

Table des matières

Liste des tableaux	xv
Avant-Propos	xvii
1 Contexte de travail	xvii
2 Structure du document	xviii
3 Remarque générale avant lecture	xx
Chapitre 1 Introduction générale	1
1.1 Définitions	2
1.1.1 Systémique	2
1.1.2 Échelles – Niveaux d’organisation – Niveaux de description	3
1.1.3 Systèmes complexes	6
1.1.4 Modélisation et simulation	9
1.2 Paradigmes de modélisation	10
1.2.1 Équations différentielles	10
1.2.2 Modèles individus-centrés et écologie théorique	11
1.2.3 Systèmes multi-agents	12
1.2.4 SMA et écologie	14
1.3 Hétérogénéité et intégration de modèles	15
1.3.1 Hétérogénéité, paradigmes et formalismes	16
1.3.2 Hétérogénéité et couplage de modèles	19
1.4 Conclusion	22
Chapitre 2 Présentation de la problématique	23
2.1 Les trois points abordés	25
2.1.1 Premier point : intégration formelle	25

2.1.2	Deuxième point : intégration opérationnelle – représentation des modèles et des expériences	26
2.1.3	Troisième point : intégration pour la simulation multi-échelles	27
2.2	Proposition d’une méthode de simulation multi-échelles	27
2.2.1	Modèles agrégé et individus-centré de la diffusion de particules	28
2.2.2	Laboratoire virtuel pour la détermination de paramètres	30
2.2.3	Couplage des deux modèles	31
2.2.4	Méthode pour le transfert d’échelles	33
2.3	Présentation du système étudié	36
2.3.1	Système réel et question posée	36
2.3.2	Le modèle à petite échelle : un IBM conçu comme un système d’agents réactifs	40
2.3.3	Le modèle à plus grande échelle : un système d’équations différentielles	44
Chapitre 3 Intégration formelle		47
3.1	Introduction	49
3.2	Le formalisme DEVS	50
3.2.1	DEVS atomique	51
3.2.2	DEVS couplé	54
3.2.3	Importance de DEVS pour la suite	56
3.3	DEVS : une sémantique opérationnelle	56
3.4	Du paradigme d’agents réactifs situés vers le formalisme DEVS	59
3.4.1	Formalisation d’un agent réactif en DEVS	60
3.4.2	Formalisation de l’environnement	64
3.4.3	Formalisation d’un SMA orienté simulation	67
3.4.4	Formalisation du changement dynamique de structure d’un modèle	68
3.5	Formalisation des agents copépodes dans leur environnement	70
3.5.1	Le système d’agents réactifs situés	70
3.5.2	Le modèle des agents copépodes	71
3.5.3	Le modèle de l’environnement	79
3.6	DEVS pour le couplage SMA – équations différentielles	80
3.6.1	Présentation du système d’équations différentielles comme un système à temps discret	81
3.6.2	Couplage formel des deux modèles	83
3.6.3	Un mot sur l’implémentation	87

3.7	Discussion	88
3.7.1	Sur l'usage de DEVS pour la formalisation des SMAs	89
3.7.2	Sur l'importance de l'intégration au niveau formel	91
3.8	Conclusion	92
Chapitre 4 Intégration opérationnelle		95
4.1	Introduction	96
4.2	Un <i>framework</i> pour l'intégration de modèles hétérogènes	97
4.2.1	La couche opérationnelle	98
4.2.2	La couche simulation	100
4.2.3	La couche modèle	103
4.2.4	La couche sémantique	105
4.3	Description des modèles	106
4.3.1	Description de l'espace	107
4.3.2	Description du temps	108
4.3.3	Description d'un modèle	110
4.3.3.1	Les modèles atomiques	110
4.3.3.2	Les modèles couplés	111
4.3.4	Description des données	113
4.4	Description des expériences	116
4.4.1	Laboratoire virtuel	116
4.4.2	Spécification des expériences	118
4.5	Discussion et conclusion	121
Chapitre 5 Intégration pour la simulation du transfert d'échelles		125
5.1	Sensibilité du modèle	127
5.1.1	À propos des générateurs de nombres pseudo-aléatoires	127
5.1.2	Sensibilité aux choix de représentation	129
5.1.3	Observation d'une première fonction émergente	133
5.2	Construction et paramétrage d'une réponse fonctionnelle à l'aide d'un SMA	134
5.2.1	Contexte théorique	135
5.2.2	Méthodes	137
5.2.3	Simulations et construction de la réponse fonctionnelle	141
5.3	Couplage de modèles et transfert d'échelle	147
5.3.1	Paramétrage du modèle proies-prédateurs	148

5.3.2	Couplage des modèles	150
5.4	Discussion	155
5.4.1	À propos du copéode	155
5.4.2	Sur l'apport à la modélisation des systèmes complexes	157
5.5	Conclusion et perspectives	161
Chapitre 6 Conclusion générale		165
6.1	Synoptique de nos travaux	166
6.2	Apports de cette thèse	166
6.3	Perspectives	167
Annexe A Document Type Definition		169
A.1	DTD pour MLMC (Meta Language for Model Coupling)	169
A.2	DTD pour MLVE (Meta Language for Virtual Experiments)	172
Annexe B Modèle mathématique de l'ingestion de proies par le copéode		175
Annexe C Résolution analytique du modèle d'ingestion		179
Annexe D Simulateurs abstraits pour DEVS		183
D.1	Simulateur abstrait pour un modèle DEVS atomique	183
D.2	Simulateur abstrait pour un modèle DEVS couplé	184
D.3	Simulateur abstrait pour le coordinateur racine	186
Annexe E Modèles formels		187
E.1	Modèle couplé de l'agent copéode	187
E.2	Modèle atomique de perception	188
E.3	Modèle atomique de gestion des rebonds	189
E.4	Modèle atomique de changement de direction aléatoire	189
E.5	Modèle atomique de gestion de l'énergie	190
E.6	Modèle atomique de l'environnement	190
E.7	Modèles atomiques de l'activité et de l'environnement reformalisés	192
Bibliographie		195

Table des figures

1.1	Échelles spatio-temporelles caractéristiques des systèmes vivants. Nous remarquons que l'augmentation des dimensions selon une échelle entraîne l'augmentation des dimensions sur l'autre. D'après A. Pavé [Pav94].	4
1.2	Cadre conceptuel de la modélisation et de la simulation par Zeigler & Sarjoughian. Ce cadre définit six couches interdépendantes qui correspondent à des problématiques précises (voir le texte pour les détails).	15
1.3	Correspondance entre les spécifications à temps dicret et à temps continu (d'après [ZKP00]). Les systèmes quantifiés représentent une alternative à la discrétisation classique du temps pour la résolution des équations différentielles [Kof02]. DEV&DESS est un formalisme qui combine le temps discret et le temps continu. Cette figure montre que DEVS peut être considéré comme un cadre formel pour l'intégration de modèle hétérogène.	18
1.4	RunTime Interface	21
2.1	Écart quadratique moyen $\frac{1}{2}\bar{\sigma}^2$ en fonction du temps. La pente de cette droite correspond au coefficient de diffusion D	31
2.2	Simulation centrée individus du phénomène de diffusion pour 10^5 particules (croix) et équation de Fick (ligne pointillée) à $t = 30s$. La simulation et la courbe correspondent presque parfaitement. On considère les deux modèles comme équivalents par leur trace d'exécution.	32
2.3	Diagramme de séquences UML pour l'illustration du couplage entre modèle numérique et modèle individus-centré. Pour chaque pas d'espace Δi , le modèle numérique utilise un modèle individus-centré initialisé avec la concentration correspondante pour déterminer le coefficient de diffusion local.	33
2.4	Résultat de la simulation du phénomène de diffusion pendant $30s$ en considérant que la vitesse des particules diminue avec la concentration (ligne pleine) par comparaison à l'équation de Fick où la vitesse est supposée constante.	34
2.5	Approche conceptuelle pour la modélisation du transfert d'échelle entre deux niveaux d'organisation dans les systèmes naturels. La définition de calcul émergent et le principe d'expériences virtuelles sont à la base de cette approche. Les flèches illustrent à la fois le flot de données échangées par les deux modèles (côté informatique) et la boucle de rétroaction d'un niveau d'organisation sur l'autre.	35
2.6	Vue dorsale de quelques copépodes adultes. Les « antennes » au niveau de la tête sont des organes importants pour la perception des proies. La taille des copépodes adultes est très variable (de 0,5mm à 1cm environ).	37

2.7	Photographie au microscope électronique d'une coupe transversale de la micro-algue <i>Thalassiosira weissflogii</i> . Cette espèce fait partie du phytoplancton marin. Elle mesure entre 10 et 20 μm de long. Sa couleur varie du brun au vert, en passant par le jaune, en fonction de sa teneur en chlorophylle.	38
2.8	Modèle conceptuel du processus d'ingestion élaboré par P. Caparroy [CC96]. Les pointillés entourent les deux compartiments qui nous intéressent plus particulièrement. Le compartiment proies dans l'estomac permet de quantifier l'appétit du copépode (effet de satiété). Le compartiment proies assimilées permet de quantifier l'énergie disponible pour le copépode.	42
2.9	Résumé schématique du modèle d'agents réactifs du copépode. Le comportement alimentaire est contrôlé à la fois par des fonctions mathématiques (simulant l'activité métabolique de l'animal) et par le déplacement en 3D du volume de perception (demi-cercle hachuré) et de capture (demi-cercle doublement hachuré) dans un espace continu. Les cellules de phytoplancton sont fixes. Le dessin n'est pas à l'échelle.	43
3.1	Représentation graphique d'un modèle DEVS atomique. Les triangles à l'intérieur de la boîte figurent les ports d'entrée. Les triangles à l'extérieur de la boîte figurent les ports de sortie.	51
3.2	Exemple de graphe de transitions d'un modèle DEVS atomique. Les lignes pointillées verticales représentent les dates d'occurrences d'évènements. Les cercles pleins représentent l'état courant du système et les lignes pleines horizontales l'avancement du temps. Une transition est marquée par le passage d'un niveau à un autre sur la verticale (voir le texte pour le déroulement du scénario).	53
3.3	Représentation graphique d'un modèle DEVS couplé. Le nom des modèles est en lettres capitales. Le nom des ports est en minuscules.	54
3.4	Le simulateur abstrait d'un modèle atomique. Il correspond à l'algorithme de simulation de la dynamique d'un modèle DEVS atomique. Les évènements d'entrée et de sortie sont décrits dans le texte et l'algorithme est donné en annexe D.1	57
3.5	Traduction d'un modèle DEVS couplé dans sa hiérarchie de simulateurs abstraits. À gauche figure la hiérarchie des modèles atomiques DEVS et à droite la hiérarchie des simulateurs et coordinateurs associés. Chaque coordinateur correspond au simulateur abstrait d'un modèle DEVS couplé. L'algorithme d'un coordinateur est donné en annexe D.2 et celui du coordinateur racine, qui correspond à la boucle générale de simulation, en annexe D.3(D'après [ZKP00])	58
3.6	Représentation de la structure des connexions internes du système d'agent réactif en considérant deux agents copépodes. Les noms sur les connexions correspondent au nom des évènements.	71
3.7	Représentation graphique du modèle couplé de l'agent copépode. La formalisation est donnée dans le texte en ce qui concerne le modèle « activité » et en annexe E.1 pour les autres. En bleu figure les évènements externes attachés aux ports d'entrée ou de sortie du modèle couplé. Les évènements véhiculés par les connexions internes figurent en rouge. Nous voyons le rôle central joué par le modèle d'activité (voir sa formalisation dans le texte).	72

3.8	Représentation simplifiée du calcul de la nouvelle position P' du copépode au temps t_1 à partir de sa position initiale P en fonction de la position A de la cellule cible et du vecteur directeur \vec{D} du copépode. Ici, le copépode est supposé être en phase de recherche. La distance d calculée permet alors de connaître le temps nécessaire pour que le copépode entre en phase de chasse.	77
3.9	Représentation 2D de la discrétisation de l'espace pour le stockage des coordonnées des cellules de phytoplancton. Chaque case en contient un certain nombre. Toutes les cases marquées d'un «x» contiennent les cellules susceptibles d'être vues par le copépode avant qu'il n'atteigne une limite de l'environnement.	80
3.10	Représentation de la structure des connexions du model <i>RAS</i> . Les liens en rouge représentent les nouvelles connexions apportées pour le couplage avec le modèle <i>NP</i> . Les trois points indiquent que le nombre de modèles <i>Copepodes</i> est maintenant quelconque.	85
3.11	Représentation de l'échange d'évènements entre le modèle <i>NP</i> et le modèle <i>SAR</i> . Le temps est croissant de la gauche vers la droite. Le modèle <i>NP</i> demande au modèle <i>SAR</i> de simuler une valeur de g à chaque début de pas d'intégration. Le modèle <i>SAR</i> évalue g durant $T \ll h$, h étant le pas d'intégration du modèle <i>NP</i> . L'état passif du modèle <i>SAR</i> représente l'attente d'un nouvel évènement de demande d'évaluation de g	86
3.12	Structure du modèle de simulation du système couplé. Le modèle pivot joue le rôle d'intégrateur des résultats de simulations des SARs. Nous considérons 30 modèles <i>SARs</i> pour le calcul d'une valeur moyenne de g dans notre application (voir partie 5).	87
3.13	Interaction de type question-réponse dans la spécification du modèle d'agent réactif. L'implémentation ne considère pas les états transitoires et passifs du copépode, ni l'état transitoire de l'environnement mais relève d'un envoi de message (au sens de la programmation objet), donc d'un appel de fonction.	88
4.1	Hiérarchisation en quatre niveaux d'abstraction (ou couches) de notre <i>framework</i> pour l'intégration de modèles hétérogènes. Nous supposons ici deux modèles qui échangent des informations <i>via</i> le réseau. La communication entre couches (flèches horizontales) passe forcément par les niveaux inférieurs (flèches verticales).	97
4.2	Couche opérationnelle de notre <i>framework</i> . Elle se situe entre le réseau (qui symbolise la couche matérielle) et le niveau simulation.	98
4.3	Exemples de connecteurs possibles pour la couche opérationnelle. Les connecteurs sont liés au langage utilisé pour la couche simulation.	99
4.4	Schématisation des <i>wrappers</i> DEVS. Ce sont des interfaces fonctionnelles basées sur l'algorithmique des simulateur abstraits (voir le texte pour les détails).	101
4.5	Définition des fonctions du <i>wrapper</i> en Java. Cette interface est définie par six fonctions issues des simulateurs abstraits de DEVS. L'ensemble des états S n'apparaît pas ici ; il fait partie des attributs du modèle (au sens de la programmation objet).	102
4.6	Intégration de DEVS-bus dans notre <i>framework</i> . Les coordinateurs DEVS peuvent être exécutés sur une même machine ou être distants. Dans ce cas, ils échangent les données <i>via</i> les connecteurs au réseau.	103
4.7	Représentation des différents types de ports attachés à un modèle. Par rapport à la définition des simulateurs abstraits DEVS (voir annexe D page 183), nous avons ajouté les ports d'états, qui permettent de définir les variables observables pour un modèle donné.	110

4.8	Exemple de modèle couplé composé de deux sous-modèles. Noter le fait qu'un port peut être connecté à plusieurs autres.	112
4.9	Diagramme de classes UML montrant les associations entre les entités de simulations et les entités simulées du point de vue des écosystèmes	115
5.1	Comparaison entre le nombre cumulé de rebonds et le nombre cumulé de cellules de phytoplancton ingérées par le copépode pour une simulation particulière dans le cas de rebonds déterministes. On note que lorsque le premier devient linéaire, le second n'augmente plus.	131
5.2	Nous observons qu'une augmentation de l'hétérogénéité de la distribution accélère la consommation de cellules de phytoplancton, ce qui se traduit par une augmentation de la pente des courbes figure (a). La valeur de cette pente correspond au taux d'ingestion donné figure (b). Les mêmes résultats qualitatifs sont obtenus pour d'autres dimensions de l'espace.	132
5.3	Écart-type du nombre de cellules de phytoplancton ingérées (en pourcentage du nombre de particules restantes) en fonction du temps. Chaque courbe représente la variabilité des résultats de simulations effectuées pour trente distributions hétérogènes différentes (avec rebonds aléatoires du copépode). Nous observons une décroissance des maxima avec une augmentation de la taille de l'espace, ainsi qu'un décalage dans le temps des maxima de variabilité.	133
5.4	Évolution du nombre de cellules ingérées par le copépode au cours du temps pour une distribution en paquets (ou hétérogène) des cellules. Cette courbe est un agrandissement d'une portion de courbe particulière ayant servi au calcul des courbes moyennes de la figure 5.2(a).	135
5.5	Évolution de la concentration en proies dans le milieu au cours du temps au début de la simulation. En (a) les oscillations sont importantes. En (b) les oscillations sont amorties. Voir le texte pour les commentaires et le paragraphe 5.2.2 pour le sens des mesures d'hétérogénéités.	138
5.6	Variation du taux d'ingestion moyen par individu en fonction du degré d'hétérogénéité de la distribution des proies (ξ). Chaque courbe correspond à la moyenne de 30 simulations effectuées pour 20 copépodes (trait plein) et 80 copépodes (pointillés) dans le milieu, pour une concentration constante de proies de $6,25 \cdot 10^{-6} gN/l$	141
5.7	Réponses fonctionnelles simulées par le modèle agents pour différentes quantités de prédateurs. La distribution des cellules est régulière. Chaque point correspond à la moyenne de 30 simulations. Le taux d'ingestion reste identique avec l'augmentation du nombre de prédateurs. Cette expérience confirme l'hypothèse d'une réponse fonctionnelle non ratio-dépendante en milieu homogène.	142
5.8	Réponses fonctionnelles simulées par le modèle d'agents réactifs pour différentes quantités de prédateurs en milieu hétérogène ($\xi = 1, 1$). Chaque point correspond à la moyenne de 30 simulations. La diminution de la vitesse d'accroissement du taux d'ingestion avec l'augmentation du nombre de prédateurs dans le milieu vérifie l'hypothèse d'Arditi d'une réponse fonctionnelle ratio-dépendante en milieu hétérogène.	143

5.9	Ajustement de la réponse fonctionnelle $g(N)$ de Real (équation 5.7) aux données simulées pour trois valeurs d'hétérogénéité et un nombre constant de 30 prédateurs. Les segments verticaux représentent l'écart-type et les points la moyenne de 30 simulations. Voir le texte pour les commentaires.	144
5.10	Isolignes des valeurs du paramètre β de l'équation 5.7. Les isolignes montrent l'évolution de la topographie attachée à β . Voir le texte pour les commentaires.	145
5.11	Relation entre la concentration en prédateurs P^2 et β^2 . Les différents types de points indiquent les valeurs simulées. Les droites de régression linéaire sont de la forme $f(P^2) = \beta^2 = \gamma^2 P^2 + \mu^2$ avec un coefficient de corrélation toujours supérieur à 0,9	146
5.12	Résultats du paramétrage du modèle proies-prédateurs à l'aide du modèle agents du copépoïde. (a) et (b) : portrait de phase des expériences en milieux homogène et hétérogène. (c) et (d) : évolution au cours du temps des concentrations en proies et en prédateurs.	150
5.13	Schéma du couplage entre le modèle proies-prédateurs et le modèle agents du copépoïde. Le modèle agent « simule » $G(x)$ et le modèle proie-prédateur détermine le nombre de copépoïdes et de cellules de phytoplancton à chaque itération du schéma numérique. . .	151
5.14	Résultats du couplage du modèle agents avec le système d'équations différentielles. En haut figurent les portraits de phase, en bas l'évolution des concentrations en fonction du temps. (a) et (c) : la distribution des proies suit une loi aléatoire uniforme (distribution homogène). Voir le texte pour les commentaires. (b) et (d) : la distribution des proies suit une loi normale d'écart-type 0,1 centrée sur des points tirés selon une loi uniforme (distribution hétérogène ou en paquets).	152
5.15	Évolution de l'hétérogénéité (valeur de ξ sur l'axe des ordonnées à droite) au regard de l'évolution de la concentration en proies (axe gauche des ordonnées). (a) : la distribution des proies suit une loi aléatoire uniforme. (b) : la distribution des proies suit une loi normale d'écart type 0,1 centrée sur des points tirés selon une loi uniforme (distribution en paquets). Dans les deux cas, les copépoïdes expérimentent principalement deux degrés d'hétérogénéité. Voir le texte pour les commentaires.	153
5.16	Évolution de la concentration en proies en fonction du temps. Les deux courbes (a) et (b) sont des agrandissements des courbes en traits pleins des figures 5.15(a) et 5.15(b) respectivement. Les agrandissements sont effectués sur des périodes de très faible concentration en proies. (a) : la concentration oscille de façon amortie autour d'un minimum puis augmente rapidement. (b) : la concentration augmente par à-coups successifs pour finir par croître rapidement. Voir le texte pour les commentaires.	154
5.17	Schéma sur l'apport de la modélisation dans l'enrichissement des connaissances dans les sciences naturelles (modifié d'après [Gri94]). Dans le rectangle du haut figure le diagramme du cycle de l'enrichissement des connaissances. Dans le rectangle du bas figure le cycle de la création d'un modèle. C'est la formulation de nouvelles hypothèses qui fait le lien entre les deux cycles.	158
5.18	Schéma du couplage entre un modèle spatial implémenté à l'aide d'un schéma numérique et des IBMs. Pour chaque pas d'espace (cercles), et à chaque pas de temps, un couplage bidirectionnel est réalisé. Le modèle agrégé fixe l'environnement local de l'IBM, celui-ci venant paramétrer le premier.	159

- 5.19 Évolution du temps de simulation en fonction du temps simulé pour le modèle d'agents. Le résultat donné ici concerne des simulations avec 10 copépodes, des distributions uniformes et un renouvellement des cellules de phytoplancton. Les simulations ont été effectuées sur un PC muni d'un processeur Atlon 1GHz et de 128M de RAM. L'évolution est linéaire (pente de la droite = $27,07s.j^{-1}$). La droite ne passe pas par l'origine, ce temps minimal est celui nécessaire pour analyser les fichiers XML de description du plan d'expérience. 161

Liste des tableaux

1.1	Hiérarchie de spécification des systèmes.	17
3.1	Passage du paradigme d'agent réactif vers le formalisme DEVS	65
5.1	Tableau des valeurs des principaux paramètres utilisés dans le modèle.	129
5.2	Plan d'expériences pour chaque volume spatial considéré	130
5.3	Analyse de variance des résultats de simulations pour trois niveaux d'hétérogénéité. Ces résultats nous amènent à rejeter l'hypothèse d'une égalité des moyennes avec un niveau de confiance de 99%	144
B.1	Expressions mathématiques des processus représentés dans le modèle (d'après [CC96]). .	177
B.2	Valeurs des paramètres du modèle (d'après [CC96]).	178