

INRAE

**➤ Atelier: modélisation et simulation
dans la recherche scientifique**

Séminaire d'unité GenPhySE

Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

21-22 mars 2022

➤ Plan

Pourquoi êtes-vous venus à cet atelier?

Modélisation

Pour vous c'est quoi un modèle ? A quoi ça sert ?

Comment fait-on un modèle ?

Un exemple : la prévision climatique

Simulation

Intérêts/inconvénients

Exemples

Travaux récents à l'INRAE



INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

> Plan

Pourquoi êtes-vous venus à cet atelier?

Modélisation

Pour vous c'est quoi un modèle ? A quoi ça sert ?

Comment fait-on un modèle ?

Un exemple : la prévision climatique

Simulation

Intérêts/inconvénients

Exemples

Travaux récents à l'INRAE



INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

➤ **Pourquoi êtes-vous venus à cet atelier ?**



➤ **Utilisez-vous des modèles dans votre activité?**



INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

p. 4

> Plan

Pourquoi êtes-vous venus à cet atelier?

Modélisation

Pour vous c'est quoi un modèle ? A quoi ça sert ?

Comment fait-on un modèle ?

Un exemple : la prévision climatique

Simulation

Intérêts/inconvénients

Exemples

Travaux récents à l'INRAE

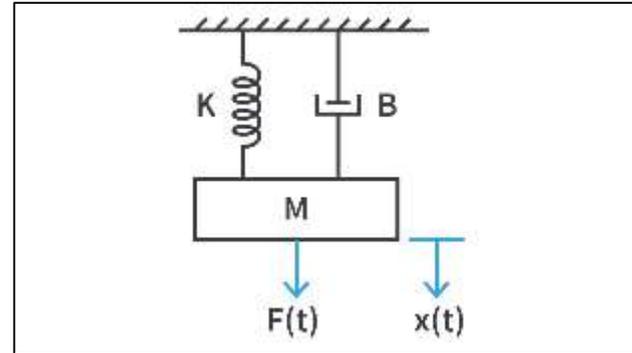
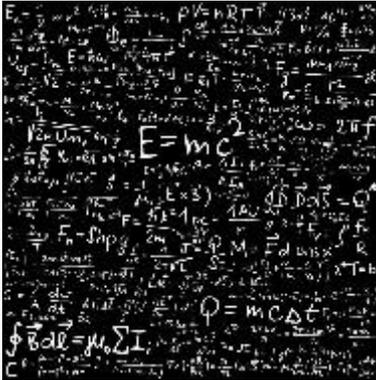


INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

➤ Un modèle (scientifique) qu'est-ce c'est ?



Un modèle scientifique est **une représentation simplifiée** de la réalité d'un phénomène permettant d'élaborer une théorie plus ou moins précise adhérent aux observations et de **prévoir** ce qu'il se passerait dans certaines conditions.



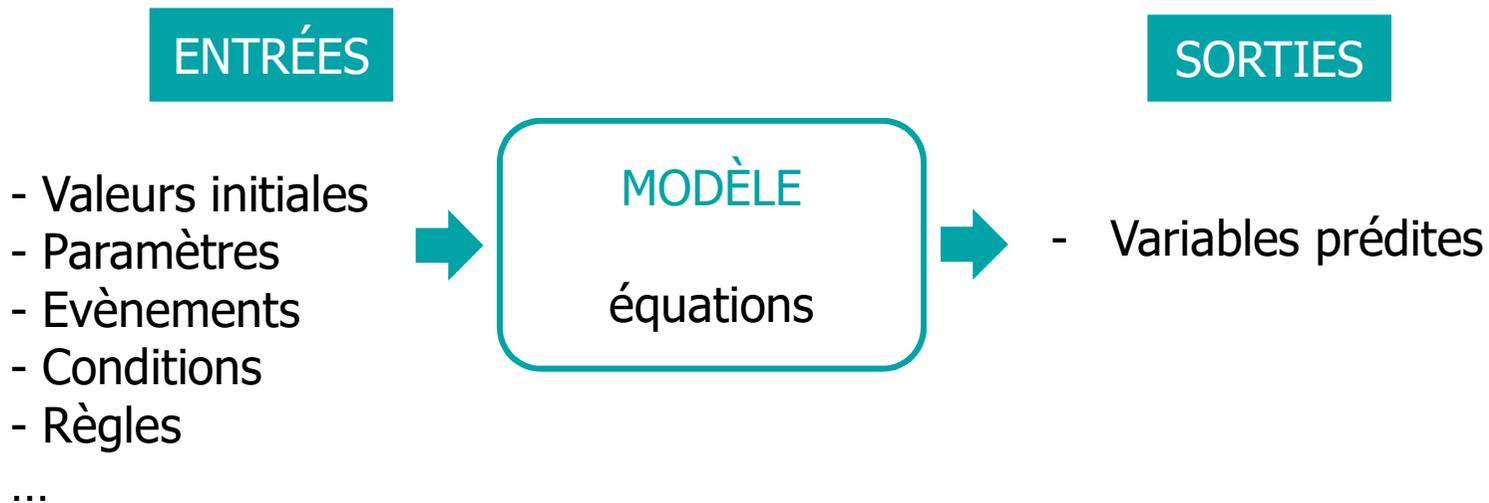
INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

> Un modèle (mathématique) qu'est-ce c'est ?

Les ingrédients d'un modèle :



> à quoi ça sert ?

1. A **expliquer** un phénomène passé (ex. crash boursier)

➤ Indices boursiers

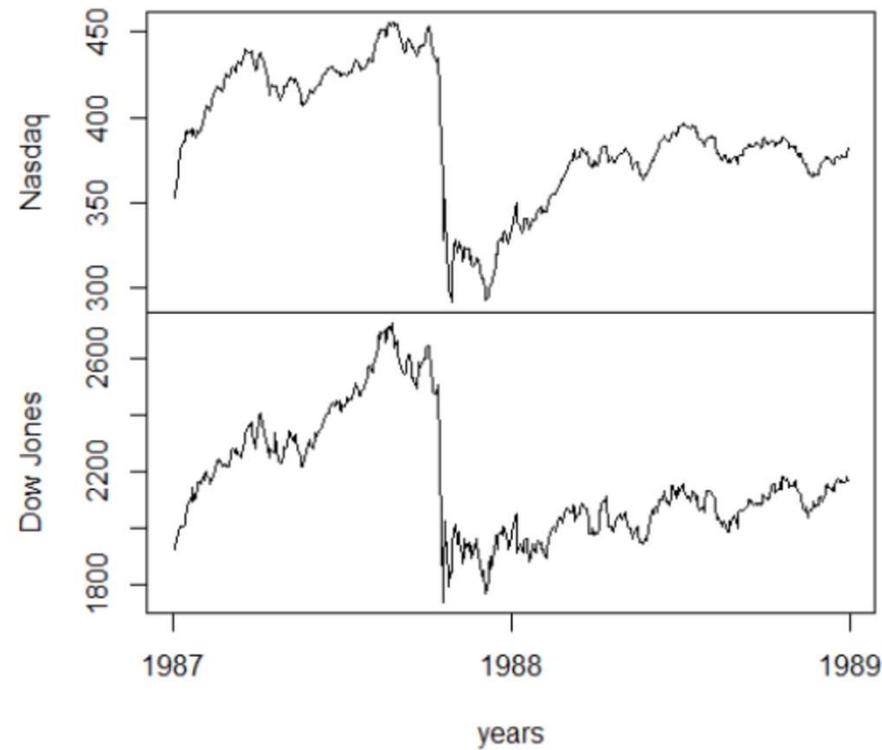


Figure: Black Monday (19 octobre 1987)



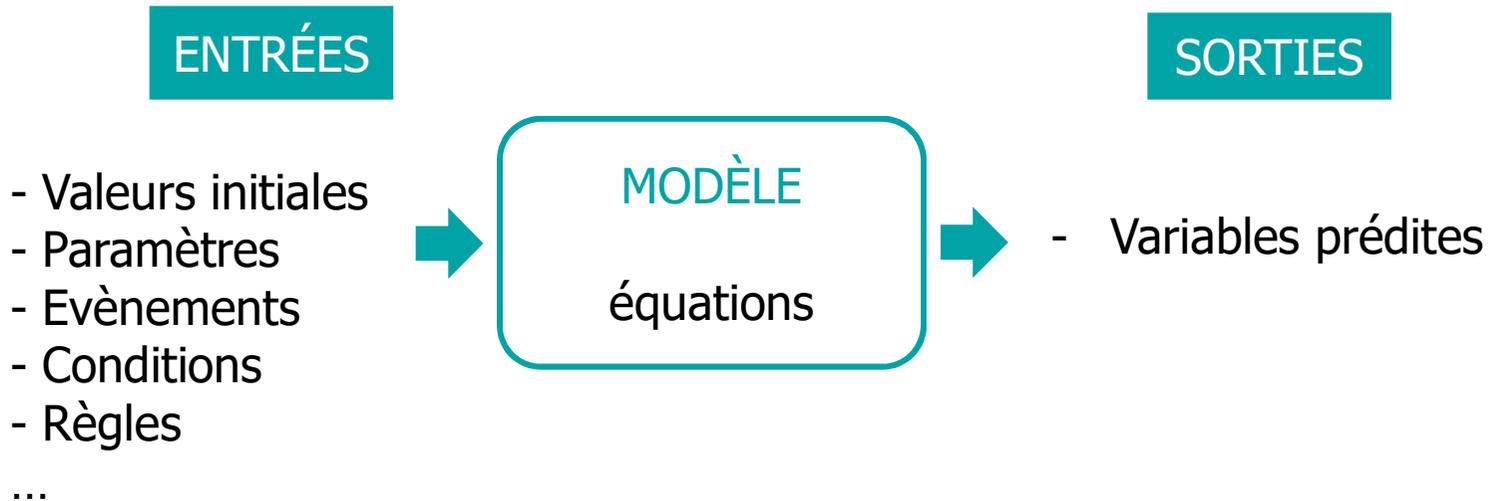
INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

➤ Un modèle (mathématique) qu'est-ce c'est ?

Les ingrédients d'un modèle :

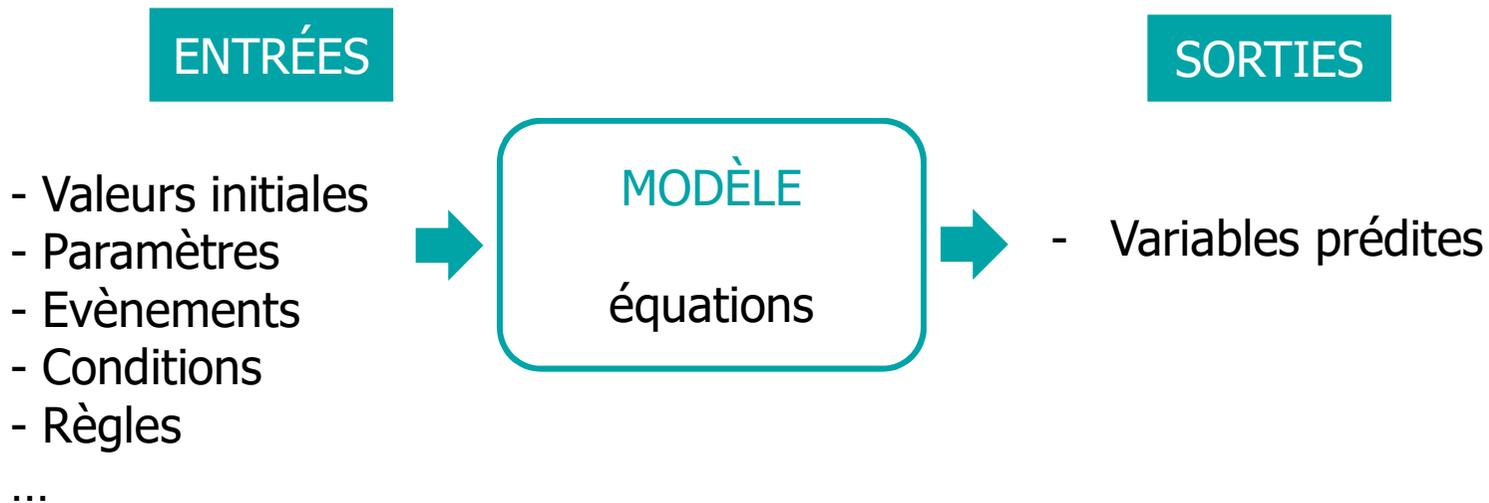


➤ à quoi ça sert ?

1. A **expliquer** un phénomène passé (ex. crash boursier)
2. A **comprendre** les évènements actuels (ex. ouragan)

➤ Un modèle (mathématique) qu'est-ce c'est ?

Les ingrédients d'un modèle :



➤ à quoi ça sert ?

1. A **expliquer** un phénomène passé (ex. crash boursier)
2. A **comprendre** les évènements actuels (ex. ouragan)
3. A **prédire** un phénomène à venir (ex. évolution du Covid19)



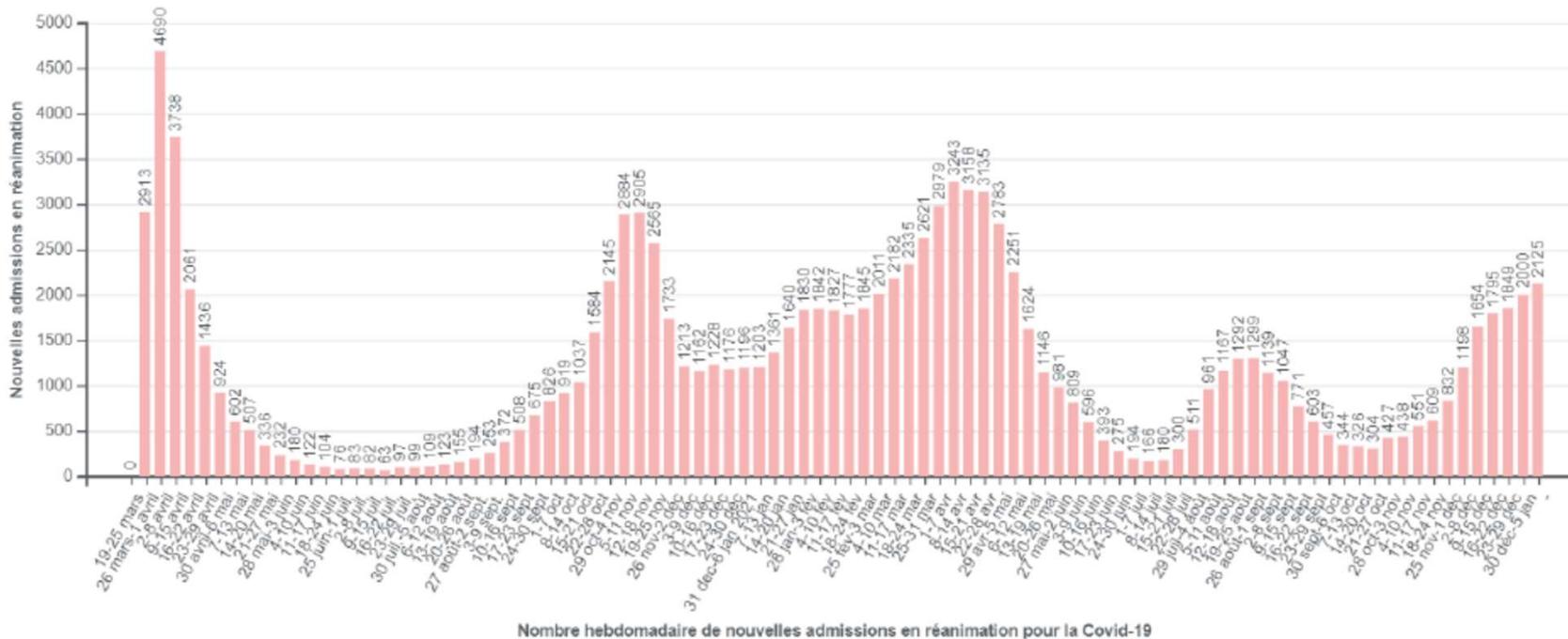
INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

➤ Évolution du Covid19

Nombre hebdomadaire de nouvelles admissions en réanimation dans les hôpitaux



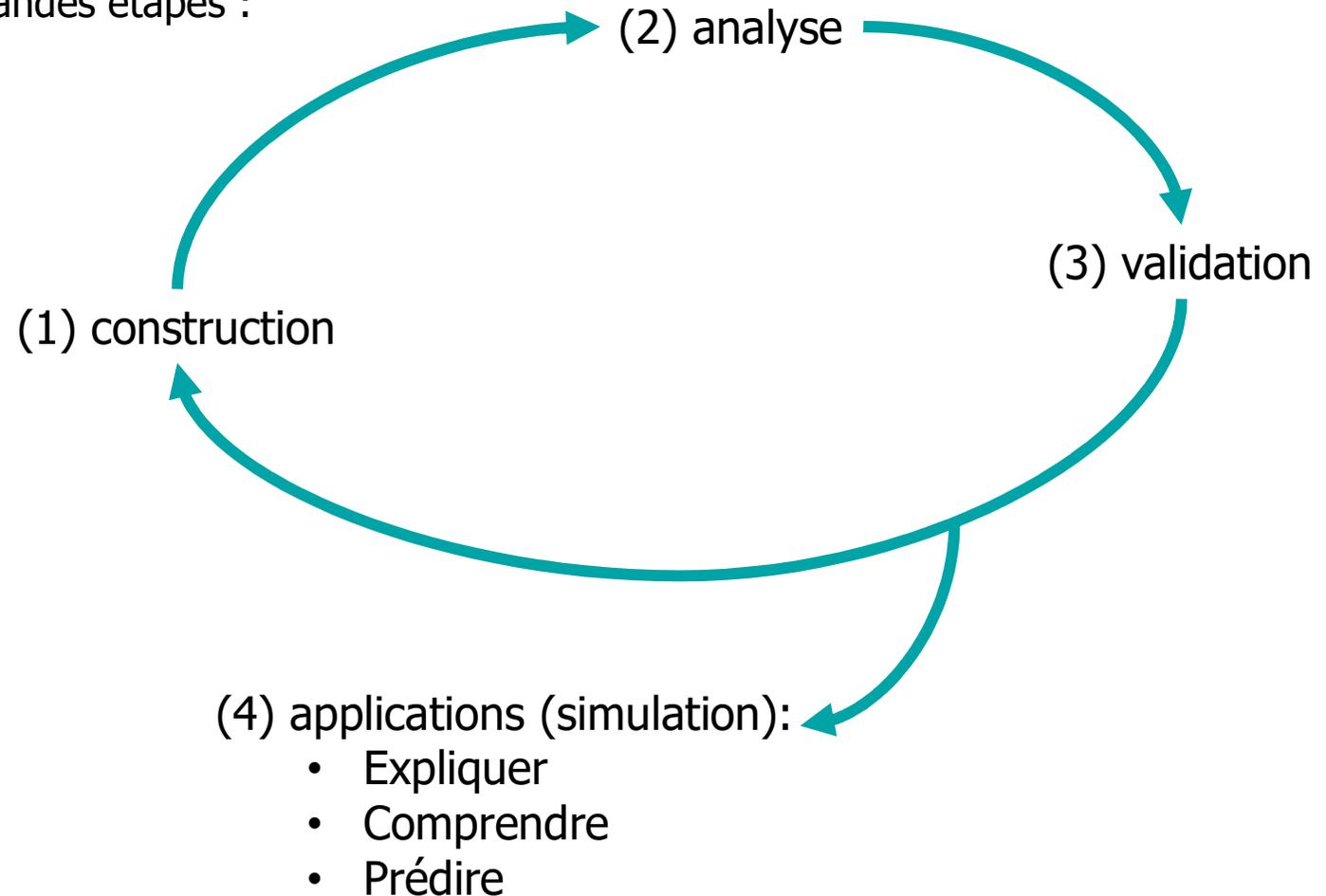
INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

➤ Comment fait-on les modèles ?

Les quatre grandes étapes :



INRAE

Atelier modélisation et simulation

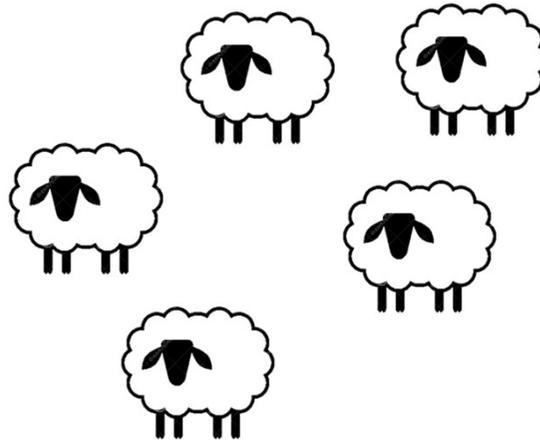
21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

➤ Comment fait-on les modèles ?

(1) construction

→ Objectif = prédire un phénomène de croissance

Année 0



Exemple :
taille d'une population

$$N(0) = 5$$

Hypothèses :

Taux de natalité = 35%

Taux de mortalité = 20%



INRAE

Atelier modélisation et simulation

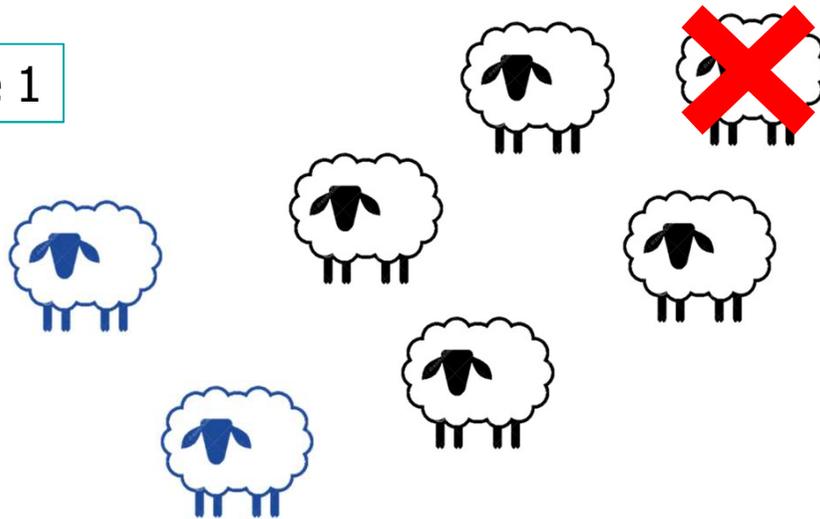
21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

➤ Comment fait-on les modèles ?

(1) Construction

→ Objectif = prédire un phénomène de croissance

Année 1



Exemple :
taille d'une population

$$N(0) = 5$$

$$N(1) = 5 + 2 - 1 = 6$$

Hypothèses :

Taux de natalité = 35% → $0,35 \times 5 = + 1,75 (\sim + 2)$

Taux de mortalité = 20% → $0,2 \times 5 = - 1$



INRAE

Atelier modélisation et simulation

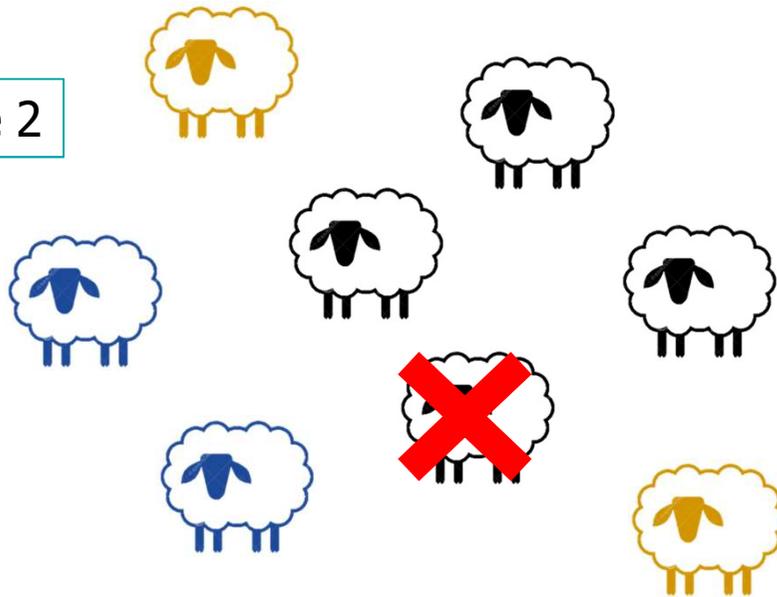
21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

➤ Comment fait-on les modèles ?

(1) Construction

→ Objectif = prédire un phénomène de croissance

Année 2



Exemple :
taille d'une population

$$N(0) = 5$$

$$N(1) = 5 + 2 - 1 = 6$$

$$N(2) = 6 + 2 - 1 = 7$$

Hypothèses :

Taux de natalité = 35% → $0,35 \times 6 = + 2,1 (\sim +2)$

Taux de mortalité = 20% → $0,2 \times 6 = - 1,2 (\sim -1)$



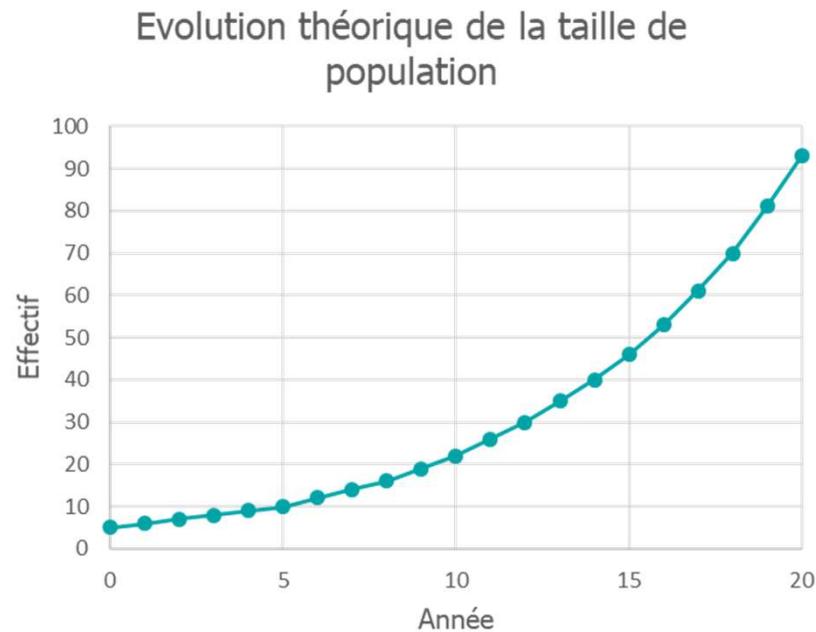
INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

➤ Comment fait-on les modèles ?

(1) Construction



$$\frac{dN}{dt} = \text{taux}_{naiss} \times N - \text{taux}_{mort} \times N$$

$$\frac{dN}{dt} = (\text{taux}_{naiss} - \text{taux}_{mort}) \times N$$

$$\frac{dN}{dt} = r \times N$$

→ r le taux de croissance
ici $r = +35\% - 20\% = +15\%$



INRAE

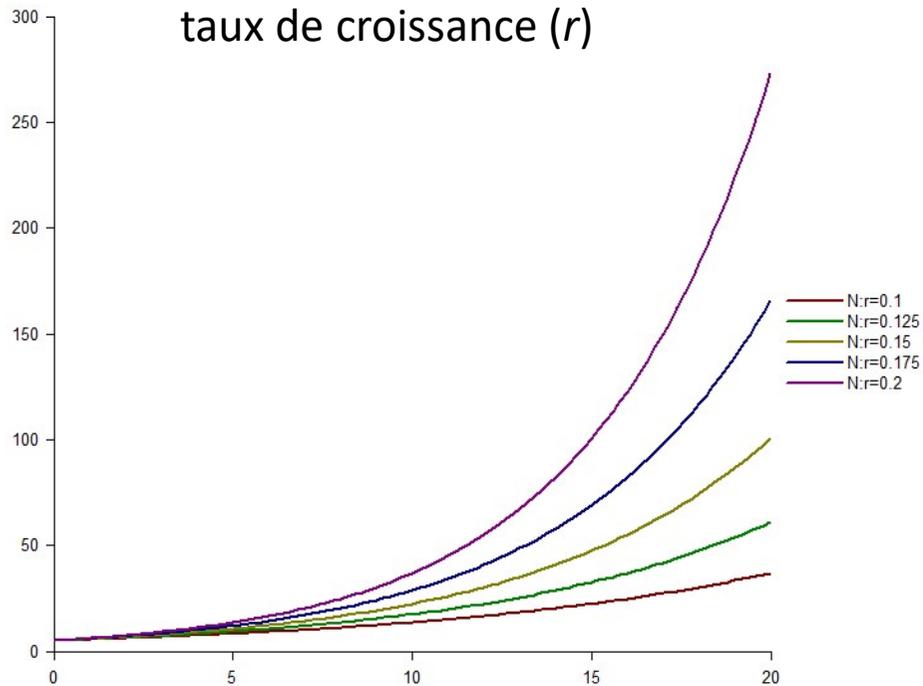
Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

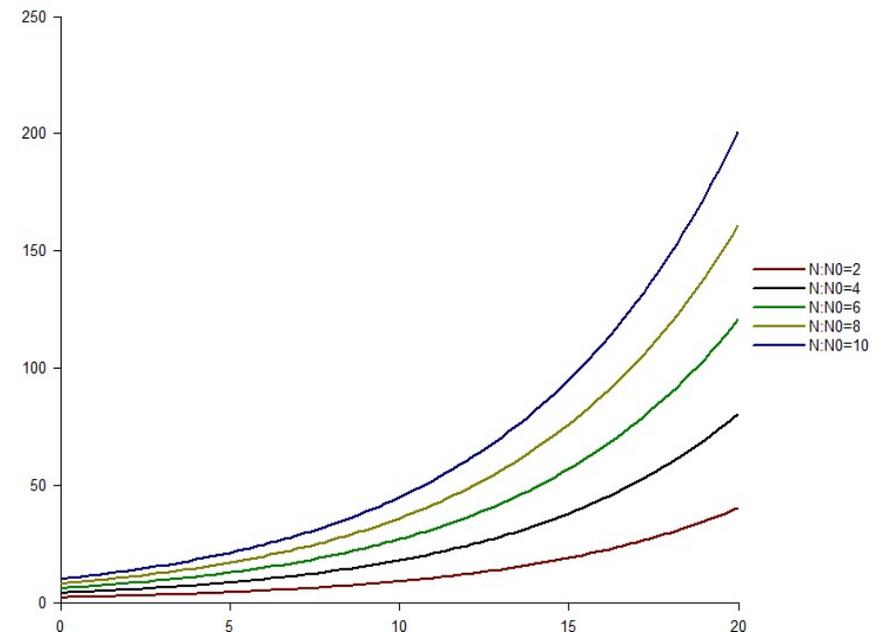
➤ Comment fait-on les modèles ?

(2) Analyse

Sensibilité du modèle au
taux de croissance (r)



Sensibilité du modèle à la
taille initiale N_0



INRAE

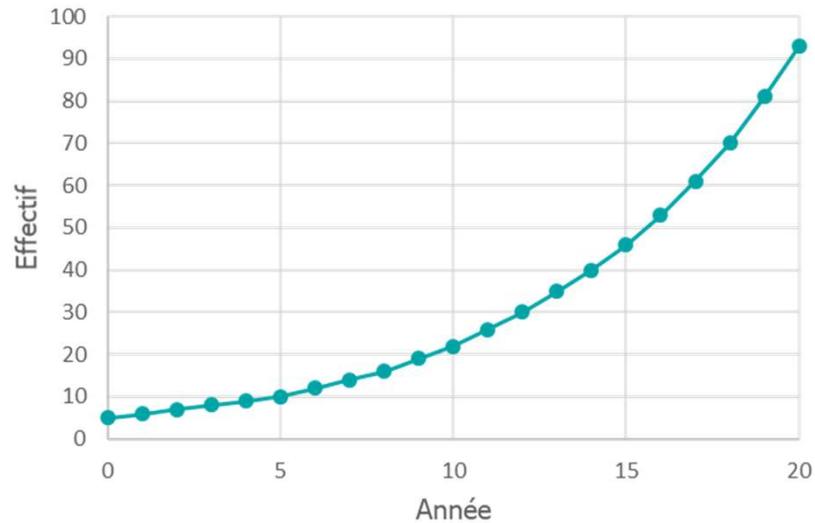
Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

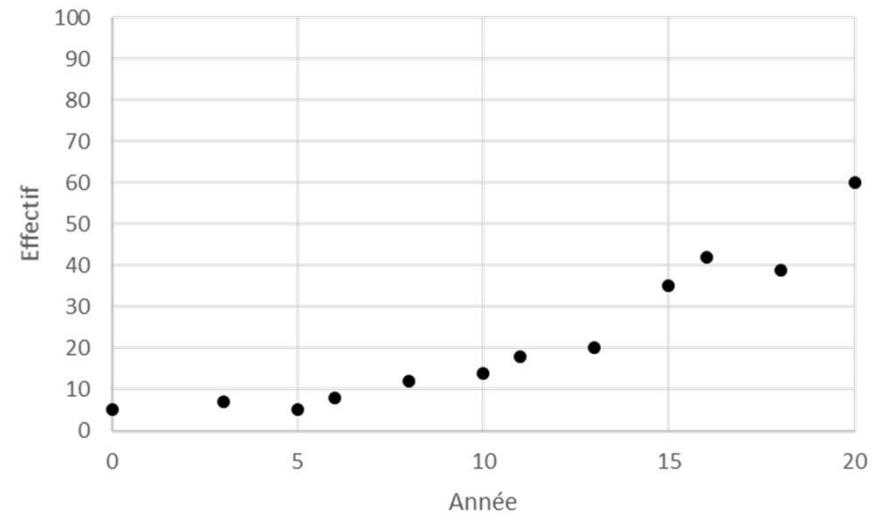
➤ Comment fait-on les modèles ?

(3) Validation

Evolution théorique
de la taille de population

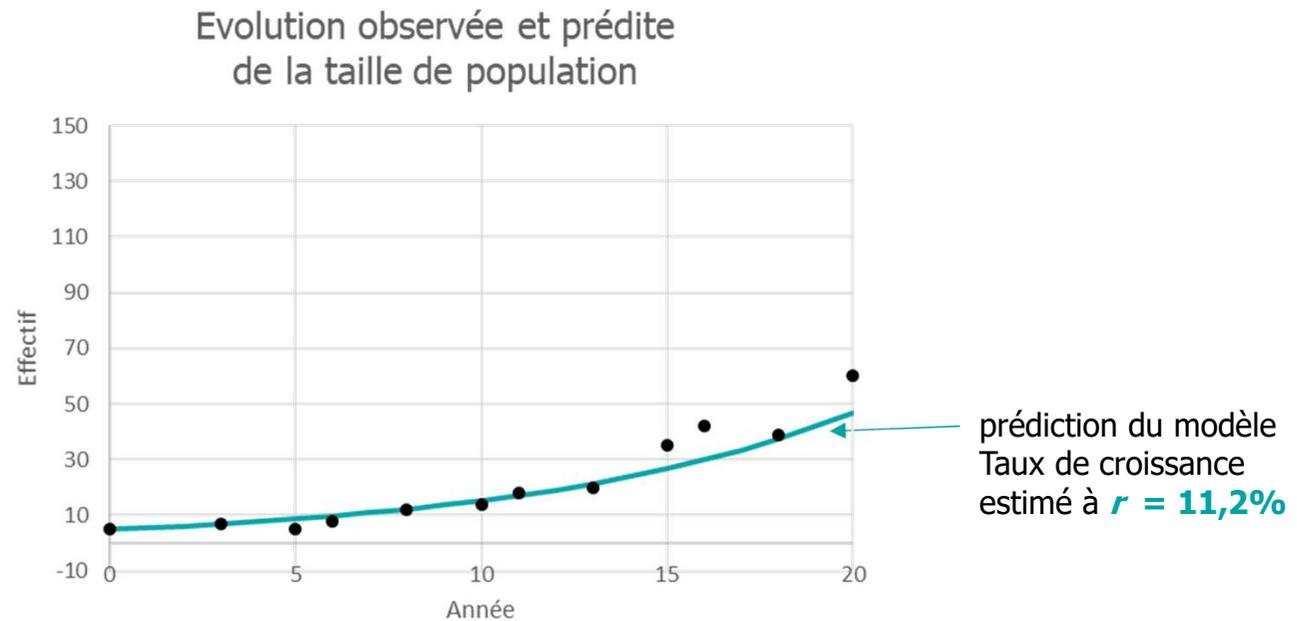


Evolution observée
de la taille de population



➤ Comment fait-on les modèles ?

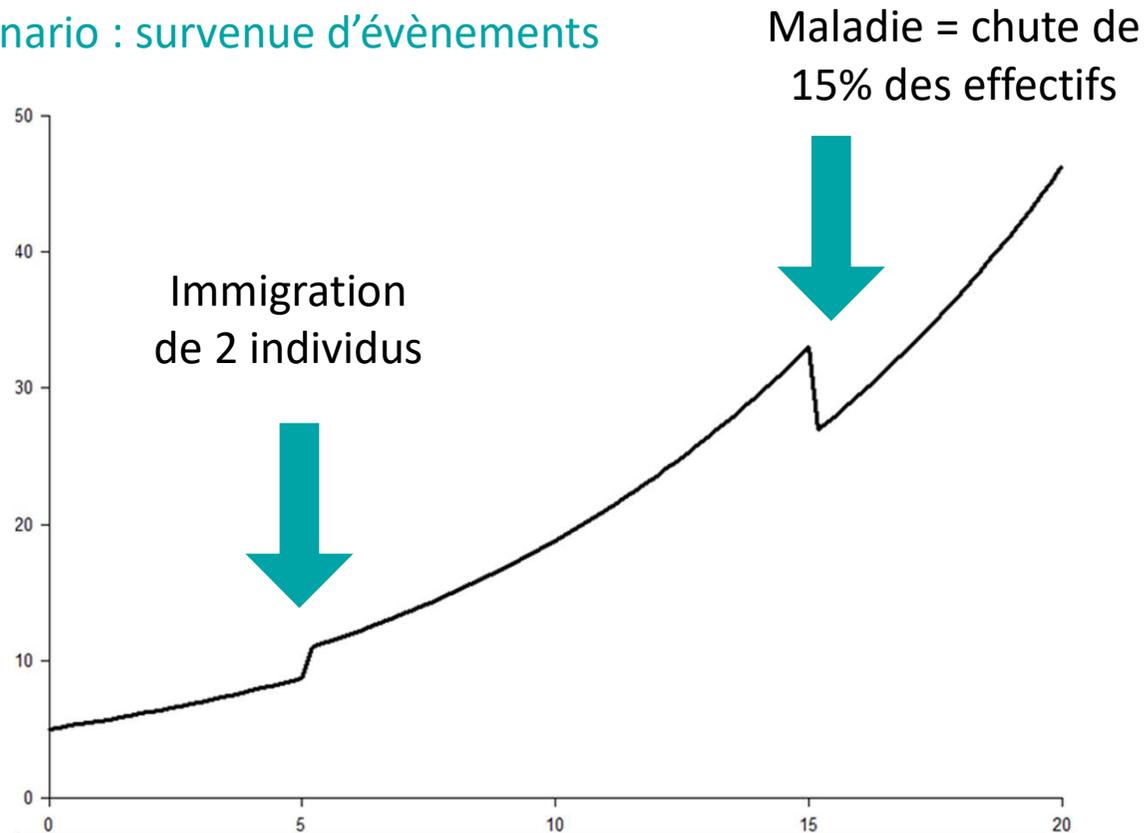
(3) Validation



➤ Comment fait-on les modèles ?

(4) Application – exemple 1

➔ Scénario : survenue d'évènements



INRAE

Atelier modélisation et simulation

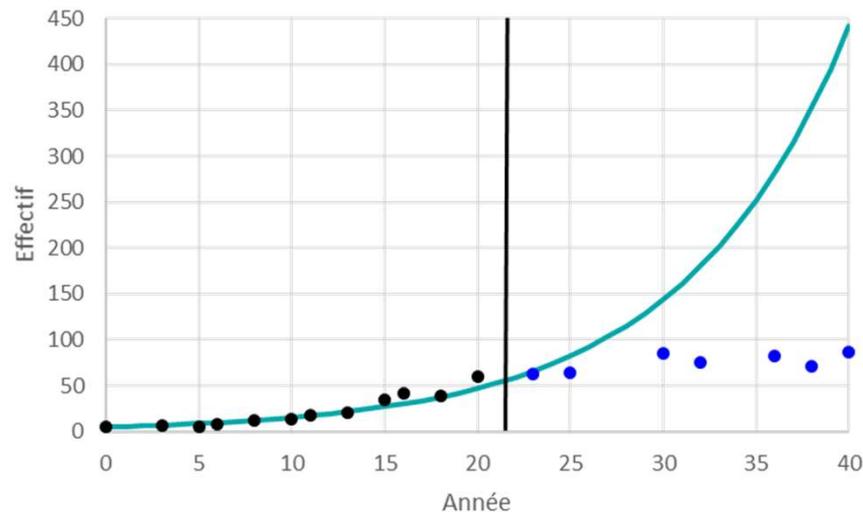
21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

➤ Comment fait-on les modèles ?

(4) Application – exemple 2

→ Quelle taille de population après 40 ans ?

Evolution observée et prédite de la taille de population



Une taille limite de population ?

→ exemple : ressources disponibles limitées



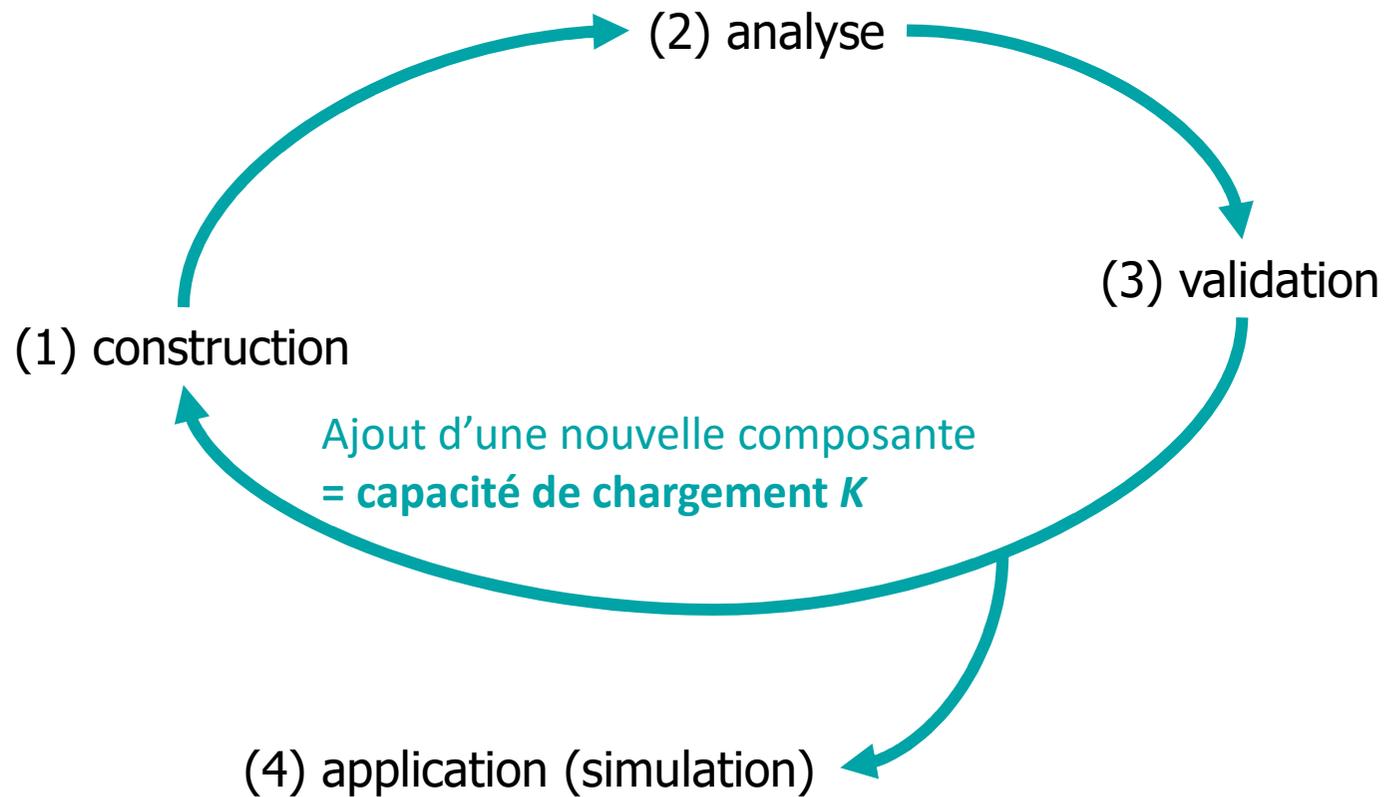
INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

> Comment fait-on les modèles ?

Les quatre grandes étapes :



INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

➤ Comment fait-on les modèles ?

(4) Application – exemple 2

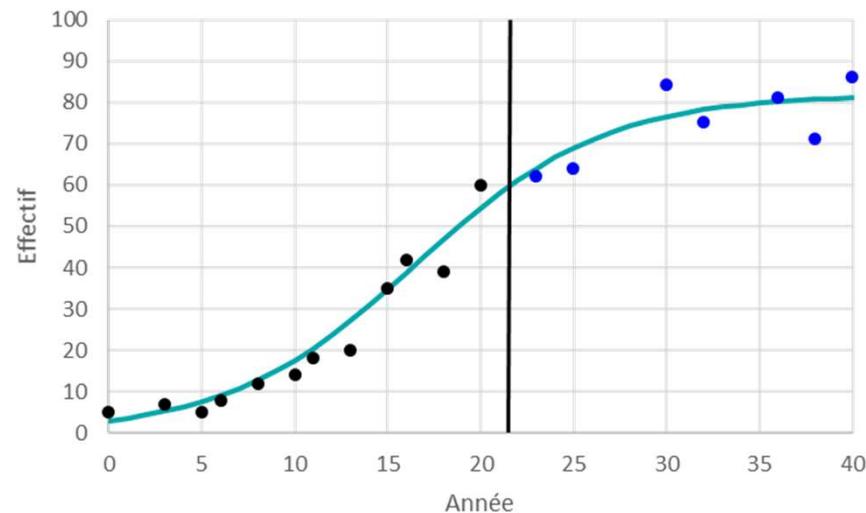
→ Quelle taille de population après 40 ans ?

$$\frac{dN}{dt} = r \times N$$

→ Paramètre r non constant mais dépendant de la taille de population N par rapport à la capacité K

$$r = r_0 \times \left(1 - \frac{N}{K}\right)$$

Evolution observée et prédite de la taille de population



nouveau modèle avec 2 paramètres :

- Taux de croissance de base estimé à $r_0 = 19,8\%$
- Capacité de chargement $K = 81,9$ individus



INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

> Plan

Pourquoi êtes-vous venus à cet atelier?

Modélisation

Pour vous c'est quoi un modèle ? A quoi ça sert ?

Comment fait-on un modèle ?

Un exemple : la prévision climatique

Simulation

Intérêts/inconvénients

Exemples

Travaux récents à l'INRAE



INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

➤ Exemples, changement climatique

Fonctionnement de la machine climatique:

Interactions entre l'atmosphère, l'océan, la glace de mer, les continents

Les modèles simulent l'évolution du climat à longues échéances

Des paramètres du modèle: émissions de CO₂, critères socioéconomiques...

➤ Simulation des différents « scénarios » (évolutions possibles)



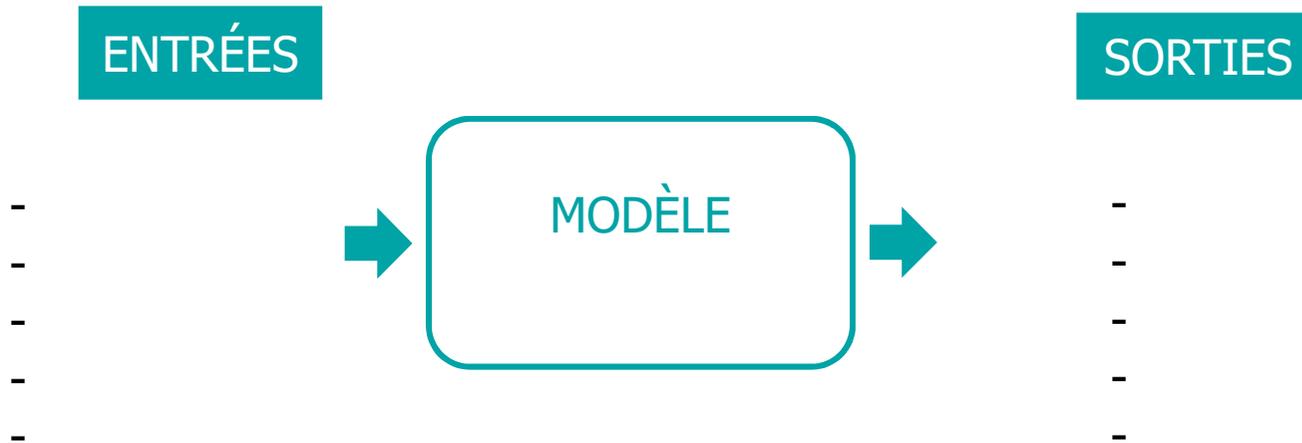
INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

➤ **Modèle changement climatique**

Les ingrédients du modèle :



INRAE

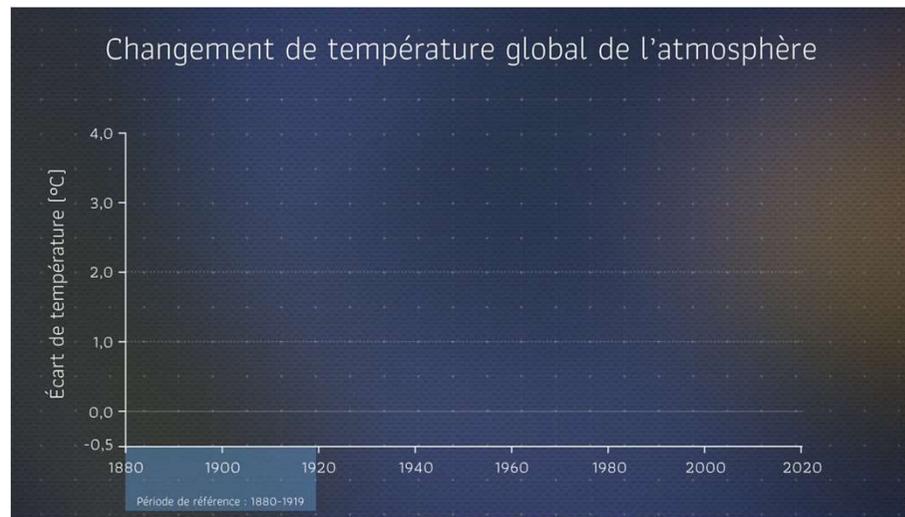
Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

➤ Exemples, changement climatique

Deux modèles climatiques:

1. Développé l'un par le **CNRM** (Centre National de Recherches Météorologiques)
2. L'autre à l'**IPSL** (Institut Pierre-Simon Laplace – Sciences du climat)



Source:

<https://météofrance.com/changement-climatique/quel-climat-futur/nouvelles-simulations-du-climat-quel-rechauffement-en-2100>

SSP: Search Socio-Economic Pathway
Rattaché à la
Concentration en CO2

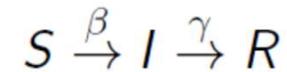


INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

➤ Exemple, modèle épidémiologique, Modèle SIR



S: Personnes Saines (Susceptible)

I: Personnes infectées (Infected)

R: Personnes Gueries/immunisées (Removed)

▶ β : taux de transmission

▶ γ : taux de guérison

$$\begin{cases} \frac{dS(t)}{dt} = -\beta S(t)I(t) \\ \frac{dI(t)}{dt} = \beta S(t)I(t) - \gamma I(t) \\ \frac{dR(t)}{dt} = \gamma I(t) \end{cases}$$

Source:

<http://images.math.cnrs.fr/Modelisation-d-une-epidemie-partie-1.html>



INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

> Plan

Pourquoi êtes-vous venu a cet atelier?

Modélisation

A quoi sert la modélisation?

Mais qu'est-ce que c'est un modèle ?

Simulation

Intérêts/Inconvénients

Exemples

Travaux récents a l'INRAE



INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

➤ Intérêts/Inconvénients

Intérêts/Inconvénients?

- Reproduire un phénomène pouvant être couteux, long a produire (p. ex. données élevages)
- Reproduire un phénomène rare (ex. passage d'un comète, crue du Nil, séisme)
- Contrôler des valeurs théoriques, inconnues en pratique
- Analyser la puissance de test statistique, les validités a petites tailles d'échantillon
- Tester la sensibilité, spécificité, robustesse des méthodes
- Juger de la capacité prédictive d'un modèle.
- Tester la robustesse d'un modèle lorsque les hypothèses ne sont pas vérifiées



INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

➤ Simulations

Inconvénients:

- Impossibilité en général de simuler exactement la réalité, nécessite de connaître tous les facteurs et les mécanismes impliqués dans l'alea de notre phénomène
- Difficulté à reproduire des comportements humain/animal
- Temps de calculs pouvant être long (nécessite des serveurs de calculs, parallélisations des problèmes, etc.)



➤ Exemples, génération génotypes d'une population

Obtenir les génotypages de une population des moutons sans argent (absence de station expérimental et puces de génotypage)

```
genera_pop_input... x
1 500 500 20 1000 0 ! No. individuals (males and females), no. chromosomes, no. generations, no. generations of expansion !
2 500000 500000 ! Total no. SNP and non-marker loci !
3 0.0025 ! Mutation rate
4 1 ! (1) All chromosomes of the same length (0) Different chromosome lengths !
5 2000000000 1 ! Total genome length in bases, Mb per 1 cM
6 1 ! (1) proportional distribution (0) given distribution!
7 0 ! (0) No map provided; evenly spaced SNPs (1) Map provided !
8 0 ! (0) De novo creation of genotypes (1) Genotypes from file !
9
```

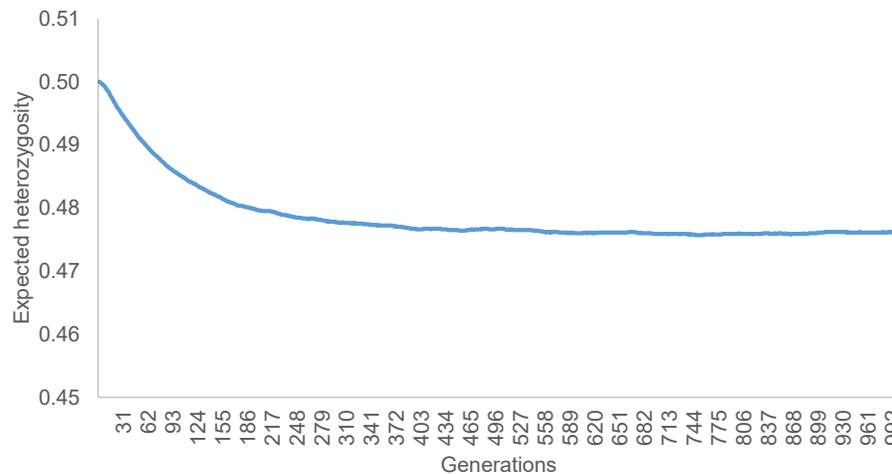
- Mutation
- Recombination
- Accouplement
- Etc...

```
! Generates mutations randomly along the genome !
do j=1,n_chr
  n_mut=2*sum(n_ind)*n_pos(j)*mut_rate
  do n=1,n_mut
    call mother(u)
    k=min(int(u*2+1),2)
    call mother(u)
    l=min(int(u*n_pos(j)+1),n_pos(j))
    call mother(u)
    i=min(int(u*sum(n_ind)+1),sum(n_ind))
    if(genotype(k,l,j,i).eq.1) then
      genotype(k,l,j,i)=0
    else
      genotype(k,l,j,i)=1
    endif
  enddo
enddo
allocate(genotype_t1(2,maxval(n_pos),n_chr,sum(n_ind)))
```



➤ Exemples, génération génotypes d'une population

Population en équilibre mutation-dérive



Ind

Chrom

SNP 3
Hétérozygote 1 0

SNP 1
Homozygote 0 0

```

1 1 0 0 0 0 1 0 0 1 0 1 0 0 0 0 1 1 1 1 0 1 0 0
1 2 1 1 1 0 1 1 1 0 1 1 1 0 0 0 0 1 1 1 0 0 0 0
1 3 0 1 1 0 0 0 1 0 1 1 1 1 0 0 0 1 0 0 0 1 1 0
1 4 1 1 1 0 1 1 0 0 0 1 0 1 0 1 1 1 1 0 1
1 5 1 1 1 0 0 0 1 0 1 0 1 0 1 1 0 1 0 0 0
1 12 0 1 1 1 0 0 1 1 1 1 1 0 1 0 1 1 1 0 1 0 0 0 0
1 13 0 0 1 1 0 1 1 1 1 0 0 1 1 1 0 0 0 0 1 0 1 1 1
1 14 0 1 0 1 1 1 0 0 0 0 1 0 1 1 1 1 0 1 0 1 1 1 0
1 15 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0
1 16 0 1 1 0 0 0 1 0 0 1 1 0 1 0 1 1 1 0 1 0 1 0
1 17 0 1 0 1 1 1 0 0 0 1 1 1 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 0
1 18 0 0 1 0 1 1 1 0 1 1 0 0 1 0 0 0 1 1 1 0 0 1 1
1 19 0 1 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 1 0 1 1 1 1 0
1 20 1 1 0 1 1 0 1 1 0 1 0 0 0 0 0 1 1 1 0 0 0 1 0 1
2 1 0 0 1 0 1 1 1 0 0 1 0 1 1 1 1 1 0 1 0 1 1 1 1 0
2 2 0 1 0 1 1 0 1 0 1 1 0 0 0 1 0 0 0 1 1 1 0 0
2 3 1 0 1 0 0 1 0 1 1 1 1 1 0 1 0 1 0 1 0 1 0 1
2 4 1 1 0 1 1 1 0 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 1 1 0 0 0
2 5 0 1 1 1 1 1 1 0 0 0 1 0 0 0 1 0 0 0 1 1 1
2 6 0 1 0 0 0 0 1 0 0 1 1 1 0 1 1 0 0 0 1 0 0
2 7 0 0 0 1 1 0 1 0 1 1 1 0 1 0 0 1 0 1 1 1 0 1
2 8 1 0 0 1 0 1 0 1 0 0 0 0 1 1 1 1 0 1 0 0 0
2 9 0 1 1 1 1 1 0 1 1 0 0 1 0 0 1 0 0 1 0 1 0 1 0
2 10 1 0 1 0 0 1 1 0 0 1 0 1 0 0 0 0 1 1 1 1 0 0
2 11 0 0 1 1 0 0 0 1 0 0 1 1 0 1 0 0 1 0 1 1 1 0
2 12 0 0 0 0 1 0 0 0 1 0 1 1 1 0 1 1 1 1 0 0 0
2 13 0 1 0 0 1 1 1 1 1 0 1 0 0 1 1 1 0 1 0 0 1 1 1
2 14 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0 1 1 0 1 1 1 0 0 0 0 1
2 15 1 1 1 1 0 0 0 1 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 1 0
2 16 0 1 0 1 1 0 1 0 1 1 1 0 0 1 1 0 0 1 1 0 1 1
2 17 0 1 1 1 0 1 0 1 1 0 1 0 0 0 1 0 0 1 0 0 0
2 18 0 0 1 1 1 1 0 1 1 0 0 1 1 0 0 1 0 0 0 1 1
2 19 0 1 0 0 1 1 1 1 1 0 1 1 0 0 1 1 1 1 1 1 0 1
2 20 1 0 1 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 1 0 1 0 0 1
3 1 1 0 1 1 1 0 0 0 0 1 1 1 1 0 1 1 0 1 1 1 0
3 2 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 0 0 1 1 1 0 1 1 0
  
```

- Simulations complémentaires (phenotypes, par ex. Prod. lait)
- Sélection



INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

➤ Travaux récents dans GenPhySE

- Vincent Le, Tom Rohmer & Ingrid David. Impact of disturbance on the estimation of the genetic parameters and breeding values for production traits. 2022, *Animal*
<https://doi.org/10.1016/j.animal.2022.100496>
 - Simulation de courbes de croissances de population porcines soumises à perturbation (à l'échelle du troupeau)
 - Impact des perturbations sur l'estimation des paramètres génétiques

- Tom Rohmer Rshiny: Simulation de phénotypes multivariées, pour une population sous sélection aléatoire, soumise à des effets environnementales dont la structure de dépendance est non-Gaussienne
https://testmyshinyapply.shinyapps.io/Shiny_bivariate_phen/



➤ Travaux récents dans GenPhySE

- Andres Legarra, Carolina Garcia-Baccino, Yvonne Wientjes & Zulma Vitezica. The correlation of substitution effects across populations and generations in the presence of nonadditive functional gene action. *Genetics*, Oxford University Press, 2021, 219 (4), [10.1093/genetics/iyab138](https://doi.org/10.1093/genetics/iyab138)
 - Approche pour modéliser les effets de substitutions (effets additifs ou de dominance) pour les QTL
 - Validation du modèle par simulations



➤ HAL - INRAE

The screenshot displays the HAL INRAE search results page. At the top, the HAL INRAE logo is visible, along with navigation links: Accueil, Dépôt, Recherche, Consultation -, and Boîte à outils -. A search bar contains the text "modélisation et simulation", which is circled in red. To the left, there are filter sections for "Type de document" and "AUTEUR". The "Type de document" section shows "Article dans une revue" selected. The "AUTEUR" section lists several authors. The search results list four articles, each with a checkbox, a thumbnail, and a title. The first article is "Coffee leaf rust (Hemileia vastatrix) risk management in Central America: contribution of remote interactive simulations" by Grégoire Leclerc et al. The second is "Évaluer numériquement les impacts du changement climatique au sein d'un bassin viticole pour co-construire des stratégies d'adaptation" by Audrey Naulleau et al. The third is "Planifier des systèmes d'assainissement avec les acteurs en intégrant des connaissances techniques expertes : enjeux de modélisation et transfert de WasteWAG au Sénégal" by Melaine Aucante et al. The fourth is "A digital learning tool based on models and simulators for food engineering (MESTRAL)" by Ioana Suciu et al.



INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer

Merci pour votre attention



INRAE

Atelier modélisation et simulation

21 et 22 mars 2022 / Frédéric Douhard, Silvia T. Rodriguez-Ramilo & Tom Rohmer