

Effet de la paramétrisation et de la formalisation des équations différentielles sur l'émergence de singularités dans les modèles dynamiques.

Antoine Sciandra

Observatoire des Sciences de l'Univers, Station Zoologique URA CNRS 716,
Université Paris VI/INSU/CNRS, BP 28, F-06230 Villefranche-sur-mer, France

Résumé

On montre comment l'analyse des portraits de phase établis pour des systèmes d'équations différentielles simples de dimension 2 permet de synthétiser leurs propriétés dynamiques. La détermination des isoclines nulles permet de situer les points d'équilibre dans le portrait. Le calcul des valeurs propres de la matrice jacobienne permet de préciser la nature et la stabilité des points fixes et des singularités: foyers, cols, noeuds, centres. On montre comment la sensibilité aux conditions initiales, et la forme des attracteurs étranges peuvent dépendre de la paramétrisation et de la formalisation des équations. La discussion porte sur la pertinence de telles études et de leur application dans les domaines de l'expérimentation biologique et de l'écologie.

Mots clefs:

Equation différentielle, formalisation, paramétrisation, propriétés dynamiques, singularités, portraits de phase, complexité.

Introduction

Parce qu'elles sont simples à résoudre numériquement, les équations différentielles ordinaires sont largement utilisées pour formaliser les systèmes à variables continues en biologie et en écologie. Pour peu que l'on sache transcrire mathématiquement et paramétriser les termes contribuant aux variations positives (naissance, ingestion, production, immigration) et négatives (mortalité, excrétion, émigration) des variables choisies, la seule connaissance des conditions initiales suffit à déterminer l'évolution temporelle du système. La plupart du temps, les biologistes et les écologistes ne visualisent que les chroniques issues des simulations, parce que c'est souvent sous la forme de séries chronologiques qu'ils acquièrent et analysent leurs données. Ils démarrent également leurs simulations avec les conditions initiales choisies pour leurs expériences ou celles observées au début de leur campagne de mesures.

Pour essayer d'appréhender les propriétés dynamiques du système (mathématique), on peut répéter les simulations en agissant sur certains paramètres et conditions initiales, et éventuellement en modifiant l'écriture des équations. Ce travail fastidieux ne procure la plupart du temps qu'une information parcellaire et décevante au regard de l'investissement.

Le but de cet article est d'illustrer comment des systèmes simples formalisés par des équations différentielles ordinaires peuvent être le siège de propriétés dynamiques spécifiques et inattendues, et que ces propriétés sont sensibles à la paramétrisation et à la forme des équations. Pour plus de clarté, les exemples fournis pour la démonstration portent sur des systèmes de dimension 2, pour lesquels les portraits de phase sont immédiatement compréhensibles. Les conclusions insistent sur le fait que l'on ne peut pas utiliser le formalisme différentiel de façon anodine, sans avoir conscience qu'il peut engendrer des propriétés dynamiques tout à fait particulières qui, d'un certain point de vue, reflètent la complexité comportementale du système.

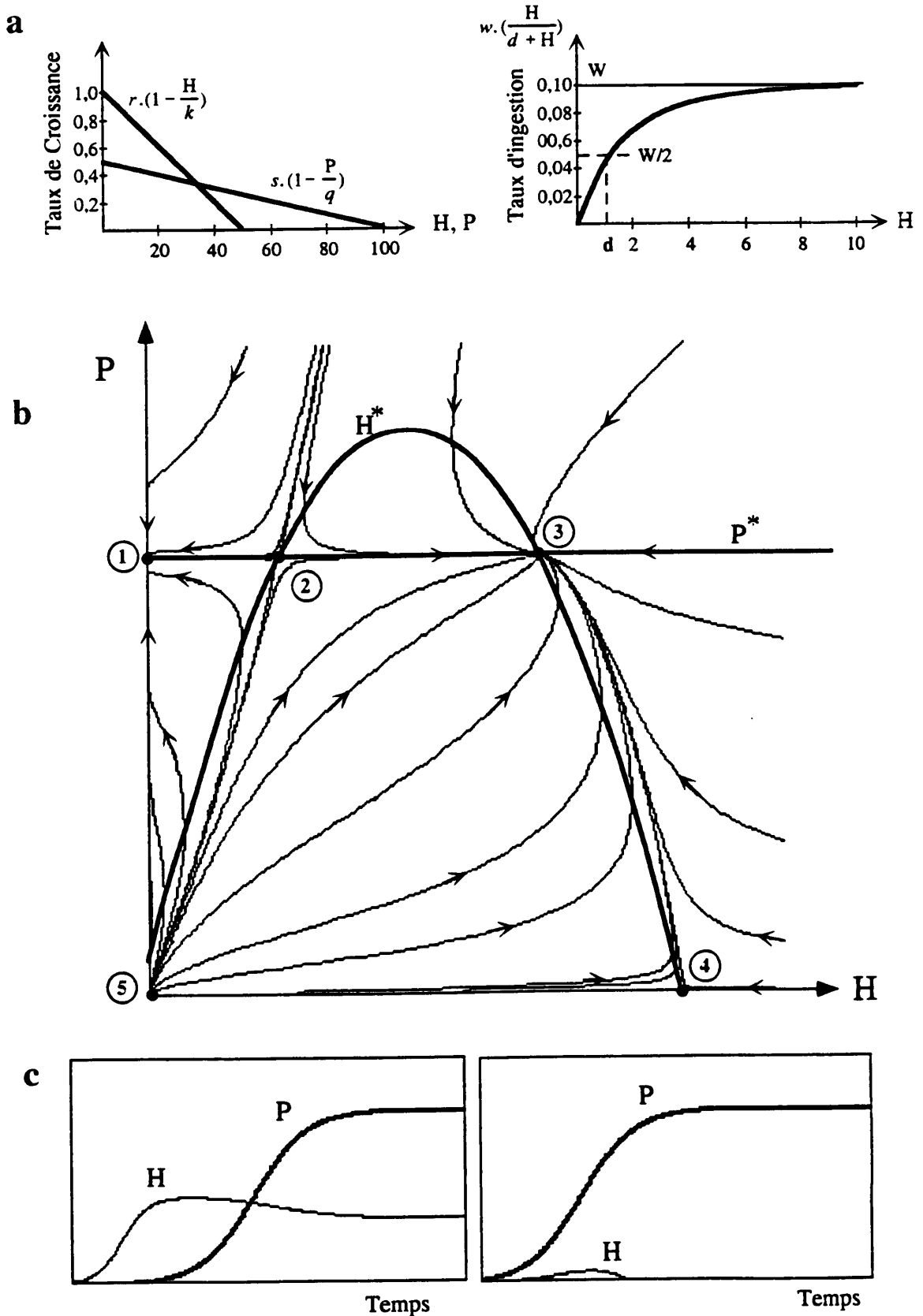


Figure 1 : a) graphes des relations utilisées dans le modèle de base ; b) portrait de phase du modèle de base. 5 points fixes se situent aux intersections des isoclines nulles. Certains sont attractifs (1 et 3), d'autres répulsifs (2,4 et 5) ; c) chroniques montrant la sensibilité aux conditions initiales. Une modification même faible de celles-ci peut entraîner le système vers l'un ou l'autre équilibre stable (1 ou 3).

Conceptualisation

Les 3 exemples de modèle proposés ici n'ont pas la vocation de représenter des systèmes réels, mais d'illustrer comment les modifications apportées sur l'écriture des équations et leur paramétrisation peuvent se répercuter sur leur comportement. Nous utilisons le cas d'école des systèmes proie-prédateurs. Les variables d'état sont une population d'herbivores H et une population de prédateurs P . La première hypothèse biologique que nous faisons est que leur croissance est régie par la loi logistique.

$$\dot{H} = \frac{dH}{dt} = r \cdot \left(1 - \frac{H}{k}\right) \cdot H \quad ; \quad \dot{P} = \frac{dP}{dt} = s \cdot \left(1 - \frac{P}{q}\right) \cdot P$$

Cette loi signifie que le taux de croissance est inversement proportionnel à la densité de la population (figure 1a). k et q désignent les capacités maximales du milieu respectivement pour H et P , c'est-à-dire les densités des populations pour lesquelles les taux de croissance s'annulent. Pour des densités de H

(ou de P) s'approchant de 0, le taux d'accroissement \dot{H}/H (ou \dot{P}/P) de la population tend vers sa valeur maximale r (ou s). Si le système n'était représenté que par ces deux expressions, il n'y aurait pas d'interaction entre les populations H et P . La deuxième hypothèse que nous faisons est que P exerce sur H une prédation que l'on formalise par une équation de Michaelis-Menten (figure 1a). Cette équation signifie que, pour H faible (inférieur à d), le taux de prédation est en gros proportionnel à H , et que pour H fort, ce taux atteint une valeur maximale w saturante. La quantité de proies soustraites par unité de temps est égale au produit du taux de prédation par la quantité de prédateur P . Le modèle s'écrit alors:

$$\dot{H} = r \cdot \left(1 - \frac{H}{k}\right) \cdot H - w \cdot \left(\frac{H}{d+H}\right) \cdot P \quad ; \quad \dot{P} = s \cdot \left(1 - \frac{P}{q}\right) \cdot P$$

On voit que les équations sont maintenant couplées puisque la quantité P rentre dans le calcul de \dot{H} .

Paramétrisation

Les paramètres ont été choisis arbitrairement pour les simulations ($r=1$; $s=0,5$; $k=50$; $q=100$; $w=0,1$; $d=1$), mais on voit qu'ils ont tous un sens biologique et qu'on aurait pu les mesurer expérimentalement: r et s représentent les taux de croissance maximum de chaque population; k et q les densités maximales que le milieu peut accepter; w le taux maximal de prédation de P sur H , et d l'inverse de l'affinité du prédateur pour sa proie.

Simulation

Les vitesses de variation $(\dot{H}, \dot{P})_t$ sont calculables si l'on connaît l'état du système $(H, P)_t$ à l'instant t . La résolution numérique des équations consiste à calculer itérativement $(H, P)_{t+dt}$ à partir de $(H, P)_t$ et $(\dot{H}, \dot{P})_t$. Pour la première itération, on utilise $(H, P)_0$, c'est-à-dire les conditions initiales. L'intégration numérique est effectuée grâce à un calcul algorithmique qui peut être très simple et dont nous ne parlerons pas. Signalons seulement que dt doit être généralement petit. Le nombre d'itérations est donc grand, ce qui explique que la simulation numérique ne se soit réellement développée qu'avec l'apparition de calculateurs rapides.

Plutôt que de visualiser les simulations d'après les chroniques (N et P en fonction du temps), nous allons construire le portrait de phase (P en fonction de N) associé à ce système, ce qui permet de travailler dans l'ensemble de l'espace des variables d'état. Comme une des propriétés recherchées des systèmes dynamiques est la présence d'équilibres, nous allons déterminer l'ensemble des points H^* et P^*

qui annulent les dérivées. Les solutions des équations $\dot{H}=0$ et $\dot{P}=0$ s'appellent les isoclines nulles pour H et pour P. Il y en a quatre:

$$\dot{H}=0 \Rightarrow H^*=0 ; P = \frac{-r.(H^*+d).(H^*-k)}{k.w}$$

$$\dot{P}=0 \Rightarrow P^*=q ; P^*=0$$

Deux isoclines sont confondues avec les axes. La troisième a la forme d'une parabole et la quatrième d'une droite. A toute intersection entre deux isoclines H^* et P^* se situe un point d'équilibre du système. On voit sur la figure 1b qu'il existe 5 points d'équilibre. Le long des isoclines H^* , les trajectoires sont verticales, et horizontales sur les isoclines P^* . Si l'équilibre est instable, un petit déplacement de l'état à partir du point d'équilibre va contribuer à éloigner le système de ce point (répulsif). Inversement, si l'équilibre est stable, le système revient à sa position initiale (le point est attractif). Sur la figure 1b, les points d'équilibres 1 et 3 sont stables, le point 5 est instable. Les points 2 et 4 sont à la fois attractifs et répulsifs suivant la position du système par rapport à ces points. La visualisation des trajectoires révèle que l'espace des phases est structuré. L'existence des points fixes 1 et 3 engendre deux bassins d'attraction situés de part et d'autre du col centré sur le point 2. La ligne imaginaire qui passe par les points 5 et 2 est comme une crête qui sépare deux valons. Suivant que les conditions initiales se situent d'un côté ou de l'autre du sommet de la crête, la trajectoire s'oriente vers l'un ou l'autre bassin. Une variation infinitésimale des conditions initiales suffit à changer radicalement l'évolution du système et l'équilibre atteint (voir les chroniques de figure 1c).

Tout ce qui vient d'être dit sur la nature des singularités est extrait de l'observation qualitative des simulations. En fait, des calculs simples permettent d'acquérir cette information sans avoir à simuler. Nous faisons la démonstration à titre d'illustration pour cet exemple. On appelle la matrice jacobienne du système d'équations la matrice qui contient les dérivées partielles des équations différentielles par rapport aux variables. Avec le jeu de paramètres utilisés, on obtient:

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial H}{\partial H} & \frac{\partial H}{\partial P} \\ \frac{\partial P}{\partial H} & \frac{\partial P}{\partial P} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - \frac{H}{25} + \frac{0.1 \cdot H \cdot P}{(1+H)^2} - \frac{0.1 \cdot P}{1+H} & \frac{-0.1 \cdot H}{1+H} \\ 0 & 0.5 - 0.01 \cdot P \end{bmatrix}$$

Pour les 5 points d'équilibre (0,100), (12.24,100), (36.75,100), (50,0) et (0,0), on peut donc calculer 5 matrices différentes :

$$J_1 = \begin{bmatrix} -9 & 0 \\ 0 & -0.5 \end{bmatrix} \quad J_2 = \begin{bmatrix} 0.45 & -0.092 \\ 0 & -0.5 \end{bmatrix} \quad J_3 = \begin{bmatrix} -0.477 & -0.097 \\ 0 & -0.5 \end{bmatrix} \quad J_4 = \begin{bmatrix} -1 & -0.098 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix} \quad J_5 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix}$$

La nature des singularités est déterminée par les valeurs propres des matrices jacobienes. On démontre que λ est valeur propre de J si et seulement si $\det(J - \lambda.I)=0$, où \det est le déterminant, et I la matrice unité. Pour la matrice J_1 , le calcul donne:

$$\det(J_1 - \lambda.I) = \lambda^2 + 0.95.\lambda + 4.5 = 0$$

On voit sur cet exemple et on peut démontrer que le déterminant est un polynôme de degré n (dimension du système) en λ . C'est le polynôme caractéristique de la matrice J. Ses racines sont les valeurs propres de la matrice. Dans cet exemple les solutions de l'équation caractéristique sont deux réels négatifs ($\lambda_1 = -9$, $\lambda_2 = -0.5$). La théorie mathématique de ces matrices nous enseigne que le point fixe est un noeud stable, c'est-à-dire que les trajectoires atteignent ce point sans tourner autour. Les valeurs propres des

point 2 à 5 de la figure 1b sont: $(\lambda_1=0.45, \lambda_2=-0.5)$, $(\lambda_1=-0.47, \lambda_2=-0.5)$, $(\lambda_1=-1, \lambda_2=0.5)$, $(\lambda_1=1, \lambda_2=0.5)$. Le tableau 1 donne la nature des points fixes en fonction des valeurs propres.

Nœud stable	Deux valeurs propres réelles négatives
Nœud instable	Deux valeurs propres réelles positives
Col	Deux valeurs propres réelles de signes opposées
Nœud-Col	Une valeur propre nulle
Foyer stable	Deux valeurs propres complexes à parties réelles négatives
Foyer instable	Deux valeurs propres complexes à parties réelles positives
Centre	Deux valeurs propres complexes à parties réelles nulles

On voit donc que l'organisation de l'espace de phase est totalement déterminée par l'écriture et la paramétrisation des équations. Dans cet exemple, les deux isoclines nulles qui ne sont pas sur les axes sont indépendantes. Il est aisé de remonter l'isocline $P^*=q$ en augmentant la valeur de ce paramètre sans que l'autre isocline ne change. Le nombre de points fixes va passer de 5 à 4 lorsque l'isocline P^* sera tangente au sommet de la parabole H^* , puis à 3 lorsqu'il n'y aura plus de points d'intersection. Ces transitions successives, conduisant à une re-définition des propriétés dynamiques du système, correspondent à des bifurcations.

Nous allons illustrer ce propos en revoyant la conception du modèle initial. En effet, celui-ci n'est évidemment pas très plausible: dans une relation proie-prédateur, on s'attend à ce que la croissance du second dépende du premier. Nous allons donc considérer que le paramètre q est une fonction de H , en supposant que la capacité maximale est proportionnelle à la quantité de proies présentes: $q = \alpha.H$.

$$\dot{H} = r \cdot \left(1 - \frac{H}{k}\right) \cdot H - w \cdot \left(\frac{H}{d+H}\right) \cdot P \quad ; \quad \dot{P} = s \cdot \left(1 - \frac{P}{\alpha.H}\right) \cdot P$$

Les isoclines nulles ne changent que pour la seconde équation:

$$\dot{P}=0 \Rightarrow P^* = \alpha.H \quad ; \quad P^* = 0$$

On voit sur la figure 2 que cette nouvelle écriture se traduit par deux faits importants. Le premier est que le nombre de points singuliers est passé de 5 à 4; le second, qu'une modification des paramètres pourra changer la forme des isoclines, mais pas le nombre de points d'équilibre (à moins de prendre pour α une valeur égale à 0 ou ∞ , ce qui n'aurait pas de sens). On a donc le sentiment que, par rapport au modèle précédent, un changement de paramètre bouleversera beaucoup moins la structure dynamique du système. Les 3 simulations faites avec le même jeu de paramètres et en prenant successivement $\alpha = 10.0$, 6.67 et 2.0 montrent qu'il faut être prudent. En effet, l'analyse des valeurs propres révèle que le point fixe de la figure 2a est un foyer instable. On voit en effet que les trajectoires s'écartent du point fixe en oscillant pour venir se stabiliser sur un cycle limite qu'elles ne quittent plus. Ce cycle est un attracteur pour les trajectoires qui lui sont externes ou internes. Sur la figure 2b, le point fixe est devenu un foyer stable et le cycle limite a disparu. Les trajectoires se rapprochent du point d'équilibre en tournant autour. Les trajectoires de la figure 2c ont l'air qualitativement différentes car l'équilibre semble atteint avec moins d'oscillations. Pourtant, l'analyse des valeurs propres montre qu'il s'agit toujours d'un foyer stable. Le passage du portrait avec $\alpha = 10.0$ au portrait avec $\alpha = 6.67$ illustre une bifurcation qui est due à une modification, non pas du nombre de points fixes, mais de leur nature.

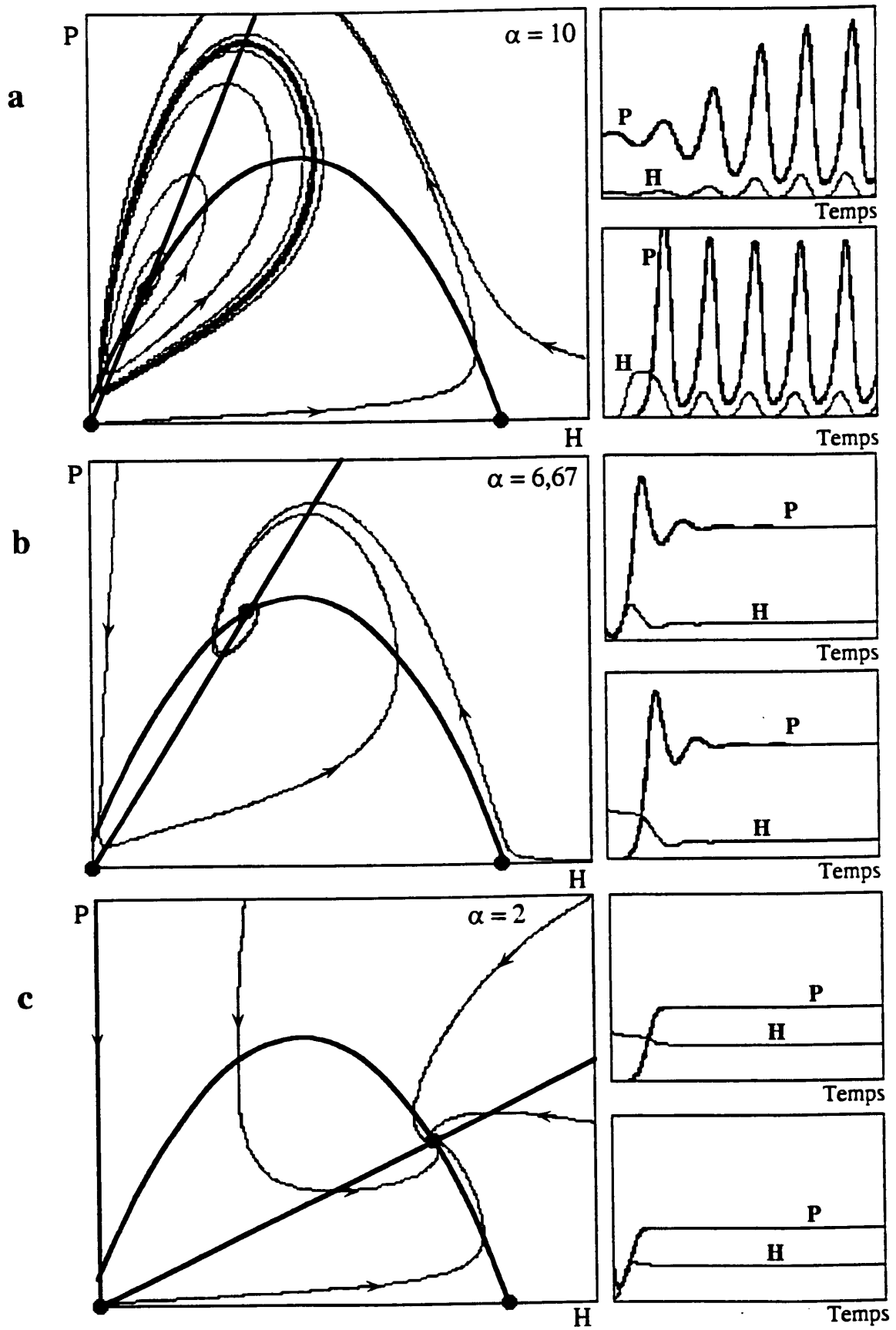


Figure 2a, b et c : Evolution du portrait de phase obtenu pour une nouvelle formulation du modèle, et pour 3 valeurs différentes du paramètre α . (Voir le texte).

Bien que présentant un progrès par rapport au premier modèle, le modèle précédent peut encore être formulé différemment. Au lieu de faire appel à une loi logistique globale, il est permis de considérer que le taux de croissance des prédateurs peut être représenté par leur taux d'ingestion: leur accroissement somatique (en poids) est proportionnel à la quantité de proies ingérées par unité de temps. Pour simplifier, nous supposons qu'il n'y a pas de perte, et que toute masse de proies ingérées est convertie en masse de prédateurs, (ou plus simplement qu'une proie suffit à produire un prédateur, si les populations sont mesurées par des nombres). Afin d'introduire une régulation de la population de prédateurs (disparue avec la loi logistique), nous supposons que celle-ci subit un processus de mortalité. Le formalisme $m.P^2$ traduit que le taux de mortalité augmente avec P.

$$\dot{H} = r \cdot \left(1 - \frac{H}{k}\right) \cdot H - w \cdot \left(\frac{H}{d+H}\right) \cdot P \quad ; \quad \dot{P} = w \cdot \left(\frac{H}{d+H}\right) \cdot P - m \cdot P^2$$

Les isoclines nulles diffèrent uniquement pour la deuxième équation:

$$\dot{P}=0 \Rightarrow P^* = \frac{w}{m} \cdot \frac{H}{d+H} \quad ; \quad P^* = 0$$

On voit que cette nouvelle représentation du système proie-prédateur conduit au calcul d'une nouvelle isocline P^* qui est une hyperbole dont le maximum est inversement proportionnel à m . Comme dans le premier modèle, le nombre de points fixes dépend de la valeur de ce paramètre et peut être compris entre 3 et 5. Le portrait de phase obtenu pour le jeu de paramètres ($r=1, k=50, w=0.5, d=3.5, m=0.016$) est extrêmement riche: 1 nœud-col (en $H=P=0$), 2 cols et 2 foyers dont l'un est instable (figure 3a). A l'inverse du premier modèle, il n'existe ici qu'un seul équilibre stable. Suivant les conditions initiales, qui peuvent être très proches, les transitoires peuvent changer radicalement. La figure 3b compare les 2 chroniques issues de positions voisines au dessus du col central. La figure 3c, les trajectoires issues de 2 conditions initiales voisines du foyer instable proche de l'axe des ordonnées. Ces exemples illustrent la sensibilité aux conditions initiales.

Discussion

Les exemples précédents illustrent que les systèmes différentiels ont leur propre dynamique, et qu'il n'est pas nécessaire que les équations soient nombreuses ni fortement non-linéaires pour que l'on puisse observer des singularités surprenantes. Il n'y a en effet pas forcément de rapport entre ce que les biologistes appellent complexité structurelle (nombre de variables et type de relations) et complexité comportementale (Pavé, 1994). Le choix des équations et leur formalisation ont une incidence primordiale sur les propriétés du système mathématique. Pour une écriture donnée, le choix des paramètres est également important. Enfin, pour une paramétrisation donnée, l'espace des phases est structuré, et la dynamique du système peut dépendre des conditions initiales. Ce constat nous conduit naturellement à insister sur la nécessité de distinguer les propriétés du système réel de celles du système mathématique. On entend en effet trop souvent les biologistes extrapoler au système réel étudié les propriétés observées sur le système théorique.

Bien évidemment, se pose la question de savoir quel crédit on peut apporter à des systèmes théoriques qui possèdent de telles singularités. La réponse dépend de la connaissance que l'on possède de l'objet étudié. En physique et en chimie, on a réellement observé des phénomènes singuliers. La réaction de Belousov et Zhabotinskii ((Bal-Eli et Haddad, 1979) ou les cellules de convection de Beynard sont des phénomènes réels qui ont été parfaitement mesurés, et dont la compréhension a grandement été facilitée par l'usage de modèles théoriques. En biologie, où les systèmes sont beaucoup moins déterministes, les cas sont plus rares et plus difficiles à mettre en évidence.

Néanmoins, l'intérêt de l'étude de systèmes théoriques est de mettre clairement en évidence des familles de comportements distincts que l'on peut retrouver dans des systèmes réels. Leur fonction n'est donc pas tant de modéliser l'objet lui-même en détaillant ses attributs, mais de proposer des configurations

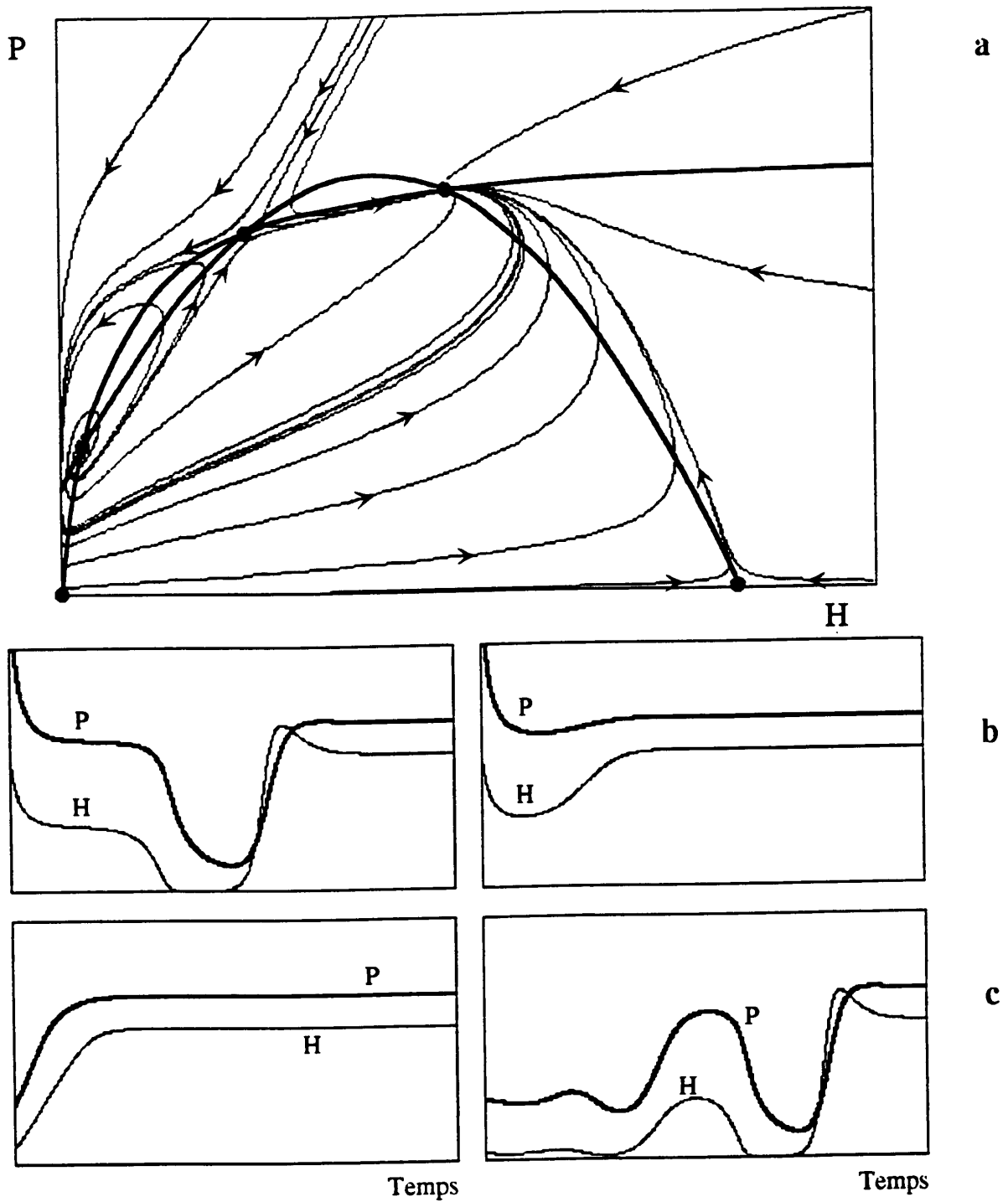


Figure 3 : a) portrait de phase avec 5 points fixes. Le long de la parabole on trouve de gauche à droite: un foyer instable, un col et un foyer stable qui est le seul point d'équilibre stable du système ; b) et c) pour y parvenir, les transitoires peuvent être très différents même pour des conditions initiales très voisines.

plausibles, où l'émergence de nouvelles propriétés (bifurcation) sont expliquées et déterminées. Délimiter l'espace des paramètres qui va entraîner le système dans tel ou tel comportement présente un intérêt évident pour les biologistes qui s'attachent à regarder leur système globalement, c'est-à-dire d'un point de vue conceptuel plus qu'analytique.

Références

- Bal-Eli K., Haddad S. (1979) The Belousov-Zhabotinskii reaction. Comparison of experiments with calculations. *J. Phys. Chem.* 83, 2944-2952
- Pavé A. (1994) *Modélisation en biologie et en écologie*, Aléas Editeur, Lyon, France