

THÈSE DE DOCTORAT DE

L'UNIVERSITÉ DE NANTES

ÉCOLE DOCTORALE N° 601
*Mathématiques et Sciences et Technologies
de l'Information et de la Communication*
Spécialité : *Informatique*

Par

Antoine Régimbeau

**Functional omic for modeling and understanding ecosystems in
the context of marine microbiology**

Thèse présentée et soutenue à Nantes, le 22 novembre 2022
Unité de recherche : 6004

Rapporteurs avant soutenance :

Daniel MACHADO Associate Professor, Norwegian University of Science and Technology
Matthew SULLIVAN Professor, Ohio State University

Composition du Jury :

Président :	Prénom NOM	Fonction et établissement d'exercice (<i>à préciser après la soutenance</i>)
Examineurs :	Matthew SULLIVAN	Professor, Ohio State University
	Marina LEVY	Directrice de recherche, Université Pierre et Marie Curie
	Clémence Frioux	Chargée de recherche, INRIA Bordeaux
	Laurent BOPP	Directeur de recherche, Institut Pierre-Simon Laplace
	Alejandro MAAS	Professor, Universidad de Chile
Dir. de thèse :	Damien EVEILLARD	Professeur, Université de Nantes
Co-dir. de thèse :	Olivier AUMONT	Chargé de recherche, Université Pierre et Marie Curie
Co-dir. de thèse :	Laurent MEMERY	Directeur de recherche, Université de Brest

Titre : Données omiques fonctionnelles pour la modélisation des écosystèmes microbiologiques marins

Mot clés : Réseau métabolique, Microorganisme, Génome, System terrestre, Ecologie

Résumé : Alors que les écosystèmes sont principalement étudiés par des observations macroscopiques, les réseaux métaboliques offrent un moyen de modéliser le phénotype métabolique du système biologique sur la base de sa description génétique. Cependant, ces réseaux sont rarement utilisés à l'échelle des écosystèmes. Une des raisons réside dans la complexité de la manipulation numérique des abstractions métaboliques. Cette thèse surmonte cette lacune en utilisant des réseaux métaboliques associés à différentes stratégies d'optimisation pour modéliser les écosystèmes microbiens. Nous avons ainsi montré comment on pouvait modéliser l'écosystème microbien d'une masse d'eau à travers l'hypothèse du méta-organisme et de son

réseau métabolique, mettant en évidence le lien entre les bactéries hétérotrophes et l'activité photosynthétique. Ensuite, nous avons adapté le concept de niche écologique au formalisme métabolique, donnant lieu à l'abstraction de la niche métabolique. Cette nouvelle abstraction intègre les données omiques dans un contexte plus global : l'étude du phénotype métabolique d'un organisme et son impact sur et de son environnement. Enfin, nous avons utilisé la niche métabolique pour modéliser des organismes bien connus et simuler leur taux de croissance dans le contexte de modèles biogéochimiques océaniques, identifiant notamment des stratégies d'acclimation dédiées.

Title: Functional omic for modeling and understanding ecosystems in the context of marine microbiology

Keywords: Metabolic network, Microorganism, Genome-Scale Model, Earth System Model, Ecology

Abstract: While ecosystems have been mainly studied through macroscopic phenotypical observations, metabolic networks offer a way to model the system's phenotype based on its genetic description. However, metabolic networks are rarely used at the ecosystem scale. One of the reasons lies in the complexity of numerically manipulating metabolic abstractions. This thesis overcomes this shortcoming by using metabolic networks associated with different optimization strategies to study and model microbial ecosystems. We showed how one could study its phenotype by modeling the water mass's microbial ecosystem through one supra or-

ganism and its metabolic network. In particular, we could emphasize the link between heterotrophic bacteria and photosynthetic activity. Then, we adapted the seminal ecological niche concept to the metabolic computational framework resulting in the metabolic niche abstraction. This new abstraction integrates omic data into a more global context: the study of the metabolic phenotype of an organism and its impact on and of its environment. Finally, we used the metabolic niche to model well-known organisms and simulate their growth rate in the context of ocean biogeochemical models, identifying acclimation strategies.