, varobs) :=
  Nt ← rows(T) - 1
  for j ∈ 1..nvar
    Ymoyj ←  $\frac{\sum_{i=0}^{Nt} (Y^{(j)})_i}{Nt + 1} \cdot \text{varobs}_j$ 
  Ymoyj ← 1 if nvar = 1
  ndiv ← 500
  for i ∈ 0..Nt
    itsimi ← round  $\left[ (T_i - T_0) \cdot \frac{\text{ndiv}}{(T_{Nt} - T_0)} \right]$ 
  for i ∈ 10..28
    Xi ← Pi-10
  Xsim ← rkfixed(X, 0, TNt, ndiv, D)
  for j ∈ 1..nvar
    for i ∈ 1..Nt
      Ealgebric(j-1)Nt+i ←  $\frac{[Xsim^{(j)} + Xsim^{(8)} \cdot (j=4)]_{itsim_i} - (Y^{(j)})_i}{Ymoyj}$  if varobsj = 1
  Equadratic ← 0.5 (EalgebricT · Ealgebric)0
  Equadratic
  
```

Algorithme du simplex :

```

simplex(X, Y, T, D, nvar, varobs, npar) :=
  α ← 1
  β ← .5
  γ ← 2
  for i ∈ 0..npar - 1
    for j ∈ 0..npar
      Si,j ← runif(1, bornesi,0, bornesi,1)0
  for i ∈ 0..cols(S) - 1
    Ecarti ← sommeecart(S(i), X, Y, T, D, nvar, varobs)
  m ←  $\frac{\sum_{i=0}^{npar} \text{Ecart}_i}{npar + 1}$ 
  while  $\sqrt{\frac{\sum_{i=0}^{npar} (\text{Ecart}_i - m)^2}{npar}} \geq 0.001$ 
    ext ← extremes(Ecarts)
    g ← ext0,0
    fg ← ext0,1
    h ← ext1,0
    fh ← ext1,1
    s ← ext2,0
    fs ← ext2,1
  
```

```

G ← barycentre(S, g)
R ← (1 + α)S(g) - α · G
fr ← sommeecart(R, X, Y, T, D, nvar, varobs)
if (fs ≤ fr) ∧ (fr < fh)
  S(g) ← R
  Ecartsg ← fr
  m ← m +  $\left(\frac{fr - fg}{npar + 1}\right)$ 
  continue
if fr < fs
  E ← γR + (1 - γ) · G
  fe ← sommeecart(E, X, Y, T, D, nvar, varobs)
  if fe < fr
    S(g) ← E
    Ecartsg ← fe
    m ← m +  $\left(\frac{fe - fg}{npar + 1}\right)$ 
  otherwise
    S(g) ← R
    Ecartsg ← fr
    m ← m +  $\left(\frac{fr - fg}{npar + 1}\right)$ 
  continue
if fr ≥ fh
  if fg > fr
    S(g) ← R
    Ecartsg ← fr
    m ← m +  $\left(\frac{fr - fg}{npar + 1}\right)$ 
  C ← β · S(g) + (1 - β) · G
  fc ← sommeecart(C, X, Y, T, D, nvar, varobs)
  if fc < fg
    S(g) ← C
    Ecartsg ← fc
    m ← m +  $\left(\frac{fc - fg}{npar + 1}\right)$ 
  otherwise
    S ← reconfig(S, s)
    for i ∈ 0..cols(S) - 1
      Ecartsi ← sommeecart(S(i), X, Y, T, D, nvar, varobs)
      m ←  $\frac{\sum_{i=0}^{npar} Ecarts_i}{npar + 1}$ 
for j ∈ 0..npar
  Snpar, j ← Ecartsj
S

```



# Lexique

## **Eutrophisation :**

Les rejets anthropiques croissants d'azote et de phosphore dans certaines eaux côtières peuvent induire de fortes augmentations de la production végétale aquatique. Ce phénomène appelé *eutrophisation* a pour conséquence de déséquilibrer le fonctionnement normal des écosystèmes jusqu'à provoquer, dans les cas extrêmes, la mort de l'écosystème par asphyxie.

En France, ce sont la Seine et la Loire qui provoquent les phénomènes d'eutrophisation les plus marqués ; d'avril à septembre, les concentrations en phytoplancton au débouché de l'estuaire de la Seine (évaluées par les teneurs en chlorophylle a) atteignent des valeurs très élevées. En particulier, les développements annuels de diatomées puis de flagellés en Baie de Seine peuvent momentanément et localement provoquer des eaux colorées.

## **Hypoxie :**

L'*hypoxie* est une diminution de la quantité d'oxygène dissous dans le milieu.  
⇒ *désoxygénation*

## **Anoxie :**

Stade ultime de l'*hypoxie* où l'oxygène dissous devient indétectable. Phénomène provoquant la mort massive de la faune aquatique.