

# Analyse de réseaux trophiques : comparaison d’algorithmes pour l’échantillonnage uniforme de polytope

T. Grente\*      V. Girardin†      M. Dien‡      P. Regnault§

## Résumé

Utilisés notamment en écologie marine, les réseaux trophiques sont une représentation sous forme de graphes pondérés des interactions proies/prédateurs d’un écosystème. Les nœuds du graphe représentent alors les espèces et les arêtes leurs interactions sous forme d’échanges de matière organique appelés flux.

Dans le but d’estimer la valeur de ces flux, une classe de méthode appelée Modélisation Linéaire Inverse (LIM) a été développée. Cette méthode consiste à établir un système de contraintes sur ces flux à partir de mesures réalisées sur le terrain, d’expériences en laboratoire et de connaissances issues de la bibliographie. Les équations et les inéquations de ce système de contraintes définissent un polytope (généralisation à toutes dimension de la notion de polygone en deux dimensions) à l’intérieur duquel se trouvent l’ensemble des solutions du système de contraintes.

Afin de mieux comprendre le réseau trophique, les écologues souhaitent obtenir un échantillon représentatif de l’ensemble des scénarios possibles, ce qui revient à échantillonner de manière uniforme le polytope de solutions. À l’heure actuelle, les écologues utilisent majoritairement le package *limsolve* de **R** pour obtenir ces échantillons. Malheureusement, la fonction *xsample()* (la fonction d’échantillonnage implémentée par [den Meersche et al., 2009]) du package *limsolve* est très lente et limite les écologues travaillant sur le LIM dans leur analyse de réseaux trophiques.

C’est avec cette problématique en tête que nous avons développé un package **R** appelé *SampleLIM* dont la fonction d’échantillonnage est beaucoup plus performante que *xsample()*, tout en reposant sur le même algorithme. Les performances de cette nouvelle fonction sont comparées à d’autres fonctions d’échantillonnage existantes, autant du point de vue du temps de calcul que de la qualité des échantillons obtenus.

**Mots-clés :** Package – Biologie – Réseaux trophiques – Échantillonnage uniforme – Méthodes MCMC – Modélisation Linéaire Inverse

## Développement

Les algorithmes d’échantillonnages qui seront comparés sont les suivantes :

- Coordinate Hit and Run with Rounding (CHRR) [Haraldsdóttir et al., 2017] ;
- Billard Walk (BiW) [Polyak and Gryazina, 2014] ;
- Mirror walk (marche utilisée dans la fonction *xsample()* et dont on propose une nouvelle implémentation).

Ces trois différentes méthodes d’échantillonnage reposent toutes sur une approche MCMC (Monte Carlo Markov Chain) de l’exploration du polytope.

La comparaison des différentes méthodes se font à la fois du point de vue du temps de calcul mais aussi du point de vue de la qualité des échantillons. Pour évaluer ce dernier aspect, on utilise

---

\*France Énergies Marines, [theo.grente@france-energies-marines.org](mailto:theo.grente@france-energies-marines.org)

†Normandie Université, Laboratoire de Mathématiques Nicolas Oresme, [valerie.girardin@unicaen.fr](mailto:valerie.girardin@unicaen.fr)

‡Normandie Université, Groupe de Recherche en Informatique, Image et Instrumentation de Caen, [matthieu.dien@unicaen.fr](mailto:matthieu.dien@unicaen.fr)

§Université de Reims Champagne-Ardenne, Laboratoire de Mathématiques de Reims, [philippe.regnault@univ-reims.fr](mailto:philippe.regnault@univ-reims.fr)

un ensemble de tests et diagnostics de convergence utilisés notamment par [Fallahi et al., 2020]. Ces tests sont réalisés sur différentes tailles de modèles et en particulier sur le modèle trophique décrit dans [Nogues et al., 2021] sur l'écosystème de la baie de Courseulles-sur-Mer avant la construction d'un parc éolien en mer.

## Références

- Karel Van den Meersche, Karline Soetaert, and Dick van Oevelen. `xsample()` : An r function for sampling linear inverse problems. *Journal of Statistical Software*, 30 :1–15, 2009.
- Shirin Fallahi, Hans J. Skaug, and Guttorm Alendal. A comparison of monte carlo sampling methods for metabolic network models. *PLOS ONE*, 15(7) :1–24, 07 2020. doi : 10.1371/journal.pone.0235393. URL <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0235393>.
- Hulda S Haraldsdóttir, Ben Cousins, Ines Thiele, Ronan M.T Fleming, and Santosh Vempala. CHRR : coordinate hit-and-run with rounding for uniform sampling of constraint-based models. *Bioinformatics*, 33(11) :1741–1743, 01 2017. ISSN 1367-4803. doi : 10.1093/bioinformatics/btx052. URL <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btx052>.
- Quentin Nogues, Aurore Raoux, Emma Araignous, Aurélie Chaalali, Tarek Hattab, Boris Leroy, Frida Ben Rais Lasram, Valérie David, François Le Loc'h, Jean-Claude Dauvin, and Nathalie Niquil. Cumulative effects of marine renewable energy and climate change on ecosystem properties : Sensitivity of ecological network analysis. *Ecological Indicators*, 121 :107128, 2021. ISSN 1470-160X. doi : <https://doi.org/10.1016/j.ecolind.2020.107128>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1470160X20310670>.
- B.T. Polyak and E.N. Gryazina. Billiard walk - a new sampling algorithm for control and optimization. *IFAC Proceedings Volumes*, 47(3) :6123–6128, 2014. ISSN 1474-6670. doi : <https://doi.org/10.3182/20140824-6-ZA-1003.02312>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1474667016425711>. 19th IFAC World Congress.