

# Modélisation et Simulation en Biologie

Master 1 BioInformatique  
Marie Beurton-Aimar  
Université de Bordeaux

# Contenu du Cours

- **Présentation générale sur la modélisation** : domaines d'application, principes et méthodes, outils.
- **Modélisation à l'échelle moléculaire** : interactions, modèles à grains, modèles cinétiques.
- **Modélisation à l'échelle cellulaire** : application à la neurobiologie et neuropharmacologie.
- **Modélisation à l'échelle du tissu** : relation structure fonction.
- **Modélisation à l'échelle de l'organisme et des populations** : interactions individuelles, comportements émergents.

# Présentation Générale

## Qu'est-ce qu'un modèle ?

- Représentation abstraite ET partielle.
- Représentation symbolique d'un élément étudié comme outils de prédiction et d'investigation.

# Présentation Générale

## Qu'est-ce qu'un modèle ?

- Représentation abstraite ET partielle.
- Représentation symbolique d'un élément étudié comme outils de prédiction et d'investigation.

## Objectifs de la modélisation ?

- La compréhension de phénomènes associés à l'élément étudié.
- La question à l'origine du modèle est essentielle pour :
  - sa compréhension
  - sa validation
  - sa réutilisation.

# Présentation Générale

## Qu'est-ce qu'un modèle ?

- Représentation abstraite ET partielle.
- Représentation symbolique d'un élément étudié comme outils de prédiction et d'investigation.

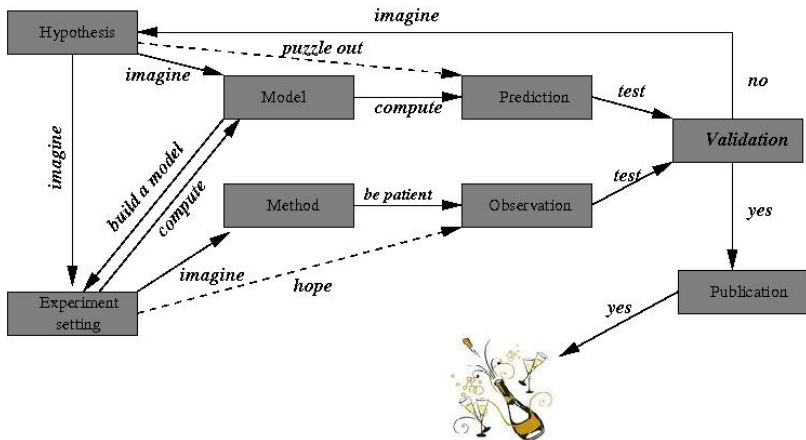
## Objectifs de la modélisation ?

- La compréhension de phénomènes associés à l'élément étudié.
- La question à l'origine du modèle est essentielle pour :
  - sa compréhension
  - sa validation
  - sa réutilisation.

## Analyse des résultats :

- Besoin essentiels d'outils d'analyse.
- Statistiques, Data Mining ...

# Présentation Générale



# Les Différents Types de Modèles

- **Modèles mathématiques** : formalisme de type équations, graphes avec des outils s'appuyant sur les fondements mathématiques comme l'algèbre linéaire, la théorie des nombres, la recherche opérationnelle . . .
- **Modèles informatiques** : utilisent les formalismes mathématiques en conjonction avec les éléments nécessaires à la représentation en machine.
- **Modèles en biologie** : organisme/espèces modèles dont l'objectif est de faciliter/simplifier l'observation des phénomènes. Un modèle en biologie est vu en informatique comme un modèle instancié.

# La Simulation

- **Objectifs :**
  - Reproduire des comportements/process pour les comprendre
- Dépendance aux modèles : connaître les hypothèses, les limites/frontières, les abstractions.
- **Dépendance aux outils :**
  - les lois mathématiques (à relier aux contraintes sur les hypothèses).
  - les limites des algorithmiques/équations.
  - la faisabilité de la simulation : temps, espace mémoire ...



# La Simulation

## Remarques :

- La modélisation informatique conduit inéluctablement à la simulation.
- La visualisation est souvent essentielle dans la validation d'un modèle.
- La visualisation n'est pas suffisante.
- La puissance de la modélisation informatique pose régulièrement la question des limites des mathématiques dans la modélisation du vivant. : modélisation située en environnement 3D, modélisation stochastique,

# Domaines d'Application

- **Systemes complexes :**

- Définition : un système complexe se différencie d'un système compliqué en ceci qu'un système est qualifié de compliqué par le grand nombre de sous systèmes qui le composent. Un système est complexe lorsque ses composants le plus souvent simples, ont des interactions qui engendrent des comportements qui échappent au réductionnisme. On parle de comportements émergents.
- La biologie est le siège de nombreux systèmes complexes.

# Domaines d'Application

- **Systèmes dynamiques :**
  - Définition : un système dynamique est un modèle permettant de décrire l'évolution au cours du temps d'un ensemble d'objets en interaction.
  - Définition des états du système et des transitions entre ces états.
- **Systèmes linéaires/non linéaires.**
- **Systèmes déterministes/stochastiques.**
- **Des modèles informatiques connus :** graphes, réseaux de pétri, automates cellulaires, systèmes multi-agents ...
- Conduit à la simulation :

# Modélisation/Simulation du Vivant

## Caractéristiques :

- Il n'existe pas de plan !
- Une part importante de “trous “de connaissances : une part d' inconnu *non observable*.
- Phénomènes massivement stochastiques.

## Exemples :

- Echelle population : propagation de virus, maladie ...
- Echelle tissulaire/organe : fonction rénale, muscle cardiaque
- Echelle moléculaire : mouvements des molécules, dynamique du nucléole, réactions métaboliques
- Echelle intra/inter molécules : agrégation de filaments d'actines, dynamique moléculaire.
- Bio-mécanique.
- Modèles chimiques/bio-chimiques et bio-physiques.

# Modèles Proie-Prédateur

## • Equations de Lotka-Volterra

- Soit  $x$  les proies,  $y$  les prédateurs
- Soit  $\alpha, \theta$ , resp. le taux de reproduction des proies, des prédateurs
- Soit  $\beta, \gamma$ , resp. le taux de mortalité des proies, des prédateurs.
- On écrit :

$$\frac{dx(t)}{dt} = x(t)(\alpha - \beta y(t))$$

$$\frac{dy(t)}{dt} = -y(t)(\gamma - \theta x(t))$$

- Les proies sont censées avoir une source illimitée de nourriture.
- Le taux de prédation est supposé proportionnel à la fréquence de rencontre entre les proies et les prédateurs.
- La croissance des prédateurs est affectée par la quantité de nourriture disponible et par le nombre de morts naturelles.

# Modèles Proie-Prédateur

