

Exploration methods for simulation models

Juste Raimbault et Denise Pumain

Abstract

We recall first in this chapter to what extent simulation models are an absolute necessity in social sciences and humanities, which can only very exceptionally require to experimental sciences methods to construct their knowledge. Models open the perspective to simulate social processes by replacing the complex interplay of individual and collective actions and reactions to the situations they make emerge by simpler mathematical or computational mechanisms, fostering an easier understanding of the relations between causes and consequences of these interactions and to make predictions. The formalisation through mathematical models able to offer analytical solutions being most often not possible in order to provide satisfying representations of social complexity (Jensen, 2018), computational models based on agents are more and more used. For long the limited computational capabilities of computer have forbidden to program models taking into account interactions between large numbers of entities geographically localized (individuals or territories). In principle these models should inform on the possibilities and conditions of the emergence of given configurations defined at a macro-geographical level from interactions occurring at a micro-geographical level, within systems with a too much complex behavior to be understood by a human brain. This however requires to study the dynamical behavior of these models including non-linear feedback effects and verify they produce plausible results at all stages of their simulation. This necessary stage of the exploration of the dynamics of algorithms remained rather rudimentary until the end of the last decade, when algorithms including more sophisticated methods such as evolutionary computation and the use of distributed high performance computing have allowed a significant qualitative leap forward in the validation of models, and even an epistemological turn for social sciences and humanities, as suggest the latest applications realized with the OpenMOLE platform described here.

1 Social sciences and experimentation

Experimentation played a significant role in the construction of natural sciences, since it consists in simulating material, physical, chemical or biological processes, through the use of apparatus imagined by researchers to select, often by isolating them, chains of facts that are simpler than the ones occurring in a complex reality. The confrontation of results of these experiments to observational data, partly or totally foreign to the data used to construct the experimental apparatus, is considered as bringing a proof of truth or of accuracy of the explicative reasoning at the basis of the model construction, more or less robust depending on the quality of the fit between model predictions and observations. We however know that the accuracy of a model predictions is not sufficient to fully validate the correspondance between the explicative mechanism imagined by the builders of the experimental apparatus and processes at work in the studied system, but this remains a crucial stage in the construction of models and theories enriched by observations.

In social sciences and humanities, the elaboration of experimental apparatus is highly problematic since it is confronted to numerous practical and ethical obstacles. Ethical and political critic questions the manipulation of individuals and the usurpation of their freedom. These concerns which are typical of the scientific ontology and deontology (being part of what is nowadays called integrity) have surely not avoided in practice manipulations, in a positive way or not, operated during historical times by actors with a political, cultural or economical power to make decisions which were more or less well informed “scientifically” (see at all historical periods writings by “counsellors of the prince” such as Bodin, Machiavel, Botero, etc. to give a few among the ones having dealt with the planning of territories) and to proceed to “experiments” of governance structures or of technological or cultural innovations which results could be evaluated in some case as beneficial and in others as catastrophic. The evaluation of the efficacy of decisions complicates because of the justifications brought by the actors themselves with their “self-fulfilling prophecies” (). The often recalled difficulty of the evaluation of public policies is also increased by the uncertainty in the limits between the action and its context, both in space and in time.

Driving change in social systems, whatever the scale of interventions, remains a costly and risky operation, therefore difficultly acceptable by science for deontological concerns. Very few scientists therefore engage in “research-action” projects. A controversy has thus opposed in the sixties in France the advocates of an “applied geography”

with a good knowledge of the “field” but sometimes with conservative trends, to the defenders of an “active geography” which would be more implied in the transformation of society. Sometimes, for example to contribute to the definition of policies for balancing metropolitan areas in France (operation by the *Délégation l’Aménagement du Territoire et l’Action Régionale* in 1964), geographers participating in the studies such as Michel Rochefort more particularly, did rely on scientific works, without having the courage to make it explicitly open (in this specific case central place theory by Walter Christaller). Contemporary geographers are less reluctant to exhibit a concern to help decision making in the most informed way possible given the state of their knowledge. They often then make the choice to use simulation models operated in silico by computers. Computer simulation thus became a substitute to experimentation. It is not a coincidence if among researchers in social sciences, geographers have very early found an interest in it: the diversity of multiple data sources (landscapes, populations, built environment, etc.) which they use to account of modifications of terrestrial interfaces by societies, the often large spatial extent of territories they study at the regional, national, or global scales, explain their need to make use of computing to organize this large quantities of information and to understand the dynamics they represent.

2 Geographical data and computational capabilities

The first simulation models in geography were firstly computed “by hand” in the fifties. It is not a coincidence if these models all deal with stylized facts which translate the regularities most frequently observed in the organisation of social space, and which are consequences of the “first law of geography” summarized as such already in 1970 by the American geographer Waldo Tobler: “everything interacts with everything, but two closer things have more chances to make contact than two more distant things”. The power of attraction by proximity occurs in all social processes transforming the social space, which are constrained by an “obligation of space”. This term was forged by Henri Reymond already in 1971 in a formalisation of issues in geography, who stated as first principle that societies have the tendency to transform the surface of the Earth which is heterogeneous, rough and discontinuous, in an organized space exhibiting higher homogeneity and continuity, and making regularities emerge, due to the fact that two objects can not occupy the same place. Stating that individuals and societies have the highest probability to choose occupying the closest locations, both because these are better known and also because they yield economies on costs (physical, financial, and cultural) to travel the distance, may certainly be the strongest theoretical proposal of geography. It can be identified in any spatial configuration implying to distinguish a center and a periphery, which are observed at any level of the geographical space, from the local to the global.

The first simulation models in geography have thus dealt with processes for which the choice of the closest, among the place with which an interaction is expected, is a highly salient anthropological constant, either to observe the effects of an innovation before imitating it, according to the spatial theory of the diffusion of innovations by Torsten , or for the choice of destination places for a migration (). Models already in 1954 rely on the proposal by the American geographer Edward Ullman to construct a geography as the science of spatial interactions. This concerns more particularly trade relations, which have first lead to the empirical test of statistical models, as the so-called “gravity model”, before being integrated into urban models which were first static () and then dynamical ().

A later generation of models playing in a more complex way with effects of proximity has intensively used cellular automata. Measures of spatial auto-correlation, which translate in a positive or negative way attraction or concurrency effects linked to proximity are in that context used to test the plausibility of simulated configurations for land-use changes, and in particular urban growth (), or moreover the spread of epidemics in the geographical space (Cliff et al., 2004).

But the development of these models has been very early impeded by the computational capabilities at this time, since the explicit representation of spatial interactions increases as the square of the number of geographical units considered. Therefore, the statistician Christophe Terrier had to segment his Mirabelle program (*Méthode Informatisée de Recherche et d’Analyse des Bassins par l’Etude des Liaisons Logement-Emploi*) processing household survey data provided by INSEE in 1975 before being able to simulate the clustering into employment centers of resident populations as a function of work-residence commuting between all 36,000 French communes (). Our first simulation model of interactions between cities aimed at reproducing their demographic and economic trajectories influenced by urban functions on a period of 2000 years could only accept a maximum of 400 cities on a personal computer (Bura et al., 1996) (). The increase of computational possibilities has been relatively slow, allowing to consider around one thousand cities in 2007 with the Eurosims model () or the Simpop2 models applied by Anne Bretagnolle on Europe and United States (Bretagnolle and Pumain, 2010). Furthermore, the experimentation method with these models stayed at an experimental stage for long, requiring an increased attention in the modification “by hand” of parameter values, which are only very rarely directly observable, and which thus must be estimated through

the plausibility of model dynamics. However, equations for urban dynamics models integrate non-linear relations which produce numerous bifurcations, forcing to laborious trial-and-error loops in the estimation procedure (). This consequent work limits the number of simulations from which the estimation obtained can be judged as satisfying, and more importantly once the model is therein calibrated, there remains a relatively high uncertainty regarding the quality of results obtained.

3 A new generation of simulations

The end of the nineties was to modify completely the working environment of researchers, the diffusion of internet and then mobile phones and finally of massive data produced by diverse numerical sensors having in return rapid and intense effects on the increase of computational power which had allowed these disruptive technological innovations. Simulation models can then integrate considerable quantities of interactions between localized entities characterized by a large diversity of attributes. Still fifteen years ago, was forced to conclude that network analysis in the case of the Parisian transportation network were “limited by computation”. To give a single example of the quantitative leap forward in the increase of computational capabilities and their consequences on the higher confidence given to the models in consequence, we can mention the pioneering work in numerical epidemiology realized by Eubank et al. (2004) to simulate through the EpiSims and TRANSIMS models the daily trajectories on a transportation network of commuting of a million and a half individuals between around 180,000 places in the virtual city of Portland, in order to predict transmission pathways of an epidemics starting from interpersonal meeting probabilities in social networks organized as “small worlds”. The epidemics can rapidly propagate to the whole city despite the number of contacts by individual remain low (fifteen in maximum (Eliot and Daudé, 2006)).

Simulation platforms are elaborated such that the largest number of researchers even not specialized in computer science can elaborate agent-based models. NetLogo () is amongst the most famous. It is generic and allows to access multi-agent simulations without a deep knowledge in algorithmics, thanks to its simple programming language and the integrated builder of graphic user interface. Other platforms which are more specialized such as GAMA (Grignard et al., 2013) are immediately elaborated to propose a coupling with geographic information systems. However, the confidence in results obtained from simulation models goes along with an increase in the size and the number of experiments required, i.e. of the amplitude of numerical experiments. Despite the fact that these platforms integrate basic tools for a first step towards such a change in scale, a need for a dedicated “meta-platform” has naturally emerged.

3.1 A virtual laboratory: the OpenMOLE platform

Since 2008, the OpenMOLE software has been conceived to explore the dynamics of multi-agent models (). It inherits from the development of a previous software SimExplorer () which already provided to users an ergonomic interface for the conception of experience plans and gave access to distributed computing. OpenMOLE (<https://openmole.org/>) is a collaborative modeling tool in constant evolution: “*a permanent effort for genericity has allowed to realize in a few years a pragmatic, generic, and proofed platform for the exploration of models of complex systems under the form of a dedicated language, both graphical and textual, exposing consistent blocks at the appropriated level of abstraction for the design of numerical experiments distributed on simulation models*” ().

Procedures (or workflows) proposed in OpenMOLE are described in a manner independent from the models and are thus reproducible, reusable and exchangeable between modelers. A market place is integrated to the software, similarly to the model library included in NetLogo, and allows users to collect exploration scripts that can act as template or example, in highly diverse thematic fields and for all methods and languages implemented in OpenMOLE (for example for the thematic fields calibration of geographical models, analysis of biological networks, image processing for neurosciences).

It is useful to mention the use by OpenMOLE of a Domain Specific Language (DSL) () to write exploration workflows. This practice consists in the construction of a notation and rules specific to the domain of a given problem. It is in a way a programming language dedicated in that case to model exploration and associated methods. This language is naturally not created from scratch, but comes as an extension of the underlying language, i.e. the Scala language in the case of OpenMOLE. A reduced number of keywords and primitives fosters an easier use even for a user with no knowledge in programming, and furthermore the DSL remains highly flexible for the advanced user who can use Scala programming. According to , the DSL of OpenMOLE is one of the key elements of its genericity and accessibility.

We can also remark that one of the main assets of OpenMOLE is the transparent access to High Performance Computing environments (HPC). The increase in computational capabilities already described can in practice be

implemented physically under different forms for the modeler: local server, local computation cluster, computation grid (network of multiple clusters, such as the European computing grid EGI), cloud computing services. Their use requires in most cases advanced computer science knowledge which are generally inaccessible to the standard modeler in geography. OpenMOLE integrates a library allowing to access most of these computing facilities, and their integration in the DSL is totally transparent for the user. The user script can then be tested on the local machine and then scaled on the HPC environments by modifying a single keyword in it.

The presentation of how to use the DSL and to elaborate scripts is out of the scope of this chapter, and we refer the reader to the online documentation of OpenMOLE for examples of scripts and model explorations. We simply recall the fundamental components of an exploration script: (i) the definition of prototypes, which correspond to parameters and outputs of the model, and which will take different values during the experiment; (ii) the definition of tasks, including model execution but that can also be for example pre- or post-processing tasks - the tasks covering a high variety of languages (scala, java, NetLogo, R, Scilab, native code such as python or C++); (iii) the description of methods to be applied (exploration by sampling, calibration, diversity search, etc.) which will act on the values of prototypes and will launch the considered evaluation task (mostly the model); (iv) a specification of the data gathered as an output of script execution (simulation data being often massive, a selection through this stage is crucial); and (v) the definition of the computation environment on which the method will be launched.

The platform aims at considerably extending practices of generative social science proposed by , which considers each multi-agent model as an artificial society, yielding macroscopic behaviors from assumptions made on microscopic behaviors. Numerical experiments that can be considered follow a change in scale, and the questions asked to the model evolve in a qualitative way. According to Clara , who used the OpenMOLE platform to develop with Sébastien the SimpopLocal model aimed at simulating the emergence of a system of cities, the virtual laboratory represented by this platform *“is not anymore only the simulation model and the hypothesis it simulated (i.e. the artificial society). It also contains the methods, tools and modeling procedures adapted to the conception and the exploration of the model and which practice creates as much knowledge and theoretical feedbacks than the conception of the model itself. This virtual laboratory is thus furthermore resembling a real research laboratory with an experimental desk (the model to conceive and explore), the assumptions of a researcher (the geographical processes translated into model mechanisms), methods (the iterative modeling method and aided by intensive computation), tools (the procedure for automatic exploration and any other experience plan integrated in OpenMOLE), all this gathered in a single room, the modeling platform SimProcess ()”*.

In comparison to general protocols as the one introduced by to describe all the stage of the modeling process, principles applied in OpenMOLE mostly innovate regarding the potentialities without precedent to explore the dynamical behavior of simulation models. Two main innovations rely in the systematic application of optimization meta-heuristics, mainly genetic algorithms, to rapidly test the largest possible number of combinations for model parameter values, and in the simultaneous distribution of simulations on multiple machines of a computation grid, what allows to considerably reduce the length of experiments without which it would become quickly prohibitive.

The choice of genetic algorithms as an optimization heuristic is justified by their efficiency in the context of multi-objective optimization problems. Moreover, the island distribution scheme (populations evolving independantly during a given duration) is particularly suited to a distribution on grid, each node making a subpopulation evolve, which is regularly fetched, merged into the global population, and from which a new subpopulation is generated and sent on the node. This type of algorithms furthermore extends relatively well to stochastic models, even if this aspect still implies a certain number of open problems (). Following , these methods are situated within the larger context of Evolutionary Computation, and the scala library MGO developed simultaneously to the platform and which allows to implement evolutionary algorithms in it, has been conceived to be easily extended to other heuristics in Evolutionary Computation, opening totally the possibilities for the inclusion of new methods in OpenMOLE.

Reuillon et al. (2013) describe the fundamental principles of the platform, whereas give a contextualisation of the different uses in the frame of simulation models for systems of cities. According to R. Reuillon cited by , the philosophy of OpenMOLE is articulated around three axis: the model as a “black box” to be explored (i.e. methods which are independent from the model), the use of advanced exploration methods, and the transparent access to intensive computation environments. These different components are in a strong interdependence, and allow a paradigm shift in the use of simulation models: use of multi-modeling, i.e. variable structure of the model such as it was presented in chapter 4 (), change in the nature of questions asked to the model (for example full determination of the feasible space ()), all this allowed by the use of intensive computation (). The different methods available in that context will be illustrated below in concrete examples. The online documentation gives a broad overview of the available methods in the most recent version of the software and of their articulation within a standard context.

We consider a simulation model as an algorithm producing outputs from data and parameters as inputs. In that frame, we recall that in an ideal case, all the following stages should be necessary for a robust use of simulation

models.

1. Identification of principal mechanisms and of crucial associated parameters, also with their variation range suggested by their thematic signification if they have some; identification of indicators to evaluate the performance or the behavior of the model.
2. Evaluation of stochastic variations: large number of repetitions for a reasonable number of parameters, assessment of the number of necessary repetitions to reach a certain level of statistical convergence.
3. Direct exploration for a first sensitivity analysis, if possible statistical evaluation of relations between parameters and output indicators.
4. Calibration, targeted algorithmic exploration through the use of specific algorithms (Calibration Profile (Reuilon et al., 2015), Pattern Space Exploration ()).
5. Feedbacks on the model, extension and new multi-modeling bricks, feedbacks on stylized facts and theory.
6. Extended sensitivity analysis, corresponding to experimental methods currently in construction and integration into the platform, such as for example the sensitivity to meta-parameters and to initial spatial conditions proposed by .

In some cases, some stages do not necessarily take place, for example the evaluation of stochasticity in the case of a deterministic model. Similarly, each step takes more or less importance depending on the nature of the question asked: calibration will not be relevant in the case of fully synthetic models, whereas a systematic exploration of a large number of parameters will not be necessary in the case of a model aimed at being calibrated on data.

In order to better illustrate this general presentation of the platform and associated methods, we propose in the following of this section to precisely develop the example of the SimpopLocal model, which genesis has been tightly linked to the one of the platform, and which has been candidate for the development and the application of diverse methods.

3.2 The SimpopLocal experiment: simulation of an emergence in geography

Le modèle SimpopLocal a été conçu pour représenter l'émergence des systèmes de villes, telle qu'on a pu l'observer dans cinq ou six régions du monde, quelque 3000 ans après l'émergence de pratiques agricoles dans des sociétés sédentaires (Bairoch 1985; Marcus et al. 2008). Il s'agit bien d'expliquer l'émergence, non pas seulement de la ville, mais bien de systèmes de villes, car on sait que les villes de cette époque n'étaient jamais isolées mais déjà organisées en réseaux dans le territoire de chacune de ces civilisations antiques. Les publications les plus récentes des archéologues insistent sur une certaine continuité des processus ayant conduit la sédentarisation de populations de chasseurs-cueilleurs, regroupées en hameaux et villages, puis l'apparition de villes dans certaines de ces régions. Le développement de l'agriculture a été concomitant d'un accroissement considérable des densités de population et de la taille des groupes humains dans ces contrées (on passe de 0,1 personne par km² à 10, soit un facteur 100 entre les deux ordres de grandeur), ainsi que d'une complexification de l'organisation politique et de la division sociale du travail. Ce processus très lent d'accumulation des ressources et de concentration des populations s'effectue selon des enchaînements comportant de nombreux feedbacks, avec beaucoup de fluctuations dans la croissance, dues aux fréquents événements contraires que sont les catastrophes naturelles ou les prédations de groupes voisins. En raison de la lenteur des transformations et de leurs fréquentes interruptions, les archéologues contestent parfois désormais l'appellation de révolution néolithique qui avait été proposée en 1942 par Gordon Childe (Demoule 2018 p.159).

Cependant, les géographes continuent d'identifier l'apparition des villes comme une émergence, une bifurcation pour deux raisons principales: d'une part elle ne s'est pas produite systématiquement dans toutes les régions où l'agriculture a été pratiquée, donc deux régimes d'évolution des systèmes de peuplement sont possibles et viables historiquement (des régions seulement agricoles et villageoises ont pu fonctionner pendant plusieurs siècles et subsistent aujourd'hui de façon résiduelle dans certaines forêts ou sur des îles du Pacifique par exemple), donc le régime territorial fonctionnant avec des villes constitue bien un attracteur spécifique dans la dynamique des systèmes de peuplement anciens; d'autre part, la trajectoire évolutive qui voit naître les villes traduit un changement qualitatif important (une émergence) avec un accroissement significatif de la diversité des fonctions sociales associées aux habitats et aussi un élargissement considérable dans l'échelle de la vie de relations: les échanges commerciaux qui s'y effectuent sur plus longue distance permettent ainsi aux villes d'être moins dépendantes d'un site de ressources locales comme le sont les villages agricoles et de développer les atouts d'une situation géographique exploitant les richesses d'un réseau de sites de plus en plus lointains (Reymond, 1971). Le modèle SimpopLocal vise à reproduire cet aspect remarquable de la dynamique des

systèmes de peuplement, qui produit invariablement une amplification de la différenciation hiérarchique entre les habitats, définie dans la littérature comme un fait stylisé majeur : d’abord dans tout système, en tout lieu et tout moment de l’histoire ou de la préhistoire, la répartition des tailles des lieux habités (mesure par la population ou l’étendue spatiale, voire la diversité des artefacts fonctionnels) est statistiquement très dissymétrique, comportant de nombreuses très petites agglomérations et seulement quelques très grandes agglomérations selon une distribution assez régulière de type loi de Zipf ou log normale (Fletcher 1986; Liu 1996). Ce schéma hiérarchique est une propriété structurelle (ordre de taille des entités) au niveau macroscopique particulièrement persistante dans le temps, quelles que soient les fluctuations locales intervenant au niveau des entités. Le modèle SimpopLocal est conçu pour tester l’hypothèse noncée dans la théorie évolutive des systèmes urbains (Pumain 1997), qui explique cette caractéristique structurelle par un processus de croissance urbaine en moyenne proportionnelle à la taille acquise, et son amplification par la création de multiples innovations technologiques et sociales produisant l’accroissement et la diversification des richesses qui se diffusent parmi les lieux mis en relation par toutes sortes d’échanges. Le modèle SimpopLocal s’inspire d’abord du modèle statistique qui constitue une excellente première approximation de l’évolution des populations dans un système de villes, en simulant la croissance urbaine comme un simple processus stochastique faisant varier la taille de chaque ville de façon proportionnelle à sa taille et conduisant à une distribution lognormale des populations urbaines (Gibrat 1931). La grande qualité de ce modèle statistique élémentaire tient à ce qu’il utilise comme explication de la croissance la taille déjà acquise, laquelle exprime à la fois la richesse accumulée et la capacité d’attraction et de résilience du lieu habité (en quelque sorte il s’agit d’un modèle selon le concept de croissance endogène des économistes). Mais SimpopLocal est conçu, comme les modèles précédents de la famille des modèles multi-agents Simpop (Bura et al 1996, Sanders et al. 2007), pour pallier l’insuffisance de capacité du modèle de Gibrat à prévoir la tendance partout observée à la croissance plus forte qu’attendue des plus grandes villes situées en tête des réseaux (Moriconi-Ebrard, 1993) et l’exagération de l’inégalité entre les tailles des villes (Pumain 1997, Bretagnolle, Pumain 2010). Ces déviations au modèle de Gibrat sont liées aux corrélations de longue portée (Rozenfeld et al. 2008), suscitées par les interactions spatiales. L’effet de celles-ci amplifie la différenciation hiérarchique entre les tailles des villes participant aux échanges dans un système urbain (Favaro et al. 2011). Les modèles Simpop traduisent cet effet en introduisant, de manière exogène au modèle et à différents moments du temps de la simulation, de nouvelles fonctions urbaines qui sélectionnent certaines villes ou sont captées par elles dans un processus continu d’adaptation à ces innovations. En comparaison des autres modèles Simpop, SimpopLocal introduit deux nouveautés : il utilise une représentation abstraite des vagues d’innovation successives et les rassemble toutes dans un seul objet innovation. Une seconde originalité consiste à rendre le processus de création d’innovation endogène en le liant à la taille du lieu habité, censée amplifier de manière non linéaire l’émergence de nouvelles formes techniques, sociales ou culturelles (avec une probabilité de création variant comme le carré des populations en présence ou en relations). Cette version plus parcimonieuse de la construction du modèle permet de réduire considérablement le nombre de paramètres et autorise donc une exploration et une évaluation plus systématiques.

3.3 Implémentation de SimpopLocal, de Netlogo à OpenMole Simpoplocal a été initialement développé avec le langage Netlogo, puis re-développé avec le langage de programmation Scala. La simulation avec Netlogo a bénéficié des facilités de l’interface qui permet de suivre numériquement et graphiquement les modifications engendrées sur les variables macroscopiques qui résument l’état du système, mais a montré très vite ses limites en termes d’expérimentation. La méthode manuelle de réglage des valeurs des paramètres permettait difficilement d’éviter les emballements de la croissance urbaine conduisant à des accroissements de taille des villes bien trop normés pour l’époque historique qu’il s’agit de simuler. La reprogrammation en Scala puis le passage sur la plateforme OpenMole devaient permettre une exploration plus précise et complète des comportements du modèle. Le modèle représente l’évolution des unités de peuplement dispersées dans une zone suffisamment grande pour accueillir quelques milliers d’habitants mais suffisamment limitée en surface pour assurer la connexion possible entre les lieux habités en fonction des moyens de transport disponibles à l’époque (par exemple il pourrait s’agir de l’ancienne Mésopotamie ou de la Mésopotamie antique). L’espace de simulation est composé d’une centaine de lieux habités. Chaque lieu est considéré comme un agent fixe et est décrit par trois attributs : l’emplacement de son habitat permanent (x, y), la taille de sa population P et les ressources disponibles dans son environnement local. La quantité de ressources disponibles R est quantifiée en unités d’habitants et peut être comprise comme la capacité de charge de l’environnement local pour soutenir une population, laquelle varie en fonction des compétences en exploitation des ressources que la population locale a acquises, grâce aux innovations qu’elle a créées ou reçues des autres lieux habités. Toutefois, l’exploitation des ressources est effectuée localement et le partage ou l’échange de biens ou de personnes ne sont pas explicitement représentés dans le modèle. Chaque nouvelle innovation créée ou acquise par un lieu habité développe ses compétences en exploitation. L’entité innovation sentend ici comme une grande invention abstraite socialement acceptée, qui pourrait représenter une invention technique, une découverte, une organisation sociale, de nouvelles habitudes ou pratiques ... Chaque acquisition d’innovation par un lieu habité apporte la possibilité de dépasser ses seuils de capacité, et par conséquent autorise une croissance démographique. Le modèle a été conçu pour être le plus parcimonieux possible, en minimisant le nombre des attributs des agents (qui sont

des lieux habits) et les paramètres qui contrôlent leur évolution. On a utilisé directement les ordres de grandeur moyens indiqués par les travaux des archéologues pour fixer environ 4000 ans la durée de la période de transition entre un système de peuplement agricole et un système de peuplement urbain, pour estimer un taux de variation moyen annuel de la population d'environ 0,02. On définit une valeur initiale pour la population et les ressources des lieux habités, puis le réseau d'interaction entre eux est créé. Ensuite, chaque étape de la simulation, les mécanismes de croissance de la population et de diffusion de l'innovation sont appliqués. L'impact des innovations sur l'efficacité de l'extraction des ressources est calculé. Cette boucle est itérée jusqu'à ce que le critère d'arrêt soit atteint : dans ce cas, après 4000 étapes ou lorsqu'un nombre maximal arbitraire d'innovations a été atteint. On observe l'évolution de l'état du système de peuplement défini au niveau macro-géographique par la distribution de la taille des lieux habités, résumé par la pente de la distribution rang-taille. Le modèle utilisant certains paramètres qui sont des probabilités est stochastique, un même jeu de valeurs de paramètres peut donner lieu à des résultats sensiblement différents. Une méthode automatisée pour faire varier les valeurs des paramètres et interpréter les résultats obtenus a été mise au point progressivement par une collaboration entre informaticiens et géographes.

3.4 Calibrage et validation L'automatisation de l'exploration des dynamiques engendrées par les modèles de simulation avec la plateforme OpenMole utilise des algorithmes génétiques qui réalisent de façon systématique les variations des valeurs des paramètres auparavant effectuées à la main par le chercheur. La distribution des calculs sur une infrastructure de grille (un réseau d'ordinateurs) permet en outre de conduire ce très grand nombre d'opérations combinatoires en réduisant considérablement le temps de calcul, grâce au traitement en parallèle de l'information. Mais la mise en œuvre de cette nouvelle forme de l'expérimentation des modèles suppose aussi une intervention du chercheur thématique, qui doit sélectionner les objectifs précis que son modèle doit satisfaire, tandis qu'un raffinement supplémentaire de la méthode d'exploration peut conduire à un renforcement de la confiance qu'il accorde aux hypothèses scientifiques de son modèle. Le calibrage comme optimisation au moyen des algorithmes génétiques Le calibrage est une procédure qui cherche à minimiser l'écart (appelé fitness) entre le comportement simulé par le modèle et le comportement observé empiriquement, en faisant varier de façon incrémentale les valeurs inconnues des paramètres du modèle. Stonedahl (2011) a rappelé les difficultés de cette exploration qui devient vite fastidieuse lorsqu'elle est conduite manuellement, cause des multiples bifurcations intervenant dans des modèles où la plupart des mécanismes liant les variables sont non linéaires. Une exploration exhaustive de l'espace des paramètres n'est pas envisageable car elle exigerait des temps de calcul trop importants, en croissance exponentielle avec le nombre de ces paramètres. Comme ces procédures produisent aussi de grandes quantités de résultats, elles exigent en outre d'employer des méthodes adaptées pour traiter et visualiser les informations engendrées par les simulations. Tout un ensemble de logiciels doit donc être mis au point pour permettre au chercheur de découvrir les principaux schémas des dynamiques associées aux variations des paramètres de son modèle. C'est là où des procédures informatiques adaptées peuvent être utilisées, en rapportant la question du calibrage à un problème d'optimisation. Les algorithmes génétiques ont été utilisés pour calibrer des systèmes multi-agents dans plusieurs domaines, en médecine (Castiglione et al, 2007), en écologie (Duboz et al, 2010), en économie (Espinosa, 2012; Stonedahl et Wilensky, 2010a), ou en hydrologie (Solomatine et al, 1999). En dépit de la large utilisation des systèmes multi-agents en sciences sociales, cette méthode n'a pas été appliquée très souvent (Heppenstall et al, 2007; Stonedahl et Wilensky, 2010b). Ce type d'expérience numérique exige en effet que soient définis des objectifs quantitatifs permettant d'évaluer si les résultats de la simulation sont compatibles avec les attentes des experts, il faut également savoir gérer une énorme charge de calcul et parvenir à optimiser une fonction de fitness susceptible de très importantes variations stochastiques (Pietro et al, 2004). Dans le cas de SimpopLocal, qui comprend 5 paramètres dont les valeurs sont inconnues (même leurs ordres de grandeur ne peuvent pas être estimés à partir de données empiriques), nous avons dû identifier trois fonctions objectif. Celles-ci caractérisent un résultat de simulation au niveau macro-géographique et correspondent à des faits stylisés dont les ordres de grandeur ont pu être tablés à partir des connaissances archéologiques et historiques : la distribution finale des tailles de villes doit être lognormale (peu différente d'une loi de Zipf), la taille maximale qu'atteint la plus grande ville doit être d'environ 10 000 habitants, pour une durée de simulation équivalente à 4000 ans. Cette obligation de définir des fonctions-objectif pourrait être considérée comme une contrainte forte sur la validité épistémologique du modèle, elle semble en effet contredire l'hypothèse d'une évolution ouverte pour les systèmes de villes. En fait, cette étape intermédiaire de calcul représente un comprimé de connaissances, notre exigence a minima sur la représentativité et la plausibilité du comportement du modèle par rapport à l'ensemble envisageable des dynamiques des villes en système (l'époque historique de l'émergence des villes). Le résultat en termes d'évaluation des simulations doit permettre d'avancer dans la connaissance des processus d'interaction intra-urbains susceptibles d'engendrer cette dynamique générale. À l'échelon macroscopique du système, cette reconstitution théorique s'apparentant alors à ce que des physiciens nomment le problème inverse. Un domaine de variation numérique assez large est tablé a priori pour chacun des cinq paramètres. Chaque jeu de paramètres, combinant une valeur pour chacun d'entre eux, est évalué en fonction de la sortie de simulation qu'il produit. Cette évaluation mesure la proximité entre les sorties de la simulation et les fonctions objectifs définies pour le modèle et permet ainsi de mesurer la capacité d'un

certain ensemble de valeurs de paramètres reproduire les faits stylisés que la simulation doit approcher au mieux. Les paramétrages recevant les meilleures évaluations sont ensuite utilisés comme base pour engendrer de nouveaux jeux de paramètres qui sont ensuite testés.

Exploration de l'espace des paramètres sous contrainte d'objectifs Le modèle SimpopLocal tant stochastique, les résultats de la simulation varient d'une simulation à l'autre pour le même paramétrage. Par conséquent, l'évaluation du paramétrage en fonction des trois objectifs doit prendre en compte cette variabilité. Nous avons vérifié qu'une centaine de simulations pour chaque jeu de paramètres suffisait à saisir cette variabilité sans trop augmenter la durée du calcul. À chaque fonction-objectif correspond une mesure d'évaluation de la qualité du résultat simulé. La capacité du modèle à produire une distribution log-normale est mesurée par l'écart entre la distribution simulée et une distribution log-normale théorique ayant même moyenne et écart type selon un test de Kolmogorov-Smirnov. L'objectif de population maximale quantifie la capacité du modèle à engendrer des villes plus ou moins grandes, le résultat d'une simulation est testé en calculant l'écart entre la taille de la plus grande agglomération et la valeur attendue de 10 000 habitants: $[(\text{population de la plus grande agglomération} - 10\,000) / 10\,000]$. L'objectif de la durée de la simulation quantifie la capacité du modèle à générer une configuration attendue dans un laps de temps historiquement plausible. On calcule l'écart entre le nombre d'itérations de la simulation et la valeur attendue de 4000 itérations de la simulation: $[(\text{simulation dure} - 4000) / 4000]$. Ces trois calculs d'erreur sont normalisés afin de pouvoir comparer le degré de réussite d'une simulation vis-à-vis de chacun des trois objectifs. Mais l'agrégation des trois calculs qui produirait une seule mesure de qualité globale n'étant pas possible, un algorithme multi-objectif est nécessaire pour déterminer quelles simulations sont les plus satisfaisantes pour approcher la configuration finale souhaitée. Ce type d'algorithme calcule des solutions de compromis telles qu'aucune ne domine toutes les autres pour tous les objectifs. Ces solutions sont appelées des compromis de Pareto et elles forment ensemble ce qui est appelé un front de Pareto. L'utilisation de méthodes d'exploration globales comme celle des algorithmes génétiques pour calibrer un modèle multi-agent (et en particulier un modèle multi-agent stochastique) implique un coût de calcul très élevé (Sharma et al, 2006). Ce type de charge est trop volumineux pour être exécuté sur des ordinateurs locaux, et les supercalculateurs sont très coûteux et ne sont pas facilement disponibles dans la plupart des laboratoires. Les grilles informatiques offrent une solution pour résoudre ces problèmes de calculs intensifs. Cependant, l'informatique à une si grande échelle suppose d'orchestrer l'exécution de dizaines de milliers d'instances du modèle sur des ordinateurs distribués dans le monde entier. La probabilité cumulée de pannes locales et le problème de répartir la charge de travail de façon optimale sur la grille rendent très difficile son utilisation pour un chercheur non spécialisé, comme précisé ci-dessus. C'est entre autres pour surmonter ces difficultés que la plate-forme OpenMOLE a été construite (Reuillon et al, 2010; 2013). Cet exemple de la calibration du modèle SimpopLocal montre bien dans quelle mesure OpenMOLE aide les modélisateurs à franchir le fossé technique et méthodologique qui les sépare de l'informatique haute performance. L'infrastructure de la grille de calcul (EGI) nous a permis d'utiliser une puissance de calcul telle qu'un demi milliard d'exécutions du modèle ont pu être effectuées pour le calibrage de SimpopLocal, lequel sans cela aurait requis quelque 20 années de calcul avec un seul ordinateur. Le profil de calibrage, un grand saut pistométrique pour les SHS Le résultat du processus de calibrage assure seulement que le modèle peut reproduire les caractéristiques stylisées de l'émergence d'un système de villes, avec une évaluation assez précise des valeurs des paramètres qui toutes ensemble contribuent à assurer cette évolution. Mais il ne dit rien de la fréquence à laquelle les jeux de paramètres produisent des comportements plausibles, et de quelle façon chaque paramètre contribue à modifier le comportement du modèle. Il serait intéressant par exemple de savoir à quel moment certaines valeurs de paramètres empêchent le système d'atteindre un comportement plausible, et de ne pas se restreindre à ne connaître qu'un seul jeu de valeurs de paramètres optimales. Une nouvelle méthode a été mise au point pour représenter la sensibilité du modèle aux variations d'un seul paramètre, indépendamment des variations de tous les autres paramètres (Reuillon et al. 2015). Au moyen d'une fonction qui calcule une seule valeur numérique décrivant la qualité du calibrage pour le modèle, l'algorithme de profil calcule l'erreur de calibrage la plus faible possible lorsque la valeur d'un paramètre donné est fixe et que les autres sont libres. L'algorithme calcule cette erreur minimale pour tout le domaine de variation du paramètre étudié. Pour chaque valeur d'un paramètre, l'algorithme cherche à identifier les jeux de valeurs des autres paramètres qui produisent le meilleur ajustement du modèle aux données attendues (la plus petite erreur possible). Un graphique représente alors les variations de cette valeur d'ajustement optimale en fonction des variations du paramètre étudié. Le profil de calibrage montre ainsi plusieurs formes possibles pour cette courbe. Lorsqu'elle présente une nette inflexion vers les valeurs les plus basses pour l'erreur de calibrage, cela pour un tout petit domaine de variation des valeurs du paramètre étudié, on peut en conclure qu'on a vraiment identifié l'ordre de grandeur du paramètre qui satisfait aux exigences en termes de comportement du modèle. Si l'une de ces courbes reste plate, cela indique que le paramètre n'a pas d'effet sur le comportement du modèle et peut donc en être éliminé. Ainsi, dans le cas de SimpopLocal, un paramètre imaginaire comme la durée de vie d'une innovation a été finalement exclu car des variations restaient sans effet sur la qualité d'ajustement du modèle, toutes choses égales quant aux variations des autres paramètres (Schmitt, 2014). On a donc ici la possibilité d'évaluer jusqu'à quel point les mécanismes imaginés pour construire le modèle sont

non seulement suffisants, mais aussi nécessaires pour produire le comportement attendu. Certes dans les limites du cadre théorique et de la sélection des faits stylisés retenus, c'est la première fois que des chercheurs en SHS peuvent parvenir à ce type de conclusion scientifique essentielle, grâce à une méthode de validation enfin efficace pour les modèles de simulation multi-agents. C'est un immense progrès du point de vue épistémologique en sciences sociales – certes toujours dans le cadre théorique donné par les objets, attributs et mécanismes sélectionnés par les chercheurs pour être représentatifs du système observé. Une forme complémentaire de validation du modèle pourrait être alors imaginée si des historiens/archéologues tentaient de le recalibrer avec des données de leurs observations. En effet, le jeu de paramètres estimé contient des valeurs qui engendrent bien la dynamique voulue pour un système de peuplement mais qui ne sont pas fixes dans l'absolu, elles sont relatives les unes aux autres d'une part et aux données fictives introduites d'autre part. Si l'on modifie ces dernières pour les rendre compatibles avec un système de peuplement historiquement observé, la capacité du modèle à simuler son développement serait alors confirmée, non seulement en reconstruisant les trajectoires de l'évolution de la population des lieux habités considérés, mais aussi en conservant les ordres de grandeur relatifs des paramètres qui engendrent cette dynamique.

4 Exemples d'applications d'OpenMOLE: modèles d'interaction réseaux-territoires Nous proposons dans cette section d'illustrer l'application des méthodes d'exploration d'OpenMOLE et du calcul intensif à une autre question thématique, celle des interactions entre réseaux et territoires. Cette question a alimenté de nombreux débats scientifiques, pour lesquels la plupart des questions restent relativement ouvertes. Par exemple, le problème des effets structurants des infrastructures de transport (Bonnafant et Plassard, 1974), présent par (Offner, 1993) comme un mythe scientifique invoqué pour justifier le coût d'une nouvelle infrastructure par ses retombées sur le développement régional, pas toujours observées – moyen terme, peut selon A. Bretagnolle dans (Offner et al., 2014) être observé pour des territoires plus vastes et sur le temps long, tout en tenant compte des fluctuations locales dans les dynamiques des systèmes de villes. La difficulté empirique d'extraire des faits stylisés généraux ainsi que la difficulté conceptuelle d'entités géographiques en relations de causalités circulaires, sont contournées par l'approche de modélisation de la co-évolution des réseaux de transport et des territoires proposée par Raimbault (2018b). Les résultats obtenus sont très intéressants – utilisation d'OpenMOLE et de ses algorithmes d'exploration et de calibrage, dont nous allons donner quelques illustrations. L'application de calibrage multi-objectif s'avère essentielle pour l'application des modèles de systèmes de villes à des situations réelles. Par exemple, (Raimbault, 2018a) introduit un modèle d'évolution d'un système de villes sur le temps long, proche du modèle de (Favaro et Pumain, 2011), mais se concentrant sur l'effet du réseau de transport physique. Les taux de croissance des villes sont déterminés par la superposition de plusieurs effets: (i) croissance endogène capturée par un taux de croissance fixe correspondant au modèle de Gibrat; (ii) interactions entre villes par un modèle gravitaire; (iii) réaction des flux circulant dans le réseau sur les villes traversées. Ce modèle est calibré de manière non stationnaire dans le temps (c'est-à-dire sur des fenêtres temporelles glissantes, afin de prendre en compte le changement de nature des dynamiques urbaines, comme observé par Bretagnolle et Franc (2018) avec par exemple les mutations des réseaux de transport), sur le système de villes français entre 1830 et 2000. Pour calibrer le modèle, les populations simulées sont comparées aux populations observées. À ce stade, l'utilisation d'un algorithme de calibrage multi-objectif (l'algorithme NSGA2 implémenté dans OpenMOLE) est essentielle. En effet, l'ajustement peut par exemple se effectuer sur une erreur carrée moyenne dans le temps et pour l'ensemble des villes. Cependant, vu les disparités de taille des villes liées à la hiérarchie urbaine, il est difficile de faire une optimisation mono-objectif sur cette erreur – s'attellera à ajuster la taille des plus grandes villes, au détriment de la majorité des villes du système. L'ajout d'un second objectif, pris par exemple comme une erreur carrée moyenne sur les logarithmes des populations, permet de prendre celles-ci en compte. Un résultat important de (Raimbault, 2018a) est alors l'émergence de fronts de Pareto pour ces deux objectifs, pour l'ensemble des fenêtres temporelles considérées. Cela montre que ce type de modèle doit être appliqué en faisant un compromis entre l'ajustement des populations pour les villes moyennes et des populations pour les plus grandes villes. Ce résultat est permis grâce à l'optimisation multi-objectif par algorithme génétique d'OpenMOLE. Un autre exemple d'application des méthodes de la plateforme qui illustre son rôle crucial est donné par la recherche de régimes de co-évolution. Suivant Raimbault (2017b), l'étude des motifs de corrélation retardée dans le temps permet d'isoler des régimes typiques d'interaction entre variables de réseau et variables de territoires. Plus précisément, Raimbault (2018b) définit la co-évolution comme l'existence de relations circulaires causales, au niveau d'un ensemble d'entités dans une certaine emprise spatiale. Dans le cas des réseaux et des territoires, les propriétés des réseaux doivent être localement causées par celles des territoires, et réciproquement. Des causalités unidirectionnelles des réseaux vers les territoires correspondent alors aux effets structurants mentionnés ci-dessus. Cette définition permet de capturer la congruence (Offner, 1993) entre ces objets, en quelque sorte leur adaptation réciproque de manière dynamique. Elle permet aussi la construction d'une méthode opérationnelle proposée par Raimbault (2017b), qui cherche statistiquement des liens de causalité entre variables correspondantes. En pratique, la notion faible de causalité de Granger est mobilisée, permettant une flexibilité au regard des données nécessaires et du cadre temporel et spatial de destination. Cette causalité est dans notre cas quantifiée par les corrélations retardées entre variations des variables de

rseau (comme les centralités ou l’accessibilité) et variations des variables de territoires (comme population, emplois, transactions immobilières, etc.), et l’existence de maxima significatifs des retards non nuls donne une direction de causalité. Une typologie de ces profils de corrélations retardées fournit ce qu’on nomme des régimes de causalité, parmi lesquels des régimes de co-évolution où deux variables territoire et rseau sont en causalité réciproque. La question est alors dans un cas d’étude de identifier les régimes présents à partir de données observées ou de données simulées par un modèle, et notamment ceux qui correspondent à une co-évolution. La démonstration de l’existence de tels régimes en sortie d’un modèle de co-évolution n’est pas a priori attendue, puisque les processus inclus à l’échelle microscopique où les influences sont en effet réciproques n’impliquent pas une causalité réciproque à l’échelle macroscopique des indicateurs, puisque les modèles considérés sont complexes et témoignent d’une émergence. Cette méthode est appliquée à un modèle macroscopique de co-évolution par Raimbault (2019a), qui tend le modèle de Raimbault (2018a) par l’ajout de règles d’évolution des capacités des liens du rseau. Un échantillonnage direct, qui consiste en un tirage aléatoire d’un nombre fixe de points de paramètres (par exemple par échantillonnage Hypercube Latin maximisant la répartition des points), est une première expérience permise par OpenMOLE pour avoir un aperçu de la capacité du modèle à produire de la co-évolution. Celui-ci permet d’isoler un certain nombre de régimes pouvant être potentiellement produits par le modèle (33 régimes pour 729 régimes possibles pour les variables considérées, i.e. 4,5). L’application de l’algorithme Pattern Space Exploration (Cherel, Reuillon and Cottineau, 2015) avec comme objectif la diversité des régimes produits permet alors de considérablement tendre cette conclusion, puisque celui-ci produit 260 régimes (35,7). Cette méthode permet par ailleurs de comparer entre eux des modèles avec une certaine confiance dans l’exhaustivité des solutions obtenues. Raimbault (2019b) applique la même démarche au modèle SimpopNet introduit par Schmitt (2014), qui est également un modèle de co-évolution à l’échelle macroscopique et présentant un grand nombre de points communs avec le modèle précédent notamment dans les variables considérées et donc les indicateurs de sortie calculables. Il est alors obtenu un nombre plus faible de régimes d’interaction et de régimes de co-évolution, confirmant d’une part qu’il n’est pas immédiat pour un modèle conçu pour la co-évolution de faire effectivement merger des régimes de co-évolution, et suggérant par ailleurs que des contraintes plus fortes dans les règles d’évolution du rseau induisent une plus grande difficulté à produire une diversité de régimes.

4 Perspectives

The elaboration of the OpenMOLE platform has created a research axis, even a research domain, with a specific positioning which one of the remarkable aspects is a high level of interdisciplinarity between social sciences and more technical disciplines such as computer science. According to Banos (2017) this leads to the production of a broader and deeper knowledge (in a way similar to the virtuous spiral between disciplinarity and interdisciplinarity described by Banos (2013)). But also through the philosophy of unique platform (described above, through the strong interaction between the three axis of model embedding, access to innovative model exploration methods, and transparent access to intensive computation environments), the perspectives opened are numerous, as much on the technical side than on the theoretical, methodological or thematic side. We give below a few examples, accounting of a current state of possible futures for OpenMOLE.

4.1 Methods

The extension of available methods is a privileged axis of research linked to the development of OpenMOLE. For example, the exhaustive resolution of inverse problems (Aster et al., 2018) is currently not included. Solving an inverse problem consists in determining all the antecedents of a given objective in the output space of the model. Calibration algorithms solve similar problems but do not ensure the exhaustivity of the solutions produced, what can become a considerable issue in the case of equifinality (), i.e. of parameter configurations or initial conditions leading through different trajectories to an identical result. An heuristic for inverse problems inspired by the PSE mechanisms is currently being elaborated for an integration into OpenMOLE.

The use of Bayesian inference methods is also a direction developed. Indeed, in the case of strongly stochastic models, and in which the joint distributions have a non standard form, an estimation of the probability distribution of parameters can be provided by this type of method. In the case of simulation models, the method of Approximate Bayesian Computation (Csilléry et al., 2010) allows for a given observed dataset to get the probability distribution of parameters having the most likely produced it. This is therefore an extended calibration with a probabilistic knowledge produced allowing to take into account uncertainty. A specification of this method proposed by Lenormand et al. (2013) with the purpose to reduce the number of simulations in the case of models with a significant computation time, is also being adapted to parallel computation and integrated into the platform.

We can finally mention diverse methodological directions which are also being investigated: (i) the question of

high dimensionality is rapidly an issue in the use of the PSE algorithm, since the number of output configurations is potentially victim of the dimensionality curse, i.e. that the time or the size of execution are an exponential function of the number of dimensions (a grid exploration is the simplest example to get a grasp on this phenomenon) - new methods combining dimensionality reduction and diversity search would allow to solve this problem and take into account a much higher richness of outputs; (ii) the question of the sensitivity to initial spatial conditions which was already mentioned (Raimbault et al., 2018) is particularly relevant for geographical models, and a scala library including synthetic generators for population configurations at different scales is currently being implemented, including for example the generators for districts studied by Raimbault and Perret (2019); (iii) the implementation of information criteria for the performance of models, already described in chapter 4, is also being studied, such as the POMIC criteria proposed by Piou et al. (2009).

4.2 Tools

All along its development, OpenMOLE has always been innovative in terms of tools used and developed. The choice of the Scala language to replace Java already in the first versions is an innovative technological choice which is particularly relevant through the functional programming but also object programming possibilities while still keeping the underlying Java infrastructure allowing a high portability without complications depending on the operating system or on the hardware, what is crucial for the distribution of computations of computations on heterogenous nodes of the computation grid. For example, properties such as trait mixing make scala particularly suited to multi-modeling (Odersky and Zenger, 2005). The possibilities offered by object programming are conserved in Scala and can be combined to the abstraction of functional programming, making it a language more powerful in this sense of flexibility than other functional languages such as Haskell (Oliveira and Gibbons, 2010). Furthermore, properties such as implicit conversions or case classes make Scala highly ergonomic for the design of DSL (Sloane, 2008), which as we already described is an essential feature of OpenMOLE.

The issue of program embedding, and by extension of model embedding, remain an active research field in particular in relation with reproducibility. The docker software which uses containers allows to wrap an execution environment in an identical manner whatever the operating system and the hardware. Hung et al. (2016) propose to couple docker with a graphical user interface for scientific reproducibility. Similar softwares such as Singularity are specifically dedicated to the reproducibility of HPC experiments (Kurtzer et al., 2017). The core of the embedding strategy taken by OpenMOLE does not rely on such a software, for example because of performance reasons, but some tasks relying on the execution of binaries or of programs with a complicated environment are embedded in OpenMOLE through a task using docker (for example for the R language task which requires the installation of a full R environment). An improvement of the integration of docker into OpenMOLE is an active research direction which is crucial for the future extension of the genericity of embeddable programs. OpenMOLE is therefore at the edge in technical research regarding scientific reproducibility. In a similar way, the question of scalability of experiments is at the core of the philosophy of the platform, and research are done for example to automatize the deployment of multiple OpenMOLE instances on a cluster and facilitate the use within communities of thematic researchers.

Conclusion

L'exploration des modèles de simulation s'est prise en géographie par l'intermédiaire d'initiatives comme le développement de la plateforme OpenMOLE. Celle-ci s'est menée dans un cadre hautement interdisciplinaire et réciproque (relation gagnant-gagnant entre informaticiens et géographes), mais aussi au travers d'une intégration inédite des domaines de connaissance (Raimbault, 2017a), c'est-à-dire des connaissances empiriques, théoriques et de modélisation, mais aussi les outils et méthodes, qui sont dans chacun de ces domaines en interaction forte. L'aventure OpenMOLE, et sa branche liée la géographie dans le cadre de l'ERC Geodiversity, témoigne d'une nouvelle façon de produire des connaissances géographiques, résolument evidence-based, rendant envisageable la production de preuves scientifiques en sciences sociales. Cette émancipation reste à propager et la démarche reste à valoriser pour réaliser son potentiel de direction future de la Géographie Théorique et Quantitative, en complémentarité avec les nouvelles disciplines émergentes de City Science et Urban Analytics décrites par Batty (2019), mais la preuve de concept est largement valide et donne des arguments de poids aux sciences humaines pour résister à l'hégémonie colonisatrice de sciences dures comme la physique prétendant un monopole sur les approches evidence-based des systèmes sociaux (Dupuy and Benguigui, 2015). The exploration of simulation models has been progressively established in geography through the intermediary of initiatives such as the development of the OpenMOLE platform. It has been achieved in a

highly interdisciplinary and reciprocal framework (win-win relations between computer scientists and geographers), but also through a novel integration of knowledge domains ()

References

- Aster, R. C., Borchers, B., and Thurber, C. H. (2018). *Parameter estimation and inverse problems*. Elsevier.
- Banos, A. (2013). *Pour des pratiques de modélisation et de simulation libérées en géographie et SHS*. PhD thesis, Université Paris 1 Panthéon Sorbonne.
- Banos, A. (2017). Knowledge accelerator’ in geography and social sciences: Further and faster, but also deeper and wider. In *Urban Dynamics and Simulation Models*, pages 119–123. Springer.
- Bretagnolle, A. and Pumain, D. (2010). Simulating urban networks through multiscalar space-time dynamics: Europe and the united states, 17th-20th centuries. *Urban Studies*, 47(13):2819–2839.
- Bura, S., Guérin-Pace, F., Mathian, H., Pumain, D., and Sanders, L. (1996). Multiagent systems and the dynamics of a settlement system. *Geographical analysis*, 28(2):161–178.
- Cliff, A. D., Haggett, P., Smallman-Raynor, M., et al. (2004). *World atlas of epidemic diseases*. Arnold London.
- Csilléry, K., Blum, M. G., Gaggiotti, O. E., and François, O. (2010). Approximate bayesian computation (abc) in practice. *Trends in ecology & evolution*, 25(7):410–418.
- Eliot, E. and Daudé, É. (2006). Diffusion des épidémies et complexités géographiques. perspectives conceptuelles et méthodologiques. *Espace populations sociétés. Space populations societies*, (2006/2-3):403–416.
- Eubank, S., Guclu, H., Kumar, V. A., Marathe, M. V., Srinivasan, A., Toroczkai, Z., and Wang, N. (2004). Modelling disease outbreaks in realistic urban social networks. *Nature*, 429(6988):180.
- Grignard, A., Taillandier, P., Gaudou, B., Vo, D. A., Huynh, N. Q., and Drogoul, A. (2013). Gama 1.6: Advancing the art of complex agent-based modeling and simulation. In *International Conference on Principles and Practice of Multi-Agent Systems*, pages 117–131. Springer.
- Hung, L.-H., Kristiyanto, D., Lee, S. B., and Yeung, K. Y. (2016). Guidock: using docker containers with a common graphics user interface to address the reproducibility of research. *PloS one*, 11(4):e0152686.
- Jensen, P. (2018). *Pourquoi la société ne se laisse pas mettre en équations*. Le Seuil.
- Kurtzer, G. M., Sochat, V., and Bauer, M. W. (2017). Singularity: Scientific containers for mobility of compute. *PloS one*, 12(5):e0177459.
- Lenormand, M., Jabot, F., and Deffuant, G. (2013). Adaptive approximate bayesian computation for complex models. *Computational Statistics*, 28(6):2777–2796.
- Odersky, M. and Zenger, M. (2005). Scalable component abstractions. In *ACM Sigplan Notices*, volume 40, pages 41–57. ACM.
- Oliveira, B. C. and Gibbons, J. (2010). Scala for generic programmers: comparing haskell and scala support for generic programming. *Journal of functional programming*, 20(3-4):303–352.
- Piou, C., Berger, U., and Grimm, V. (2009). Proposing an information criterion for individual-based models developed in a pattern-oriented modelling framework. *Ecological Modelling*, 220(17):1957–1967.
- Raimbault, J., Cottineau, C., Texier, M. L., Néchet, F. L., and Reuillon, R. (2018). Space matters: extending sensitivity analysis to initial spatial conditions in geosimulation models. *arXiv preprint arXiv:1812.06008*.
- Raimbault, J. and Perret, J. (2019). Generating urban morphologies at large scales. *arXiv preprint arXiv:1903.06807*.
- Reuillon, R., Leclaire, M., and Rey-Coyrehourcq, S. (2013). Openmole, a workflow engine specifically tailored for the distributed exploration of simulation models. *Future Generation Computer Systems*, 29(8):1981–1990.

- Reuillon, R., Schmitt, C., De Aldama, R., and Mouret, J.-B. (2015). A new method to evaluate simulation models: The calibration profile (cp) algorithm. *Journal of Artificial Societies and Social Simulation*, 18(1):12.
- Sloane, T. (2008). Experiences with domain-specific language embedding in scala. In *Domain-Specific Program Development*, page 7.
- Stonedahl F, Wilensky U, 2010b, Evolutionary robustness checking in the artificial Anasazi model, in Proceedings of the AAAI Fall Symposium on Complex Adaptive Systems: Resilience, Robustness, and Evolvability (AAAI Press, Menlo Park, CA), 120129.
- Taillandier P., Grignard A., Gaudou B. et Drogoul A. 2014, Des données géographiques la simulation base d'agents: application de la plate-forme GAMA, *Cybergeo : European Journal of Geography*, 671, URL: <http://journals.openedition.org/cybergeo/26263>; DOI: 10.4000/cybergeo.26263
- Tisue, S., Wilensky, U. 2004. Netlogo: A simple environment for modeling complexity. In International conference on complex systems (Vol. 21, pp. 16-21).
- Terrier C. 1980, MIRABELLE, *Courrier des Statistiques*, 73.
- Van Deursen, A., Klint, P. (2002). Domain-specific language design requires feature descriptions. *Journal of Computing and Information Technology*, 10(1), 1-17.
- White, R., Engelen, G. 1993. Cellular automata and fractal urban form: a cellular modelling approach to the evolution of urban land-use patterns. *Environment and planning A*, 25(8), 1175-1199.
- White R. Engelen G. Uljee I. 2015, Modeling cities and regions as complex systems. From Theory to Planning Applications. Cambridge (Mass.), MIT Press, 330 p.
- Wilson, A. G. 2014. Complex spatial systems: the modelling foundations of urban and regional analysis. Routledge.