Mathématiques Appliquées à la Biologie
Modélisation dynamique

http://bmm.univ-lyon1.fr

S. Charles
sandrine.charles@univ-lyon1.fr

D'après un document de Sylvain MOUSSET
-
Université Claude Bernard Lyon I – France

5 septembre 2023

Présentation

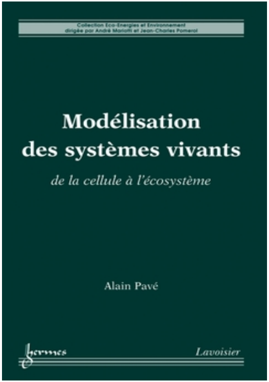
- Laboratoire de Biométrie - Biologie Evolutive (UMR CNRS 5558)
- Équipe **Modélisation et Ecotoxicologie PrédictiveS**
- Bâtiment Gregor Mendel, mezzanine

⇒ Etablir *a priori* le devenir vraisemblable et les effets prévisibles des substances chimiques introduites dans lenvironnement et prévoir les risques écologiques associés.

Table des matières

Référence

Les idées qui guideront le discours que je tiendrai dans ce cours sont inspirées du livre d'Alain Pavé :



Pavé, A. (2012) *Modélisation des systèmes vivants*. Lavoisier, Hermes Science Publications (eds). 633p. ISBN : 978-2746239111.

Plan détaillé

La modélisation

- La modélisation est la démarche scientifique qui permet l'élaboration d'un modèle.
- La partie la mieux connue de la modélisation est fondée sur les **mathématiques**, et de façon plus restreinte, sur la partie des mathématiques qui traite des variables et paramètres prenant des valeurs numériques dans $\mathbb{R}$.
- Pourtant, d'autres formalismes sont parfois nécessaires, car tout n'est pas mesurable. Par exemple, la modélisation des processus de décision s'appuiera plutôt sur des représentations shématiques.

$\Rightarrow$ Dans ce cours, il ne sera question que de **modélisation mathématique**.

Modéliser, ce n'est pas théoriser

- On peut théoriser sans modéliser, modéliser sans théoriser. Par contre, le modèle est souvent un outil précieux dans une démarche théorique.
- De ce fait, concrètement, la modélisation intervient dans les trois grandes étapes de la démarche scientifique :
  1. Détection et énoncé des questions ;
  2. Problématisation et acquisition de données et de connaissances ;
  3. Définition des actions et étude de leurs conséquences.

Le modélisateur

- Est spécialiste d'une *stratégie de construction et d'utilisation de modèles* ;
- Sait comment modéliser efficacement dans la discipline dans laquelle il applique sa compétence ;
- Maîtrise une grande variété de techniques et de méthodes ;
- S'inspire du problème biologique ou écologique pour proposer une méthode et non l'inverse ;
  "Il faut se garder de fabriquer des fusils à chasser les dinosaures et passer le reste de sa vie à chercher ces dinosaures pour utiliser ces fusils" (Pavé, 2012, p16).
- S'implique dans la connaissance des aspects biologiques qu'il étudie. Dans les projets de recherche, il aura souvent un rôle central et fédérateur.

Le modèle

- Est une *représentation symbolique de certains aspects* d'un objet ou d'un phénomène du monde réel, ici biologique ou écologique ;
- N'est pas une fin en soi ;
- N'est qu'un instrument dans la boîte à outils du modélisateur ;
- Est fortement couplé à l'expérience et à l'observation ;
- S'intègre dans une démarche générale relevant de l'*analyse des systèmes*.

$\Rightarrow$ Même si les données ont le plus souvent raison, dans certains cas, le modèle peut valider ou invalider les données ; il peut être un instrument de contrôle.

$\Rightarrow$ Le modèle ne doit pas être le prétexte de décisions prises *a priori* ; il peut être un instrument d'aide à la décision technique ou politique (déontologie de la modélisation).

Plan détaillé

Caractéristique d'un modèle

La modélisation est aujourd'hui reconnue comme une démarche efficace, surtout si elle est couplée à une approche expérimentale rigoureuse.

Pour être efficace, un modèle doit avant tout être opératoire [1], c'est-à-dire :

- Répondre aux objectifs de la modélisation ;
- Être interprétable en terme biologique ;
- Être traduisible en *termes simples* accessibles à tous.

1. Relatif aux moyens et aux processus mis en uvre pour atteindre un but

Le choix du bon formalisme

Bien représenter pour bien résoudre est une des clés de la modélisation (Pavé 2012, p26) : quelle catégorie de modèles formels choisir ?

- Les modèles mathématiques (*e.g.*, $\frac{dx}{dt} = \alpha x$) ;
- Les modèles logiques (*e.g.*, $A \vee B \Rightarrow P$) ;
- Les modèles de simulation (*e.g.*, générateurs de nombres aléatoires) ;
- Les modèles géométriques (*e.g.*, courbes, cartes, surfaces...) ;
- Les modèles de structures de données (*e.g.*, BDD relationnelles) ;
- Les modèles centrés objets (*e.g.*, modèles multi-agents).

L'élaboration d'un modèle (1)

Pour élaborer un modèle, la modélisation doit prendre en compte :

- L'objet et/ou le phénomène biologique à représenter ;
- Le système formel choisi ;
- Les objectifs, c'est-à-dire l'utilisation que l'on souhaite faire du modèle ;
- Les données et les connaissances biologiques *a priori*, qui sont disponibles ou accessibles par l'expérience ou l'observation.

L'élaboration d'un modèle (2)

Les tâches à accomplir par le modélisateur dépendent de la situation biologique et du système formel choisi. Néanmois, il devra toujours :

- Formaliser le problème, c'est-à-dire écrire le modèle ;
- Manipuler le modèle pour le rendre plus utilisable et étudier ses propriétés ;
- Etablir des relations avec d'autres représentations (*e.g.*, le graphe d'une fonction, un programme informatique de simulation) ;
- Interpréter le modèle et confronter les résultats obtenus avec la réalité biologique le plus souvent vue *à travers les données expérimentales*.

Quelques modèles que vous connaissez peut-être

- En biologie :
  - Enzymologie : Modèle de Michaelis-Menten ;
  - Génétique : lois de Mendel ;
  - Génétique des populations : Loi de Hardy-Weinberg ;
  - Biologie moléculaire : modèles EDO d'horloges circadiennes ;
  - ...
- En physique, lors de vos études secondaires :
  - Mécanique : pendules, ressorts ;
  - Électronique : circuits LC, RLC ;
  - ...

Table des matières

Les équations différentielles ordinaires (EDO)

Pour ce cours, nous traiterons de la modélisation mathématique à l'aide d'**équations différentielles ordinaires** (EDO). Les EDO sont un outil mathématique simple permettant :

- La modélisation des processus **dynamiques**, c'est-à-dire qui **évoluent au cours du temps** ;
- Une analyse et une interprétation des résultats aisées.

Même si l'apprentissage du formalisme lié aux EDO nécessitera de traiter des exemples théoriques, le plus souvent, le cours sera illustré à l'aide d'exemples biologiques concrets.

Plan détaillé

Qu'est-ce qu'une EDO ?

Une EDO dans $\mathbb{R}$, dite EDO du premier ordre, décrit l'évolution (ou la variation) dans le temps d'une variable définie dans $\mathbb{R}$.

- Une variable quelconque $x(t)$;
- L'effectif d'une population $N(t)$;
- La concentration d'une substance chimique $c(t)$;
- ...

Notations

Pour une variable $x(t) \in \mathbb{R}$, une EDO d'ordre 1 s'écrit :

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x(t), t)$$

$x(t)$ est l'inconnue à trouver ; c'est une fonction du temps t.

$\frac{dx(t)}{dt}$ peut aussi étre noté $x'(t)$ ou $\dot{x}(t)$.

Il s'agit de la dérivée de la fonction $x(t)$ par rapport à t :

$$\frac{dx(t)}{dt} = x'(t) = \dot{x}(t)$$

qui décrit la variation de $x(t)$ relativement au temps t.

Plan détaillé

Le système formel choisi : les EDO
- Généralités
- Définitions

Les EDO autonomes / non autonomes

Une EDO est dite **autonome** si $\frac{dx(t)}{dt}$ ne dépend pas **directement** du temps t.

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x(t)) \quad \text{par ex.,} \ \frac{dx(t)}{dt} = \alpha x(t) \Leftrightarrow x(t) = x_0 e^{\alpha t}$$

est donc une EDO d'ordre 1 autonome.

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x(t), t) \quad \text{par ex.,} \ \frac{dx(t)}{dt} = \alpha x(t) + t$$

est une EDO d'ordre 1 non-autonome.

$\Rightarrow$ Dans ce cours, on ne traitera que des **EDO d'ordre 1 autonomes**.

Les EDO autonomes linéaires / non linéaires

Une EDO autonome est dite **linéaire** si $f(x(t))$ est une fonction linéaire de $x(t)$.

$$\frac{dx(t)}{dt} = ax(t) + b$$

est une EDO autonome linéaire de paramètres a et b.

$$\frac{dx(t)}{dt} = ax^2(t) + bx(t) + c \quad \text{ou} \quad \frac{dx(t)}{dt} = ae^{bx(t)}$$

sont des EDO autonomes non linéaires.

Ce vous savez (devez savoir) déjà faire

- Appliquer la méthode de séparation des variables ;
- Résoudre une EDO d'ordre 1 linéaire à coefficient constant et sans second membre :
$$\frac{dx(t)}{dt} + ax(t) = 0$$
- Trouver une solution particulière ;
- Appliquer la méthode de variation de la constante ;
- Résoudre une EDO d'ordre 1 linéaire à coefficient constant et avec second membre :
$$\frac{dx(t)}{dt} + ax(t) = b$$
- Résoudre une EDO d'ordre 1 linéaire :
$$\frac{dx(t)}{dt} + f(x)x(t) = g(x)$$

Nous réviserons, mais...

Voici une adresse utile :
http://mathsv.univ-lyon1.fr/

Pour ceux qui ne connaissent pas, il s'agit du site web associé à l'UE de L1 de l'UCBL "Mathématiques pour les Sciences de la Vie".
Ce site rassemble tout ce dont vous aurez besoin pour réviser !

Pour l'**algèbre linéaire**, vous pouvez aller sur :
http://bmm.univ-lyon1.fr/
Rubrique "COURS", puis "Réviser l'algèbre linéaire".

Table des matières

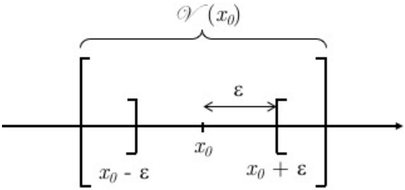
La notion de voisinage

Lors de l'analyse *qualitative* des EDO, nous nous placerons souvent au **voisinage** d'un point particulier.

Dans $\mathbb{R}$, un voisinage $\mathcal{V}(x_0)$ d'un point x_0 doit avoir les propriétés suivantes :

- $\mathcal{V}(x_0)$ est un intervalle ;
- $x_0 \in \mathcal{V}(x_0)$;
- $\exists\, \varepsilon > 0 \text{ tel que }]x_0 - \varepsilon ; x_0 + \varepsilon[\subset \mathcal{V}(x_0)$. x_0 n'est pas une borne de l'intervalle.

On considèrera très souvent un voisinage de x_0 tel que ε très petit.



La notion de différentielle

Définition

Si f est une fonction de x, on appelle **différentielle de** f la quantité

$$df = \frac{df(x)}{dx}dx$$

Par exemple

$$f(x) = \ln x \Rightarrow df = \frac{1}{x}dx$$

La quantité df représente la variation de $f(x)$ relativement à une variation de x (dx, différentielle de x).

La notion de dérivée $n^{\text{ième}}$

Soit f une fonction de x définie sur $\mathbb{R}$.

$\frac{df(x)}{dx}$ est la dérivée de f par rapport à x. On dit aussi que c'est la dérivée première de f, et on peut la noter $f'(x)$ ou $f^{(1)}(x)$.

Si f est n fois dérivable, alors on peut définir :

$$\frac{d^n f(x)}{dx^n} = \frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dx}\left(\frac{df(x)}{dx}\right)\right)\right) = f^{(n)}(x)$$

comme étant la dérivée $n^{\text{ième}}$ de f.

Par exemple, $f^{(2)}(x) = f''(x) = \frac{d^2 f(x)}{dx^2}$ est la dérivée seconde de f.

La formule de Taylor

Soit f une fonction continue et n fois dérivable dans un voisinage $\mathcal{V}$ de x_0. Alors, dans ce voisinage $\mathcal{V}(x_0)$, $f(x)$ peut être approchée par un polynôme de degré n :

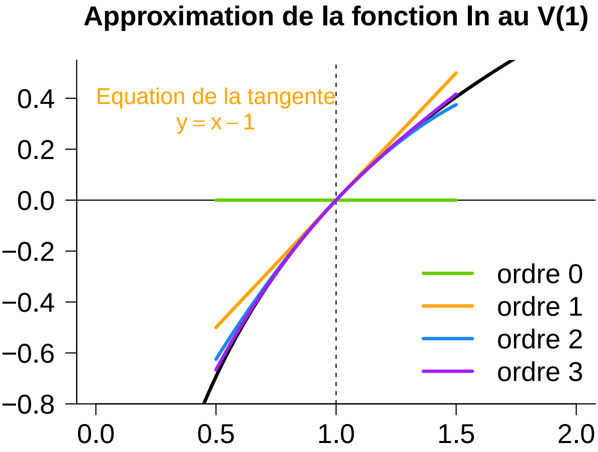
$$f(x) \sim f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\frac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2+\ldots+\frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n$$

On parle d'approximation polynomiale à l'ordre n de f au point x_0. Le plus souvent, nous nous limiterons à l'approximation d'ordre 1, c'est-à-dire à l'équation de la tangente à la courbe représentative de f au point x_0 :

$$f(x) \sim f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$$

C'est ce que l'on appelle **la linéarisation** de f au voisinage de x_0.

Exemple


Approximation de la fonction ln au V(1)
Equation de la tangente
y = x – 1
0.4
0.2
0.0
−0.2
−0.4
−0.6
−0.8
0.0
0.5
1.0
1.5
2.0
ordre 0
ordre 1
ordre 2
ordre 3

Algèbre linéaire

Pour la seconde partie du cours consacrée aux systèmes de deux EDO couplées nous utiliserons des notions d'algèbre linéaire :

- Les matrices 2×2 ;
- Le déterminant d'une matrice 2×2 ;
- L'inverse d'une matrice 2×2 inversible ;
- Les valeurs propres d'une matrice 2×2 ;
- La diagonalisation d'une matrice 2×2 ...

Et n'oubliez pas les sites web :

- http://mathsv.univ-lyon1.fr/
- http://bmm.univ-lyon1.fr