

Modélisation et simulation de phénomènes naturels

Information Pratique 2023

- ▶ Cours : B Chopard, Jonas Latt, JL Falcone Battelle 404-407,
Ve 12h15-14h
- ▶ Assistants : Remy Petkantchin, Francesca Zucchelli
- ▶ Jour des exercices : vendredi 14h15-16h, Battelle 404-407,
- ▶ Examen : oral sans documents, 20min + 20min
- ▶ TP : 70% of presence is mandatory to take the exam
- ▶ Oral correction of TPs will bring a bonus (to be specified)
- ▶ Support de cours : copie des transparents, notes de cours,
articles, MOOC

Sommaire

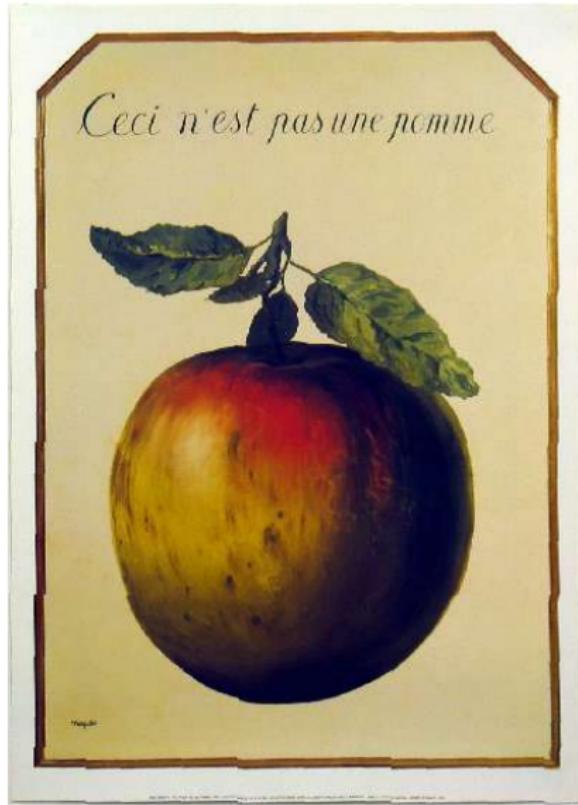
- ▶ Introduction, définitions
- ▶ Systèmes dynamiques, équations différentielles
- ▶ Systèmes multiagents
- ▶ Méthode de Monte-Carlo
- ▶ Complex networks
- ▶ systèmes à N corps, dynamiques moléculaire
- ▶ Automates cellulaires
- ▶ Modèle de Boltzmann sur réseau
- ▶ Simulation à événement discrets (DES)

Théorie, exemples, méthodes et implémentation (programmation informatique en python)

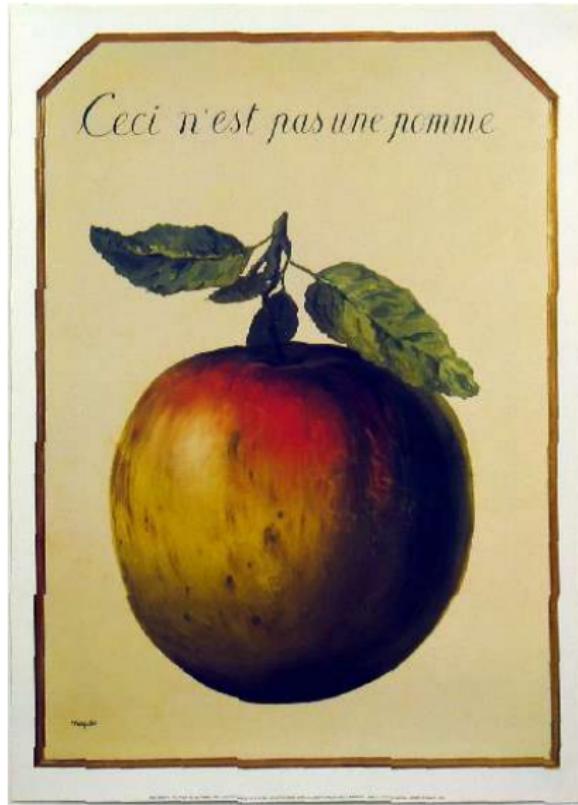
Chapitre 1 : Modélisation

Concepts, exemples et définitions

La pomme de Magritte



La pomme de Magritte



- Un modèle n'est qu'un modèle, jamais la réalité

1.1 Qu'est-ce qu'un model ?

Beaucoup de définitions existantes.

- ▶ Abstraction simplificatrice de la réalité, permettant de mieux appréhender cette réalité ; caricature de la réalité

1.1 Qu'est-ce qu'un model ?

Beaucoup de définitions existantes.

- ▶ Abstraction simplificatrice de la réalité, permettant de mieux apprécier cette réalité ; caricature de la réalité
- ▶ Dans laquelle on ne garde que ce qui paraît essentiel par rapport à ce qu'on veut voir.

1.1 Qu'est-ce qu'un model ?

Beaucoup de définitions existantes.

- ▶ Abstraction simplificatrice de la réalité, permettant de mieux appréhender cette réalité ; caricature de la réalité
- ▶ Dans laquelle on ne garde que ce qui paraît essentiel par rapport à ce qu'on veut voir.
- ▶ Pour certain, un fit de donnée est un modèle

1.1 Qu'est-ce qu'un model ?

Beaucoup de définitions existantes.

- ▶ Abstraction simplificatrice de la réalité, permettant de mieux appréhender cette réalité ; caricature de la réalité
- ▶ Dans laquelle on ne garde que ce qui paraît essentiel par rapport à ce qu'on veut voir.
- ▶ Pour certain, un fit de donnée est un modèle
- ▶ Modèle animal, statistique, data model...

1.1 Qu'est-ce qu'un model ?

Beaucoup de définitions existantes.

- ▶ Abstraction simplificatrice de la réalité, permettant de mieux appréhender cette réalité ; caricature de la réalité
- ▶ Dans laquelle on ne garde que ce qui paraît essentiel par rapport à ce qu'on veut voir.
- ▶ Pour certain, un fit de donnée est un modèle
- ▶ Modèle animal, statistique, data model...
- ▶ etc

Pour nous, modèle signifie

- ▶ Représentation d'un phénomène dans un langage mathématique ou «informatique»

Pour nous, modèle signifie

- ▶ Représentation d'un phénomène dans un langage mathématique ou «informatique»
- ▶ En d'autre termes, une forme de description théorique qui se prête à un traitement informatique

Pour nous, modèle signifie

- ▶ Représentation d'un phénomène dans un langage mathématique ou «informatique»
- ▶ En d'autre termes, une forme de description théorique qui se prête à un traitement informatique
- ▶ Un tel modèle doit expliciter le phénomène, en révéler les causes

Pour nous, modèle signifie

- ▶ Représentation d'un phénomène dans un langage mathématique ou «informatique»
- ▶ En d'autre termes, une forme de description théorique qui se prête à un traitement informatique
- ▶ Un tel modèle doit expliciter le phénomène, en révéler les causes
- ▶ Ce qui nous intéresse plus particulièrement c'est l'idée d'un «Univers virtuel informatique» qui reproduit numériquement (dans un ordinateur) un phénomène donné du monde réel.

Pour nous, modèle signifie

- ▶ Représentation d'un phénomène dans un langage mathématique ou «informatique»
- ▶ En d'autre termes, une forme de description théorique qui se prête à un traitement informatique
- ▶ Un tel modèle doit expliciter le phénomène, en révéler les causes
- ▶ Ce qui nous intéresse plus particulièrement c'est l'idée d'un «Univers virtuel informatique» qui reproduit numériquement (dans un ordinateur) un phénomène donné du monde réel.
- ▶ Sur lequel on peut faire des expériences «in-silico».

Pour nous, modèle signifie

- ▶ Représentation d'un phénomène dans un langage mathématique ou «informatique»
- ▶ En d'autre termes, une forme de description théorique qui se prête à un traitement informatique
- ▶ Un tel modèle doit expliciter le phénomène, en révéler les causes
- ▶ Ce qui nous intéresse plus particulièrement c'est l'idée d'un «Univers virtuel informatique» qui reproduit numériquement (dans un ordinateur) un phénomène donné du monde réel.
- ▶ Sur lequel on peut faire des expériences «in-silico».

Modélisation → Simulations

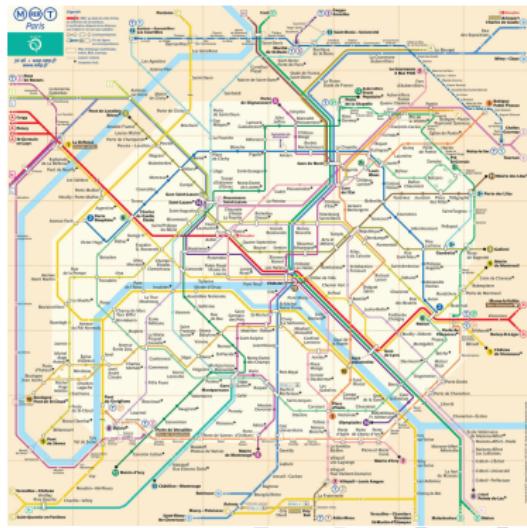


Pourquoi un modèle ?

- ▶ Décrire, classifier, mais surtout
- ▶ Comprendre,
- ▶ Prédire,
- ▶ Contrôler un phénomène

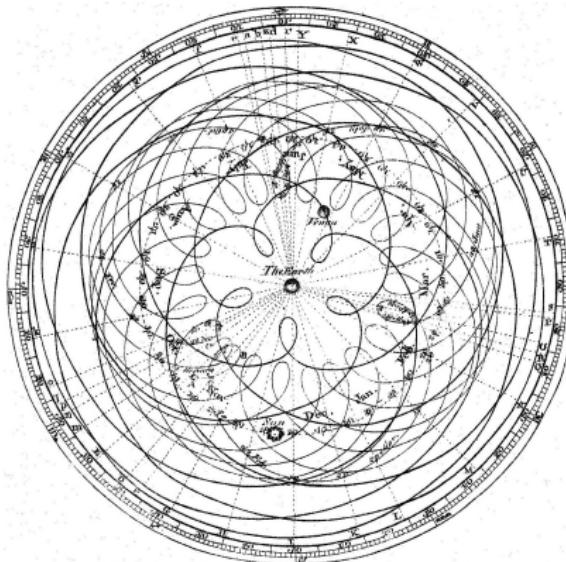
Quel est le bon modèle ?

Est-ce une représentation correcte du terrain ?



Quel est le bon modèle ?

Movement of planets in Ptolémée's model



A good model should be predictive. But also it can be generalized to other situations.

https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Cassini_apparent.jpg

Quel est le bon modèle ?

Le simple est toujours faux. Ce qui ne l'est pas est inutilisable.

Paul Valéry

Quel est le bon modèle ?

Tout dépend de la question qu'on se pose. Plusieurs modèle peuvent être nécessaires pour différentes facettes du même phénomène.

Everything should be made as simple as possible, but not simpler

A Einstein

- ▶ Descriptif, prédictif
- ▶ Peut être généralisé à de nouvelles situations,
- ▶ Basé sur des principes fondamentaux

Quel est le bon modèle ?

Un modèle, à défaut d'être correct, permet souvent de se poser les bonnes questions sur un système qu'on veut décrire, par la démarche même de formaliser les processus et leur interactions. Cela permet ainsi de proposer de nouvelles expériences qui augmentent la compréhension du système considéré.

What I cannot create, I do not understand

Richard Feynmann

Niveaux de réalité

Un même système existe à différentes échelles, et on n'utilise pas forcément la même méthode selon l'échelle considérée.

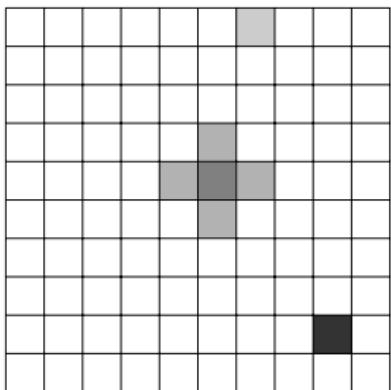
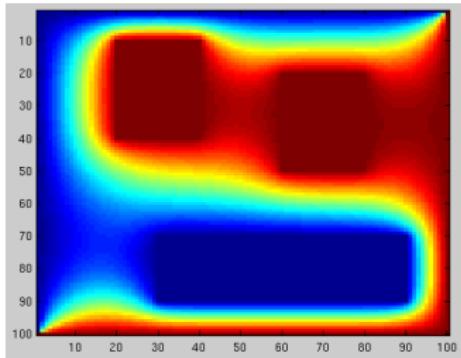
- ▶ atomes, molécules, éléments de fluids, champs de pression, climat
- ▶ cellules, tissus, organes, être vivants
- ▶ pièces mécaniques, voitures, trafic

Il faut identifier les ingrédients importants et leurs interactions.
Souvent, on considère un modèle à une échelle plus fine que l'échelle de la question qu'on se pose.

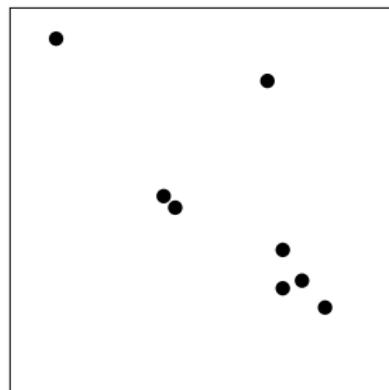
Espace et temps

- ▶ En général, on s'intéresse à des phénomènes dynamiques, avec extension spatiales : espace 1D-3D ou graphe (network).
- ▶ Approche Eulérienne : on est fixe dans l'espace : pression, température
- ▶ Approche Lagrangienne : on bouge avec les particules : trajectoire d'un avion
- ▶ Temps «continu», discréteisé par pas Δt
- ▶ Temps «discontinu», saut au prochain événement (événements discrets)

Modeling space

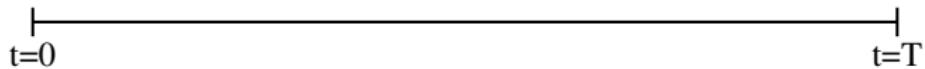


Eulerian point of view



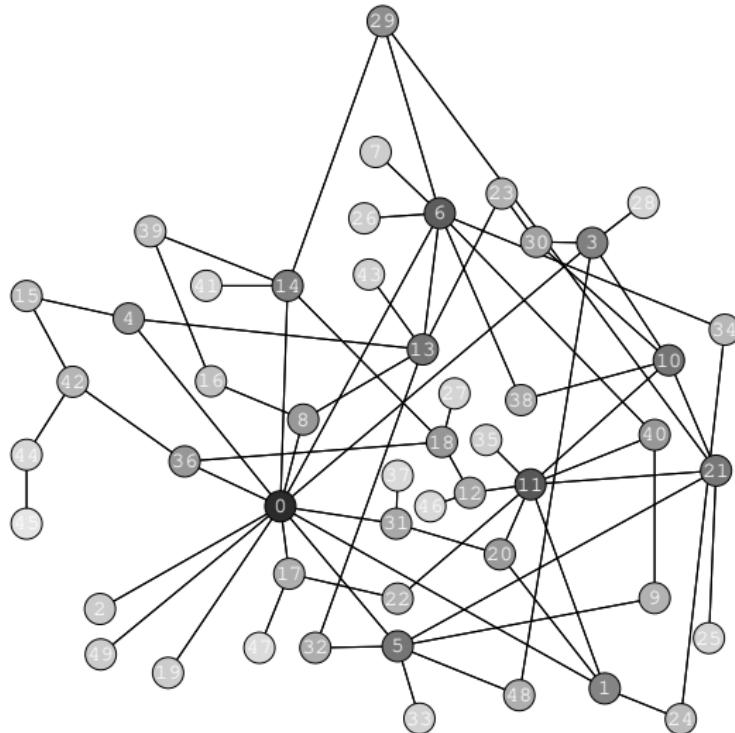
Lagrangian point of view

Modeling Time



Beyond the physical space : complex network

A model of opinion propagation in a social network



Plusieurs modèles / différents langages de description

Equations différentielles pour un fluide :

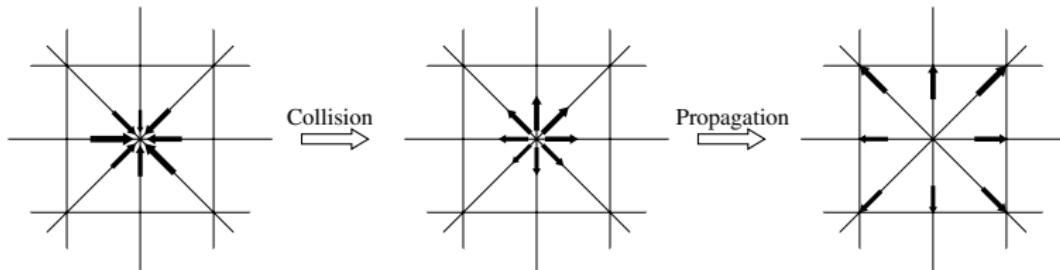
$$\partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u}$$

phénomène → Eq. diff. → discréatisation → solution informatique

...à des modèles virtuels de la réalité

On considère un univers discret en tant qu'abstraction du monde réel

phénomène → modèle informatique



- ▶ Règle mésoscopique décrivant le phénomène .

Il y a d'autres façons de modéliser un système de particules : MD, SPH, DSMC, stochastic rotations, DPD,....

Que peut on modéliser ?

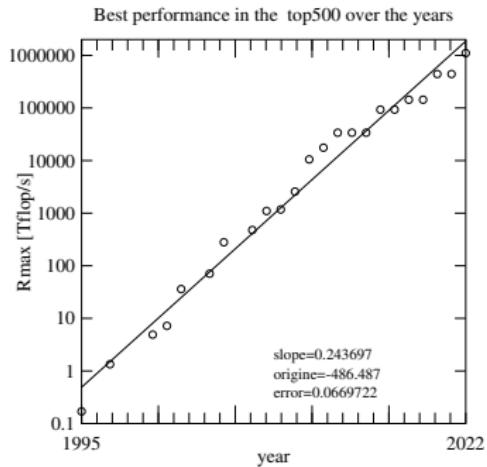
- ▶ Phénomènes naturels : écoulement d'un fluide, ([bulle](#)) fracture d'un objet, météo, climatologie,...
- ▶ Environnement : volcanologie ([Volcano plume](#)), energie ([Wave energy converter](#)) ...
- ▶ chimie, biologie (motif sur les animaux), cellules (system biology), ([Tissue growth](#))
- ▶ Phénomènes sociaux : trafic, mouvement de foule, processus de formation d'opinion, ...
- ▶ Des éco-systèmes : lutte contre les pucerons (*aphid*), équilibre forêt - savane, comportement des fourmis (cimetière)
- ▶ des marchés financiers, économiques
- ▶ Des organes, des phénomènes bio-médicaux
- ▶ ...

Spécialisation versus Intégration

- ▶ La modélisation est un mélange de compétences en math, informatique, physique, biologie, économie...
- ▶ Un des défi est l'«intégration» plutôt que la «spécialisation». *Les problèmes réels ne s'accomodent pas toujours des divisions imposées par le système académique.*

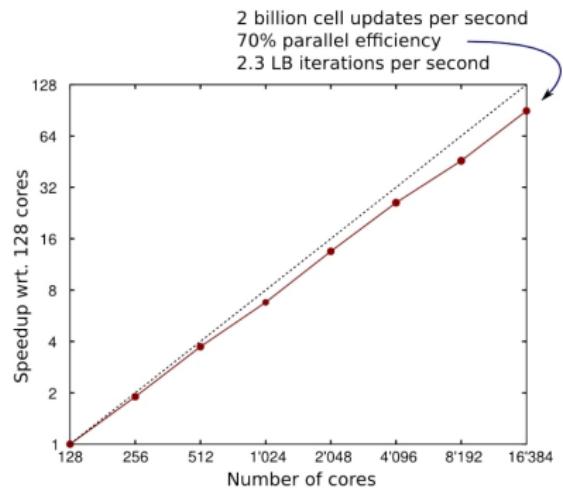
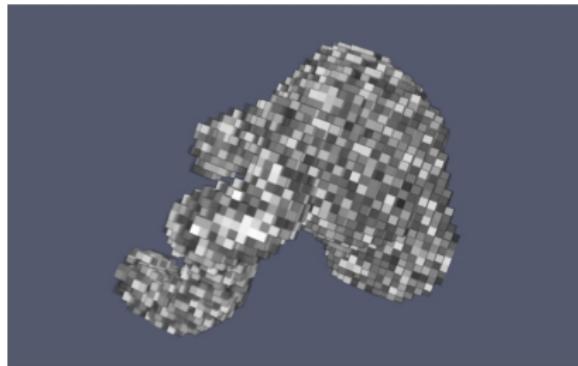
1.2 Simulations : From laptop to High Performance Computing

- ▶ Certains calculs demandent des ressources exceptionnelles : contrainte de temps, ou de mémoire
- ▶ HPC : entre 100 et 1 million de coeurs qui collaborent à la résolution du même problème.



A calculation on 16384 processors

A segmented aneurysm with 900 millions of fluid nodes.



The geometry of the aneurysm is covered by 65'336 regular cubic volumes of size 25^3

1.3 Les systèmes de Lindenmayer (1968)

L-systems

- ▶ Modèle de croissance de plantes, avec accent mis sur les aspects visuels
- ▶ Basé sur des règles de réécriture
- ▶ On produit un objet complexe par remplacement successif des symboles qui le constitue
- ▶ Règles de production parallèles

Règles de production : un exemple

Liste de symboles : a, b, c, d, k

$a \rightarrow cbc, \quad b \rightarrow dad, \quad c \rightarrow k, \quad d \rightarrow a, \quad k \rightarrow k$

Génération	Objet produit
1	a
2	cbc
3	kdadk
4	kacbcak
5	kcbckdadkcck
6	kkdadkkacbcakkdadkk

Exemples de L-systems

(*P. Prusinkiewicz & A. Lindenmayer
The Algorithmic Beauty of Plants*)

- ▶ Le flocon de neige
- ▶ Structures ramifiées

Le flocon de neige

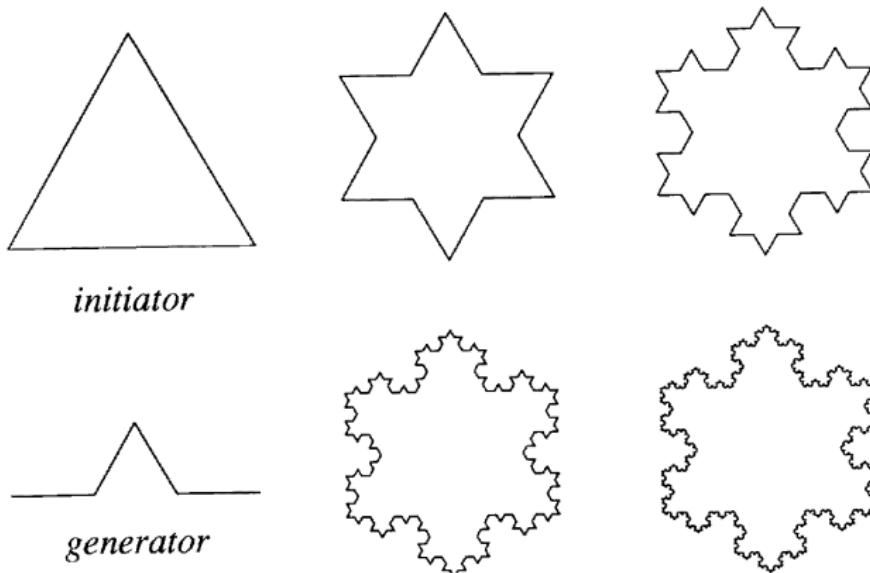


Figure 1.1: Construction of the snowflake curve

Mouvements

The state is (x, y, α)

- ▶ F : Move forward a step of length d . The state changes to (x', y', α) , where $x' = x + d \cos(\alpha)$ and $y' = y + d \sin(\alpha)$. A line segment between points (x, y) and (x', y') is drawn.
- ▶ + : Turn left by angle β . The next state is $(x, y, \alpha + \beta)$.
- ▶ - : Turn left by angle β . The next state is $(x, y, \alpha - \beta)$.
- ▶ [corresponds to saving the current values for position and angle, which are restored when the corresponding] is executed.
- ▶ X has no drawing action (no op), but is useful to build more complex production rules.

Arbres



a
 $n=5, \delta=25.7^\circ$
 F
 $F \rightarrow F [+F] F [-F] F$



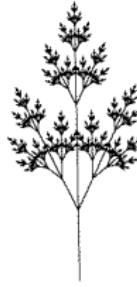
b
 $n=5, \delta=20^\circ$
 F
 $F \rightarrow F [+F] F [-F] [F]$



c
 $n=4, \delta=22.5^\circ$
 F
 $F \rightarrow FF - [-F+F+F] +$
 $[+F-F-F]$



d
 $n=7, \delta=20^\circ$
 X
 $X \rightarrow F [+X] F [-X] +X$
 $F \rightarrow FF$



e
 $n=7, \delta=25.7^\circ$
 X
 $X \rightarrow F [+X] [-X] FX$
 $F \rightarrow FF$



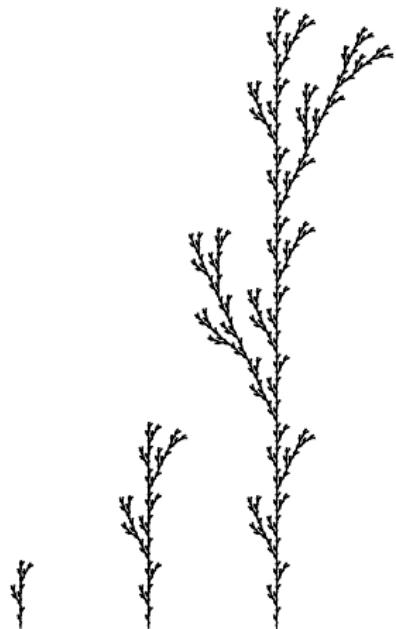
f
 $n=5, \delta=22.5^\circ$
 X
 $X \rightarrow F - ([X] + X) + F [+FX] - X$
 $F \rightarrow FF$

Qu'est-ce que cela modélise ?

Cas $F \rightarrow F[+F]F[-F]F$, $\beta = 25^\circ$.

```
F [+ F] F [- F] F [+ F [+ F] F [-  
F] F] F [+ F] F [- F] F [- F [+ F]  
F [- F] F] F [+ F] F [- F] F [+ F [  
+ F] F [- F] F [+ F [+ F] F [- F]  
F] F [+ F] F [- F] F [- F [+ F] F [  
- F] F] F [+ F] F [- F] F] F [+ F]  
F [- F] F [+ F [+ F] F [- F] F] F [  
+ F] F [- F] F [- F [+ F] F [- F]  
F] F [+ F] F [- F] F [- F [+ F] F [  
- F] F] F [+ F [+ F] F [- F] F] F [+  
F] F [- F] F [- F [+ F] F [- F] F]  
F [+ F] F [- F] F] F [+ F] F [- F]  
F [+ F [+ F] F [- F] F] F [+ F] F [  
- F] F [- F [+ F] F [- F] F] F [+  
F] F [- F]
```

Code pour 3 itérations

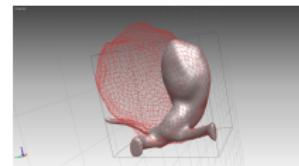
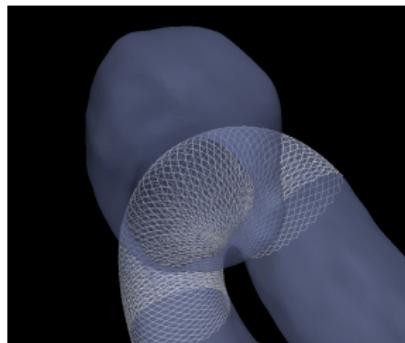
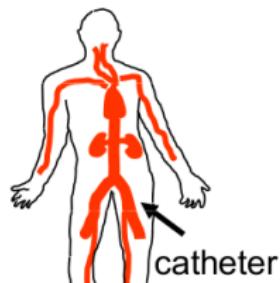
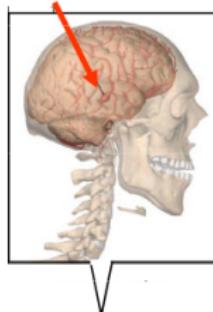


Itérations 3,4 et 5

1.4 Exemple : Thrombosis in cerebral aneurysms



aneurysm dcond/encyclopedia/1841.html

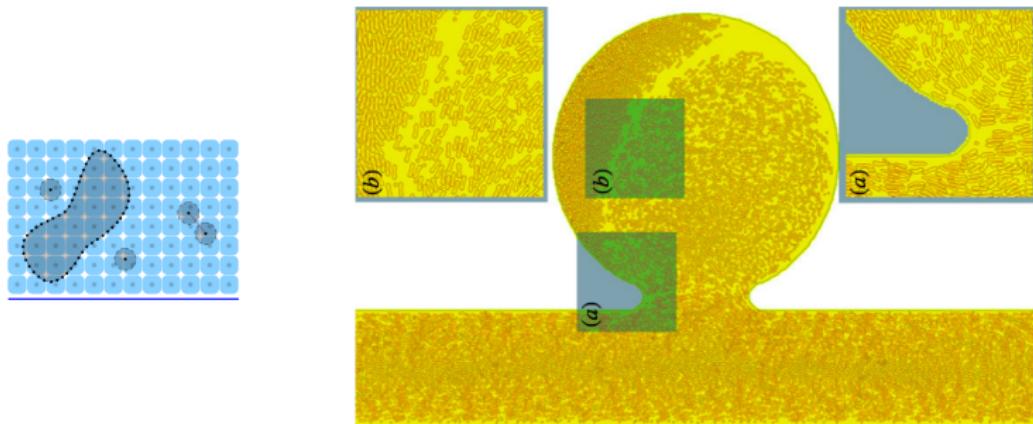


- ▶ The stent reduces bloodflow in the aneurysm
- ▶ Clotting is induced in the aneurysm

Goal : elucidate the mechanisms leading to thrombus formation from biological knowledge and numerical modeling

Where do platelets go ? “Fully resolved” blood flow

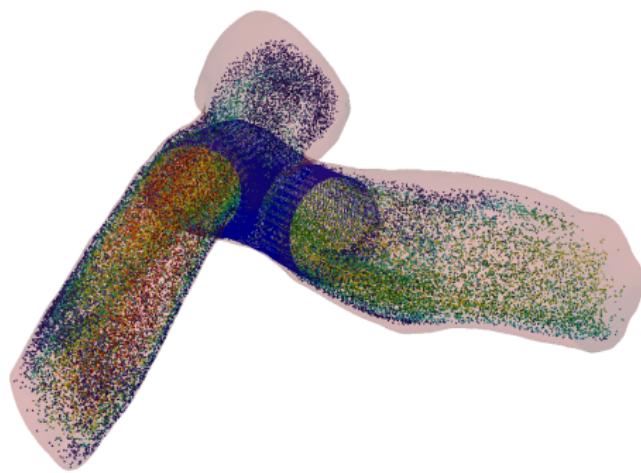
2D model



- ▶ 3D red blood cells (1)
- ▶ 3D red blood cells (2)
- ▶ 3D red blood cells (3)



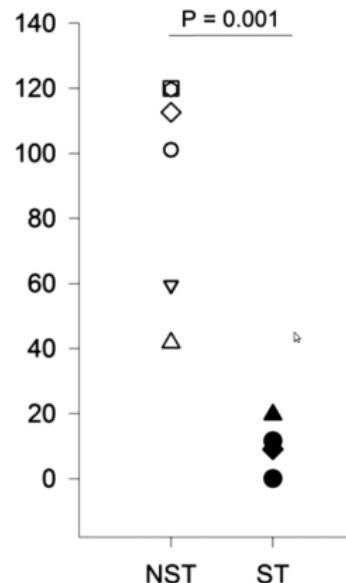
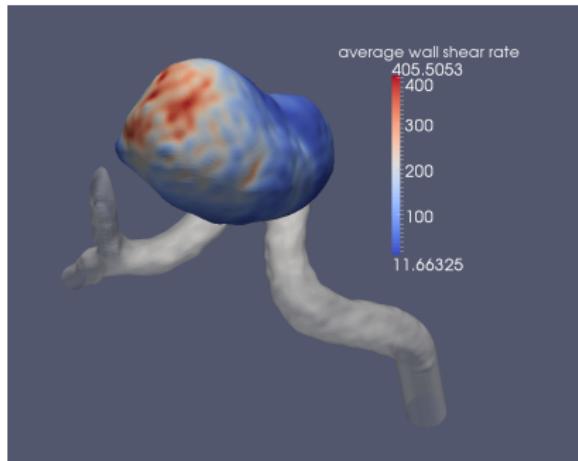
“Simplified” Flow simulation in an aneurysm



Newtonian Fluid with point particles in suspension

Threshold value for the wall shear rate (WSR)

J NeurolIntervent. Surg. 2015, 011737



Computer simulations of bloodflow in several patients reveal that thrombus forms if the average WSR is smaller than 30 s^{-1} .

Numerical Model of Clotting

- ▶ At low shear rate, endothelium dysfunctions. It emits pro-coagulant molecules (Tissue Factor → Thrombin).
- ▶ If these pro-coagulant molecules are numerous enough, they transform fibrinogen into fibrin
- ▶ The thrombus starts
- ▶ It grows as long as shear rate remains small
- ▶ And the fluid region shrinks (generating new flow conditions).

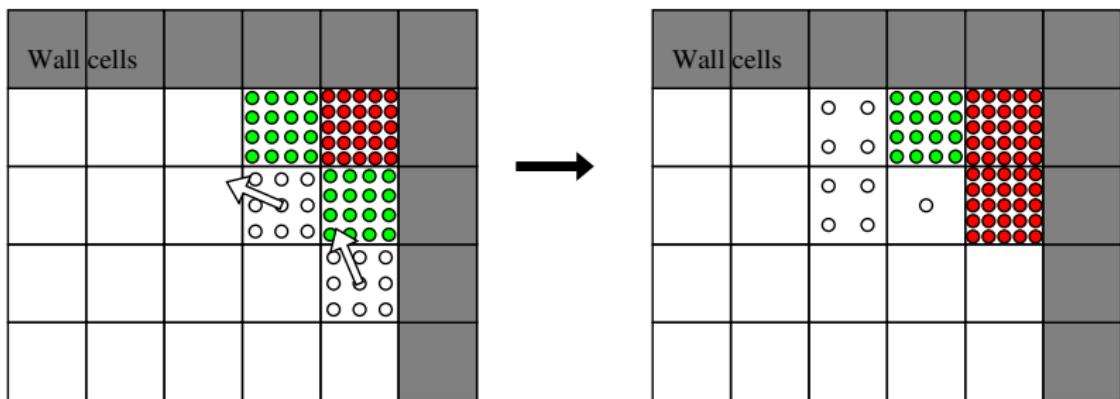
R. Ouared & B. Chopard, *J. Stat. Phys.*, Vol 121, 209-221, (2005)

R. Ouared, B. Chopard & D. Ruefenacht, *Math. and Comp. in Simul.*, Vol 72, 108-112, (2006)

Orestis Malaspinas et al.. *J. of Theoretica Biology*, vol 394, p 68-76, (2016)

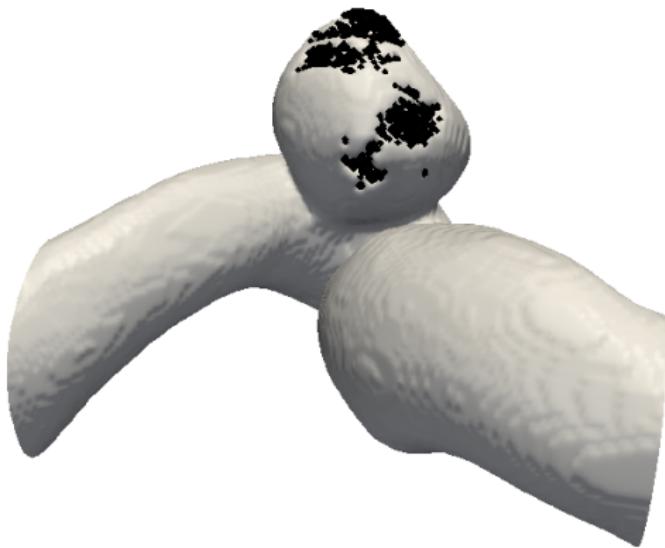
Explicit modeling of blood particles

Adhesion & Aggregation (clotting)



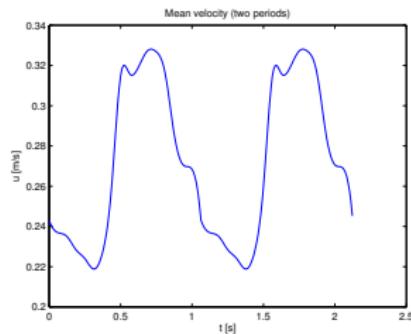
- clotted region
- blood particle in low shear rate regions
- blood particle in high shear rate regions

LB Simulation of the clotted volume

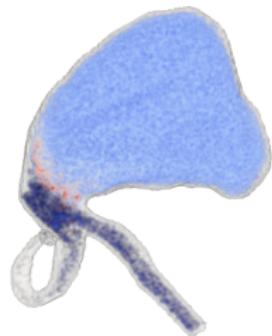


Pulsatile versus steady flow

Simulation of the thrombus in giant aneurysm



- ▶ [movie](#)
- ▶ accelerated for 2200 heart cycles



ν	ρ	inlet diam.	aneurysm size	inlet flow
$3.7 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$	1080 kg/m^3	0.8 mm	8 cm	$4 \times 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$

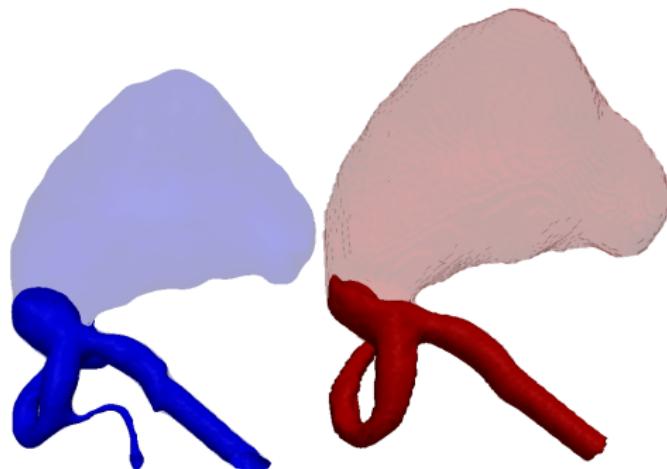
Qualitative validation

As observed in giant aneurysms, the simulation shows

- ▶ Partial or total aneurysm thrombosis,
- ▶ or parent artery occlusion
- ▶ Threshold in the value of the aspect ratio
- ▶ Onion skin structure

Blue : patient

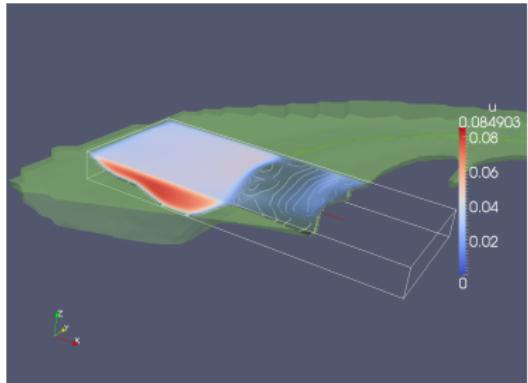
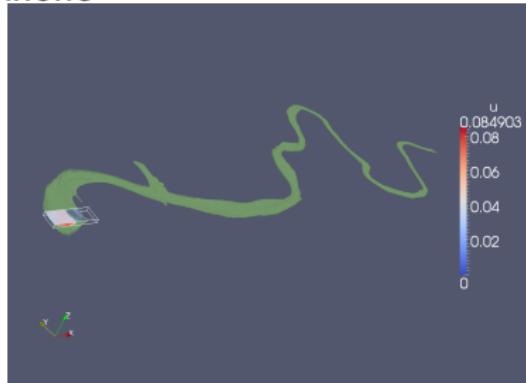
Red : simulation



[movie](#)

1.5 Simulation of the Rhône river

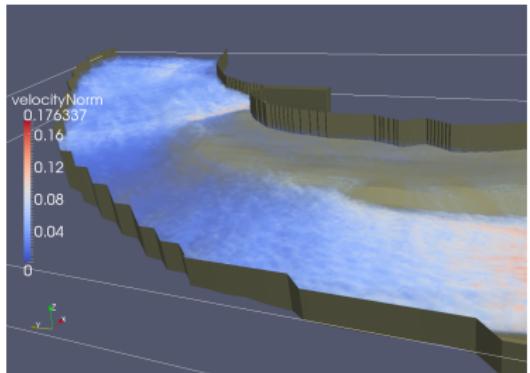
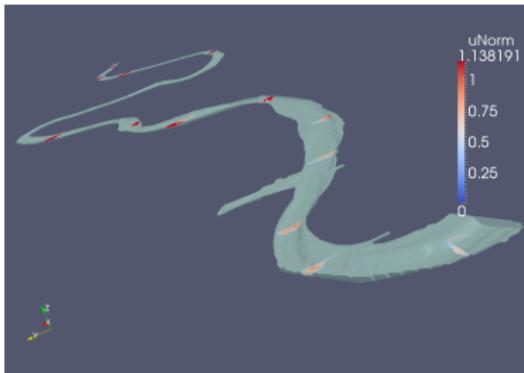
Investigate the possibility to predict sediment transport in the Rhône



Rhone vitesse

A collaboration with SIG (Services Industriels de Genève) +
MAPPER European project.

Global and local models



- ▶ Global model : 90 sec of water flow, 50 cm resolution, 12 km $\text{Re}=10^6$ requires 1 hour of CPU on 120 cores
- ▶ Local model (free surface) : 60 sec of water flow, 20 cm resolution, 200 m long : 1 hour of CPU on 120 cores

vidange

remplissage

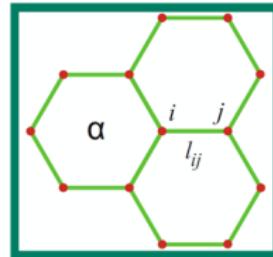
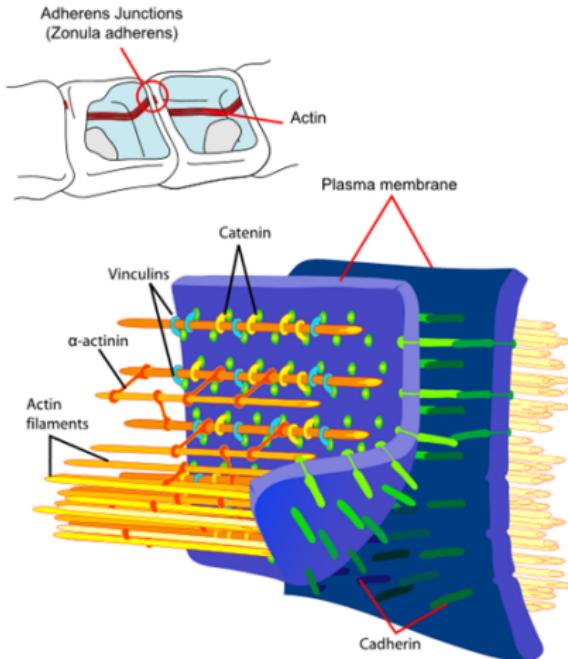
erosion

Verbois

(Simulations : J. Latt, A. Parmigiani et Y. Thorimbert)

1.6 Modèles de tissus épithélial

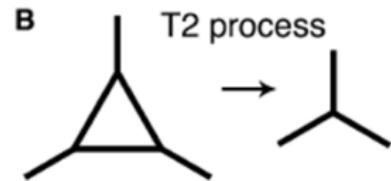
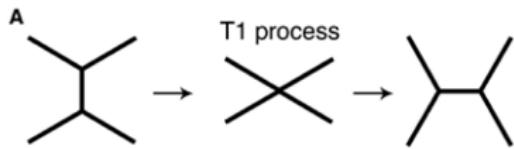
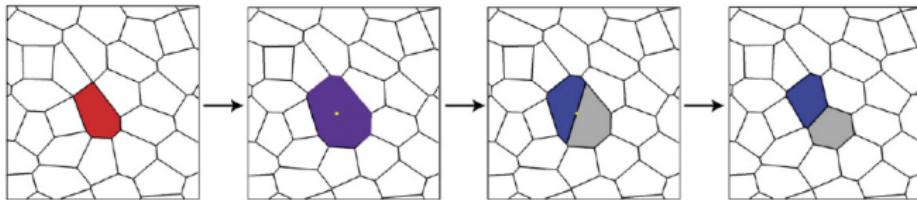
Cells are represented as polygons (vertex models)



Tissue energy :

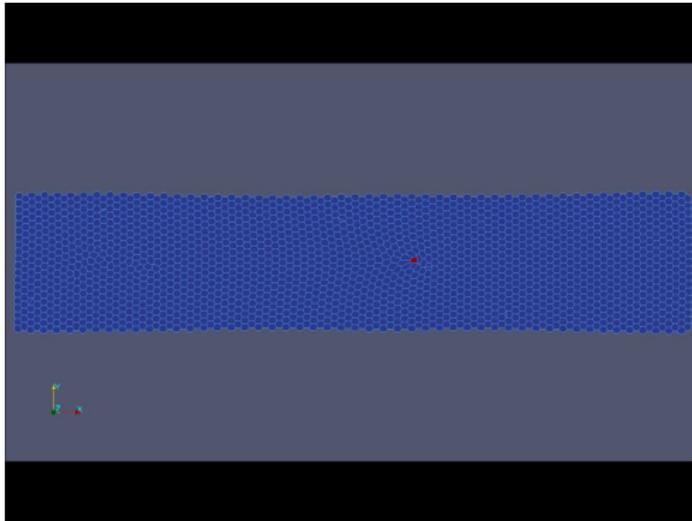
$$\begin{aligned} E = & \frac{1}{2} \sum_{\alpha} K_{\alpha} (A_{\alpha} - A_{\alpha}^0) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \Gamma_{\alpha} L_{\alpha} \\ & + \sum_{\text{edge}(i,j)} \Lambda_{ij} l_{ij} \quad (1) \end{aligned}$$

Cell division

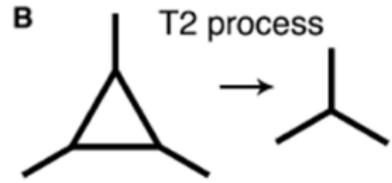
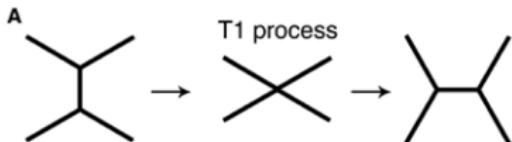


- ▶ Tissue growth
- ▶ Tissue growth with constraints

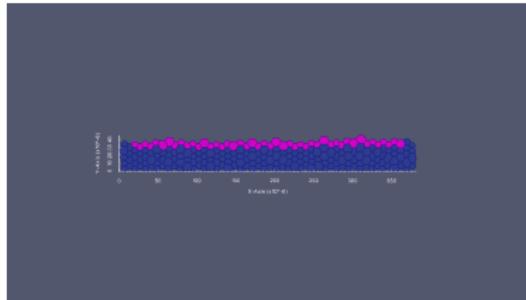
Cells motion in the tissue



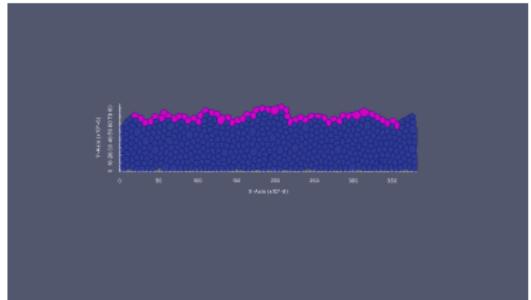
- ▶ Cell subject to a force $F = 1 \times 10^{-7}$ Newton
- ▶ $F = 2 \times 10^{-7}$ Newton



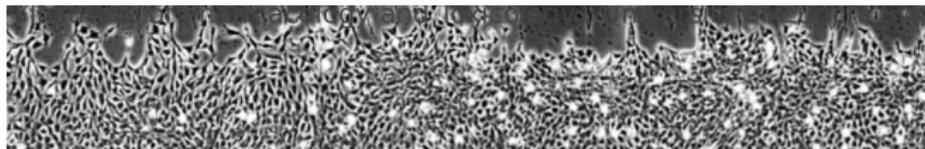
Study of the growth of a cell interface



time=40,000

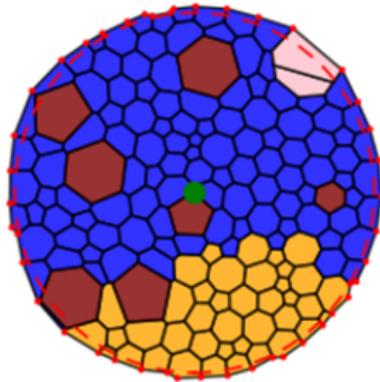
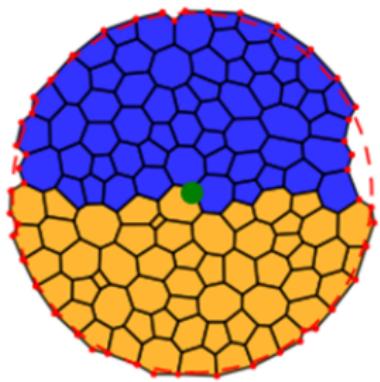


time=240,000



With G. Rapin and P. Paruch, Physics department, University of Geneva

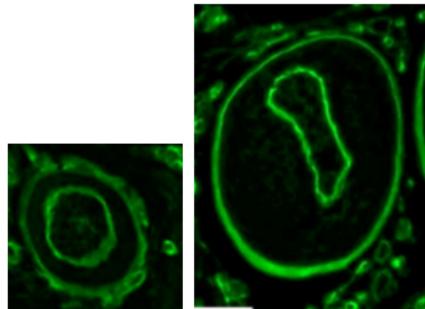
Model for Cell-cell competition



With M. Milinkovitch et al, Biology Department, University of Geneva

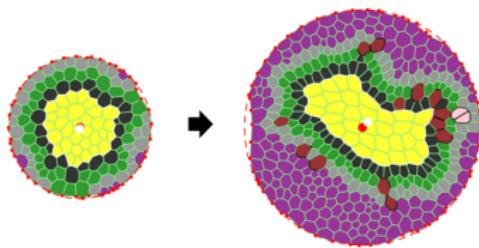
Follicles in the spiny hair mouse

Dermal papilla evolves in a non-circular shape



Observation

Number of Cell Divisions = 0.0, T1 = 0.0 Number of Cell Divisions = 251.0, T1 = 15.0



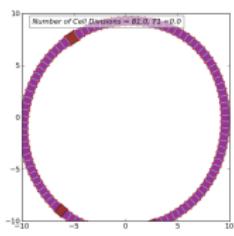
simulation



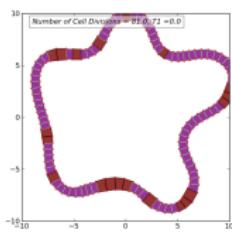
Depending on the proliferation rate and signalling parameter, the dermal papilla evolves to a circular shape (regular mouse) or flat shape (acomys).

Instabilities in tissue growth (bucking)

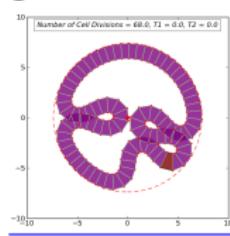
slow growth rate



fast growth rate



slow,
growth



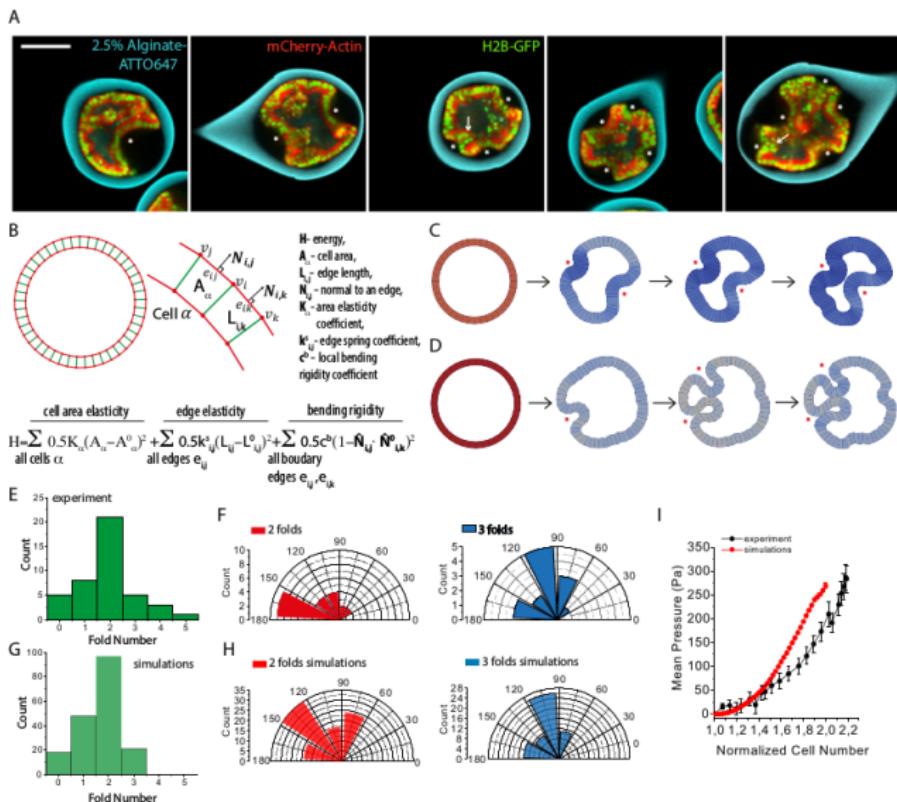
constraint

Aziza Merzouki, Orestis Malaspinas, Aanastasiya Trushko, Aurélien Roux and Bastien Chopard.

Influence of cell mechanics and proliferation on the buckling of simulated tissues using a vertex model.

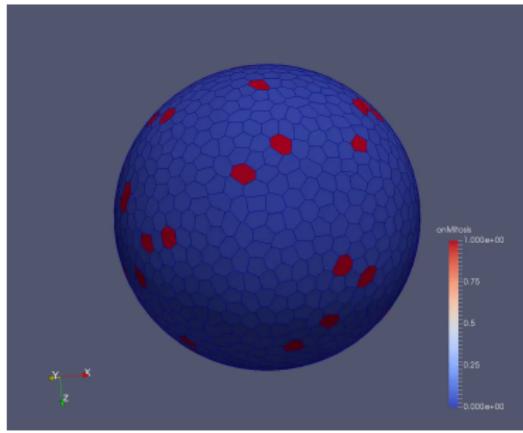
NACO, 2017, under revision.

Instabilities in tissue growth : experiments versus simulations

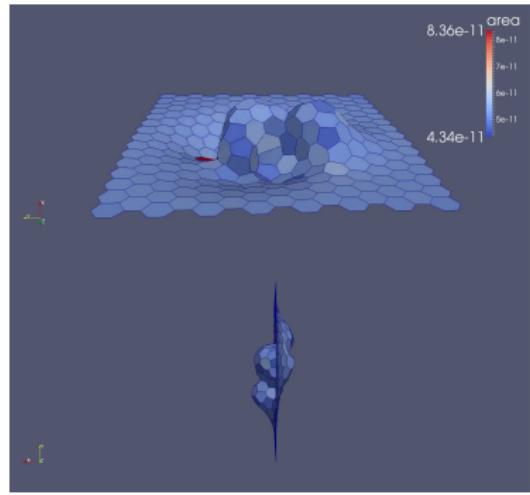


(Experiment : A. Roux et al. UNIGE)

Tissue models in 3D



(Jayro Aldaz, master student)



1.7 Lutte Biologique : puceron-guêpe-concombre (aphid-wasp-cucumber)

(Travail de J. Cox (UNIGE) En collaboration avec la station
Agronomique de Changin, 1997)



Le problème

Problème :

- ▶ Les pucerons mangent les feuilles de concombres.
- ▶ Les guêpes tuent les pucerons (en y pondant leurs oeufs)
- ▶ Comprendre ce qu'il se passe ; optimiser les paramètres contrôlables.



Entités à modéliser (système multiagents)

- ▶ Les concombres
- ▶ Les pucerons
- ▶ Les guêpes
- ▶ la serre
- ▶ Comment simuler ce système sur un ordinateur ?
- ▶ Représenter chaque «point d'espace» et les entités qui s'y trouvent.
- ▶ Chaque individu est représenté.
- ▶ Règles de comportement probabilistes, qui permet de définir une moyenne et un écart type.

Dynamique de individus (règle du jeu)

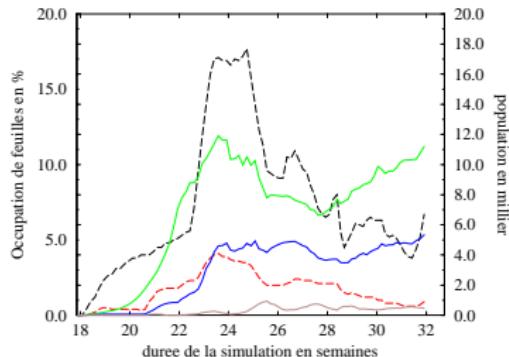
- ▶ taux de croissance des concombre
- ▶ taux de reproduction des pucerons/guêpes
- ▶ âges de reproduction, temps de gestation
- ▶ les pucerons parasités (=momies) pondent moins ou pas du tout
- ▶ les guêpes ne pondent pas dans un pucerons déjà touché
- ▶ les larves de guêpes n'éclosent pas si le puceron est trop agé.
- ▶ mouvement des pucerons/guêpes (insectes ailés si surpopulation), taux d'entrée dans la serre.
- ▶ Effets de la température (sur le développement des insectes)

Questions

- ▶ “Mode de production” des guêpes : plante banque ou lâchers ?
- ▶ Périodes de lâcher (1 ou plusieurs) ?
- ▶ Quantités ?
- ▶ Pourcentage de feuilles de concombre attaquée à la récolte
- ▶ Nb de pucerons/guêpes au cours des semaines

Résultat des simulations (1)

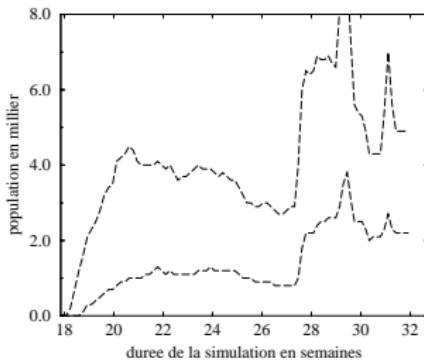
Évolutions des individus dans le temps



- ▶ taux d'occupation des feuilles par les pucerons en % (black)
- ▶ taux d'occupation des feuilles par les momies en % (red)
- ▶ Nb de pucerons (green)
- ▶ Nb de guêpes (blue)
- ▶ Nb de momies (braun)

Résultat des simulations (2)

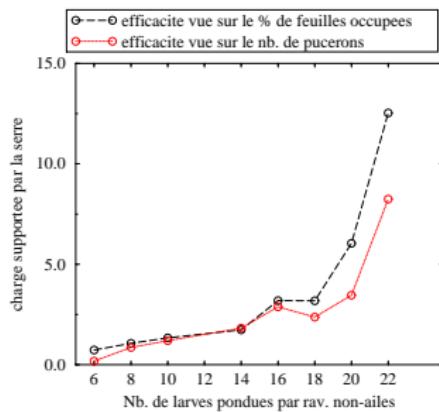
Nb de pucerons avec deux méthodes de comptage



- ▶ Nb total de pucerons
- ▶ Nb de pucerons déduit du nombre de feuilles parasitée (mode de comptage sur le terrain)

Résultats (3)

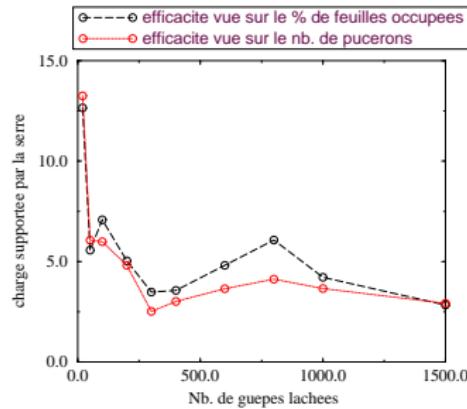
Paramètre critique : Taux de ponte des pucerons



On voit de la simulation qu'il est important de bien connaître le taux de ponte des pucerons. Les dégâts sur la récolte en dépend brutalement.

Résultats (4)

Effet critique :
Nb de guêpes introduites
(10 jours après l'entrée des pucerons)



Il faut lâcher assez de guêpes, mais pas la peine d'en mettre trop (coût inutilement élevé).