

Tutoriel NetBioDyn

Logiciel simple pour réaliser des simulations comportementales
d'entités interagissant dans le temps 😊

Les captures d'écrans et les liens sont testés et validés au 26/01/2021

Si ces liens devaient ne plus fonctionner à l'avenir, merci de contacter jean-pascal.dufour@ac-creteil.fr

Présentation du logiciel

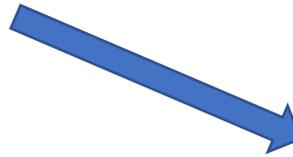
- Développé par l'Université de Bretagne Occidentale (Pascal Ballet), c'est un outil efficace pour aborder la simulation d'entités interagissant dans un espace clos.
- Le logiciel tourne sur des ordinateurs Windows (PC) / Mac / Linux.
- Le logiciel nécessite l'installation préalable de JAVA.
- Permet de réaliser les simulations en 2 et 3 dimensions (nous ne réaliserons que des simulations 2D).
- Le logiciel est GRATUIT

Installer le logiciel :

- Opération préalable : installer JAVA

<https://www.java.com/fr/download/>

Cliquer ICI
Sur Mac / Linux



Cliquer ICI
Sur PC



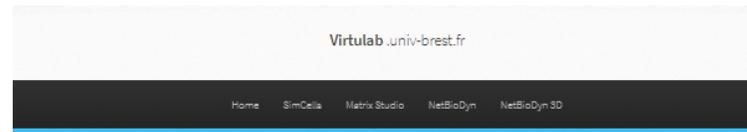
Cette étape est souvent
Déjà faite sur vos ordinateurs
Mais il est bon de s'en assurer

Installer le logiciel :

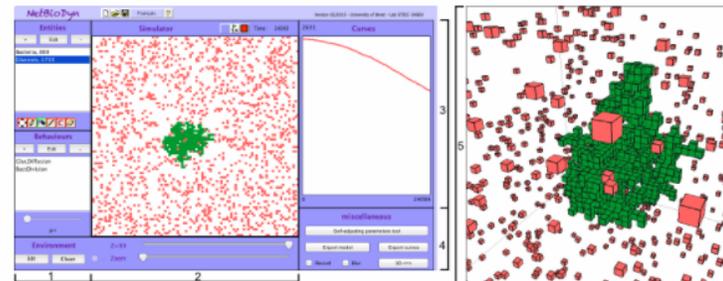
- Télécharger et installer Netbiodyn :

<http://virtulab.univ-brest.fr/netbiodyn3D.html>

Choisir sa version :
Pour les utilisateurs sous
Windows il est important de
choisir la version 32 bits,



NetBioDyn 3D
Free and Open Source IDE to simulate 3D Multi-Cellular Systems

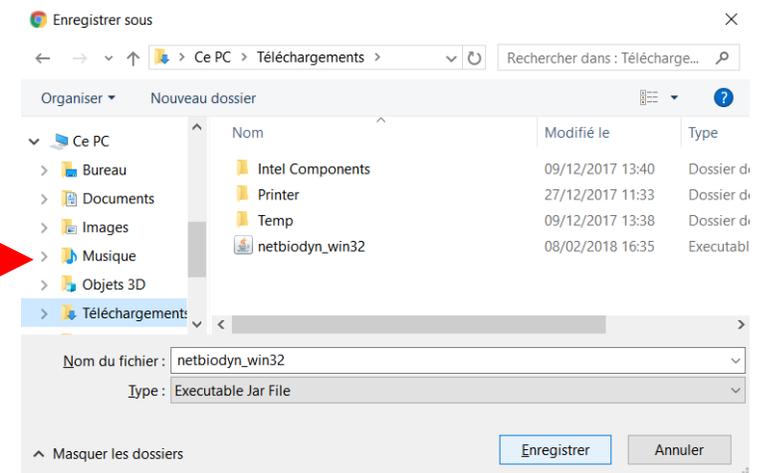


NetBioDyn 3D is NetBioDyn with a 3D viewer for a better design of 3D simulations.
NetBioDyn is a software to model and simulate biological mechanisms at the cellular or molecular level.
It is dedicated to secondary school pupils, higher education students, teachers and professors.
No programming skill required.
Works on Windows, Mac and Linux with Java.
The interface is both in english and in french (français).

Downloads

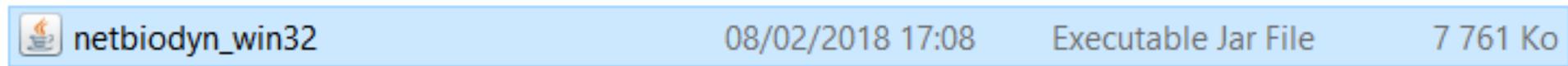
Latest versions of NetBioDyn 3D (Windows, Mac, Linux)

Windows 32 bits
Windows 64 bits
Mac OSX (Intel 64 bits)
Linux 32 bits
Linux 64 bits



Lancer le logiciel Netbiodyn :

- Un simple double clic sur le fichier que vous avez précédemment téléchargé lancera le logiciel :



Nous avons téléchargé la version 3D de Netbiodyn, néanmoins, pour cette formation, nous nous contenterons d'exploiter uniquement les simulation en 2D.

Mais qui peut le plus, peut le moins 😊

Une démonstration de l'usage de la simulation en 3D sera réalisée pour vous en montrant l'intérêt (sous réserve de temps), en cas de besoin, je reste à votre disposition.

L'interface de Netbiodyn :

- Enregistrer / sauvegarder une simulation
- Lancer une simulation
- Accélérer ou ralentir la simulation



Gestion des entités :

- Création
- Gestion du nombre
- Mise en place de barrières



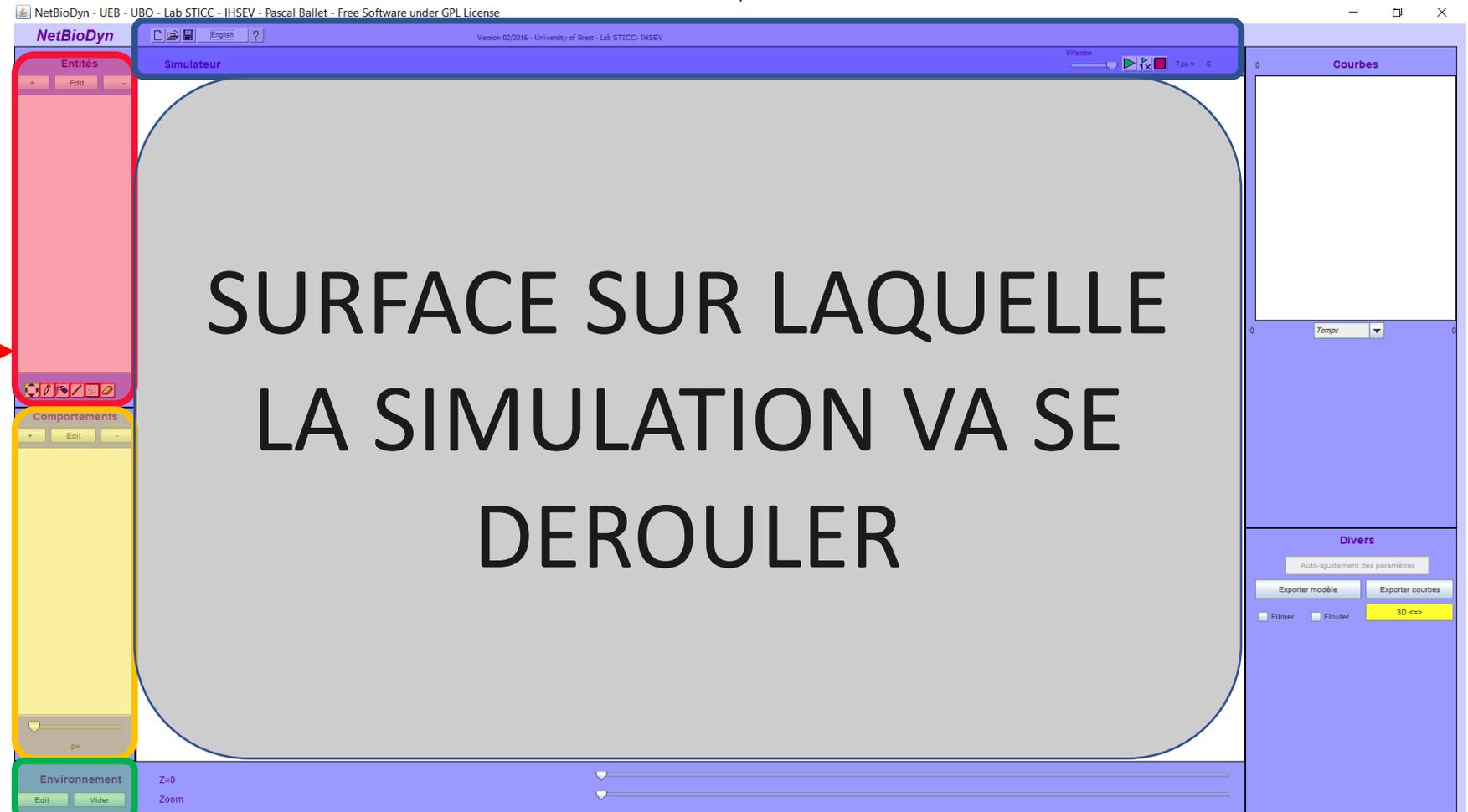
Gestion des comportements :

- Mouvement des entités
- Interactions des entités



Espace de la simulation

- Gérer la taille de l'espace



Un brin de théorie (promis pas trop) 😊

- netBioDyn est basé sur la théorie des systèmes multi-agents (individu centré) supposant une description locale des entités et l'étude de leur auto-organisation.
- Dans netBioDyn, un agent est une entité informatique représentant une entité biologique au travers de comportements et d'interactions. Tous les agents sont plongés au sein d'un même environnement afin d'étudier et d'observer l'évolution du système biologique modélisé au cours du temps.

Référence : <http://acces.ens-lyon.fr/acces/logiciels/applications/netbiodyn>

- **Bon, alors traduisons :**

- Dans un espace constitué de multiples carrés, vides, nous allons déposer des entités (une entité occupe un carré), la simulation va se dérouler tour par tour, à chaque tour, chaque entité va faire une action (comme se déplacer d'une case) et éventuellement interagir avec une autre entité : quand 2 entités sont côte à côte elles peuvent disparaître et en donner une troisième, ou une entité « malade » contaminer une entité « saine », ces interactions ont une probabilité de se réaliser (entre 0 et 1) à chaque tour.
- Un comportement est comme « une réaction chimique », en début de tour vous avez A et B, et en fin de tour si A rencontre B alors A et B disparaissent et il apparaît C à la place (donc soit dans le carré qui était occupé par A, soit dans celui qui était occupé par B), ceci n'est qu'un exemple.

Explication par l'exemple :

- Nous allons commencer par une simulation de diffusion de 2 molécules (donc 2 entités), entre 2 compartiments.
- Cette étape est nécessaire pour appréhender les fondamentaux de la simulation multi-agents (individu centré),
- Nous allons aborder dans cet exemple :
 - La création des 2 entités diffusantes (donc mobiles).
 - La création d'une barrière (une entité elle aussi, mais fixe).
 - Le comportement « mouvement » pour les 2 entités diffusantes.
 - Ici pour commencer, aucune interaction entre les entités.

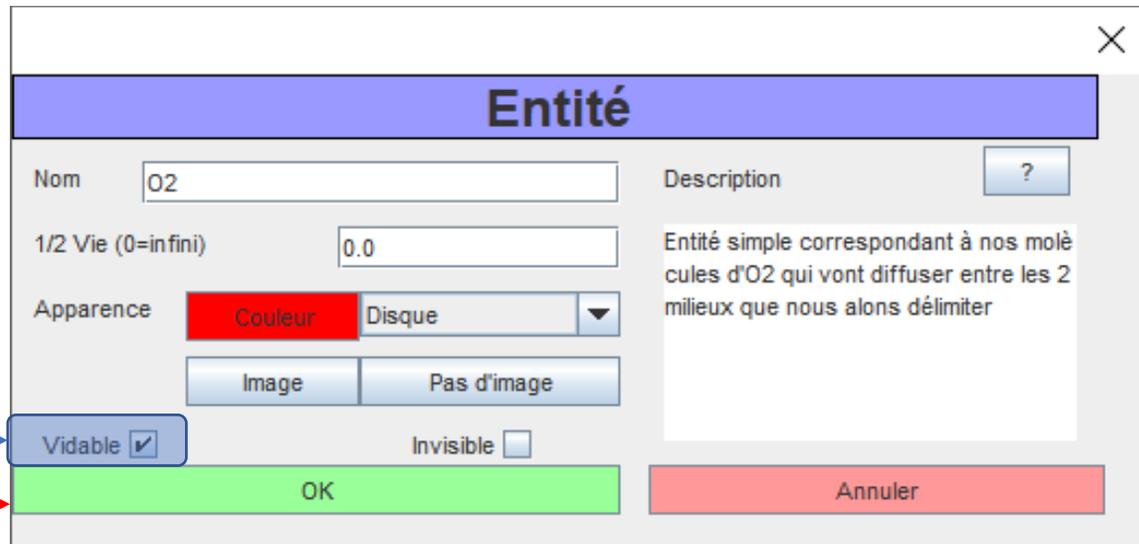
Création des 3 entités

- Commençons par créer la première entité : O2



Cliquer sur + pour demander à créer une nouvelle entité.
Cela va ouvrir la fenêtre de création ci-après :

Si vidable est coché, alors en vidant la zone de simulation, vous effacerez tous les représentants de cette entité. Décocher cette case est utile si vous voulez que cette entité reste (cas des modèles), ou pour reproduire une simulation avec exactement le même nombre et la même répartition de cette entité.

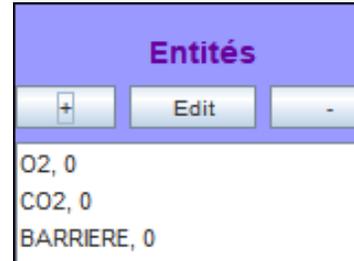


En cliquant sur OK, vous voyez que la nouvelle entité existe, le « ,0 » après vous indique que pour le moment il n'y a aucun O2 dans l'espace de simulation

- Reproduire l'opération pour créer les entités CO2 et BARRIERE

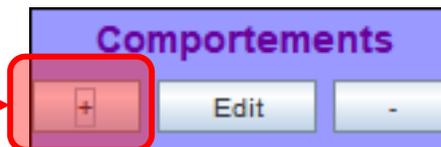
Rajoutons des comportements :

- Point d'étape : Normalement vous devriez avoir 3 entités, mais chacune avec aucun représentant d'installé dans la simulation (d'où le ,0 derrière le nom de chaque entité).



- Explications pour la suite :
 - Nous allons devoir créer des comportements pour que nos entités agissent tour après tour pendant la simulation.
 - Nous voulons modéliser une diffusion, O2 et CO2 vont donc devoir bouger (changer de case) aléatoirement à chaque tour.
 - La diffusion se fait entre 2 compartiments, pour les délimiter, nous allons donc tracer une ligne (une ligne de carrés occupés par l'entité barrière),
 - L'entité barrière ne vas pas bouger (elle ne va donc avoir besoin d'aucun comportement particulier).

Pour créer le premier comportement :
Cliquez sur le +



Les comportements suite :

Nom du comportement
(important pour la lisibilité du modèle)

Probabilité que ce comportement ait lieu à chaque tour.
1 = 100% de proba que ce comportement se fasse à chaque tour.
0,1 = le comportement se produire en moyenne une fois tous les 10 tours.

Au début du tour, la liste des entités qui vont subir le comportement

Comportement

Nom

Probabilité 1.0

Descr.

Réactifs Entites

Produits Entites

Ok

Annuler

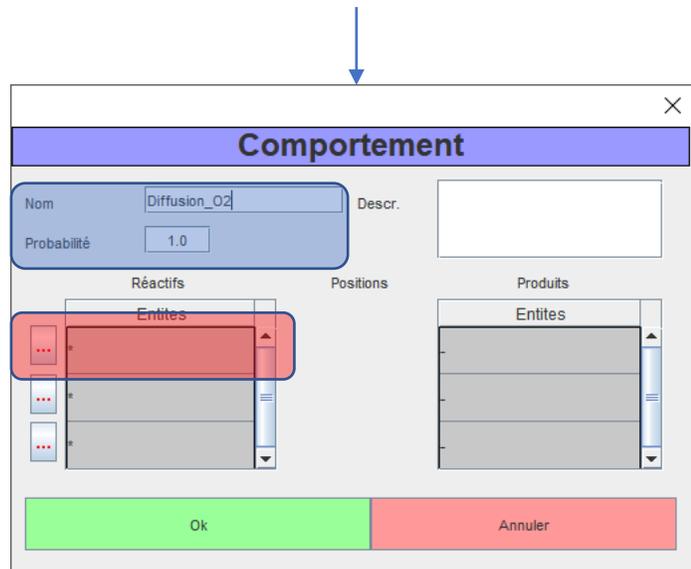
Le résultat en fin de tour :
Une entité peut juste bouger, ou bien se dupliquer ou tripler.
2 ou 3 entités peuvent réagir pour donc disparaître et laisser à leur place une autre (un produit).
Les possibilités sont nombreuses.

Et nous créâmes le mouvement :

Donner un nom.

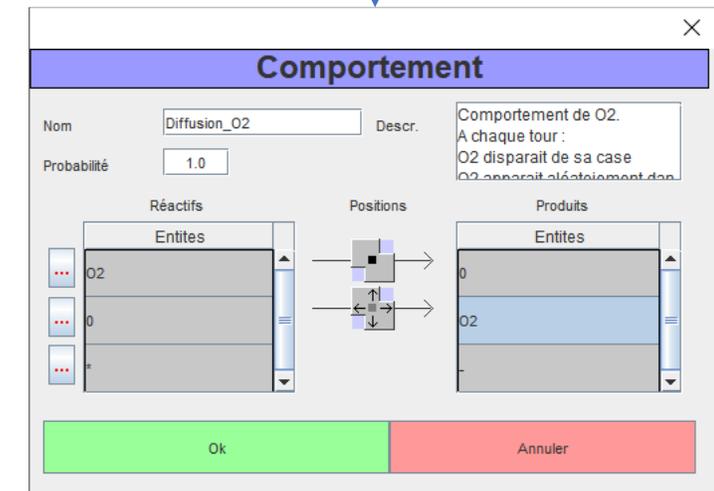
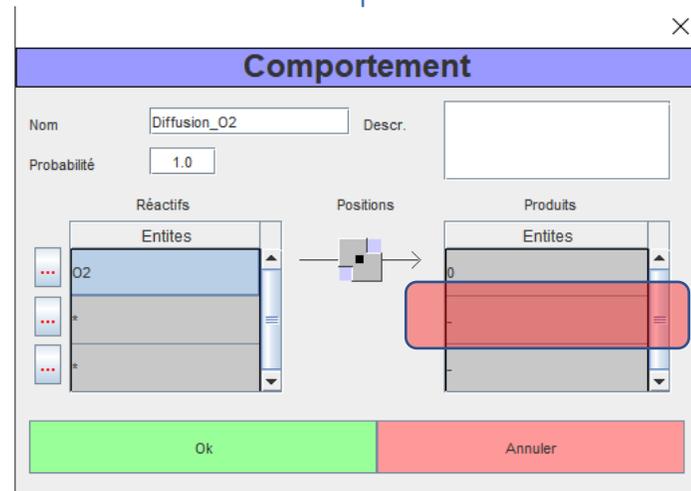
Probabilité à 1 car mes O2 vont bouger à chaque tour.

Pour réduire la mobilité, il suffirait de réduire la probabilité que le mouvement se fasse,



Cliquer sur la 1ère case entité (réactif)
Choisir l'entité O2
(il est important de créer les entités avant les comportements),

Cliquer sur la 2ème case entité (produit)
Choisir l'entité O2



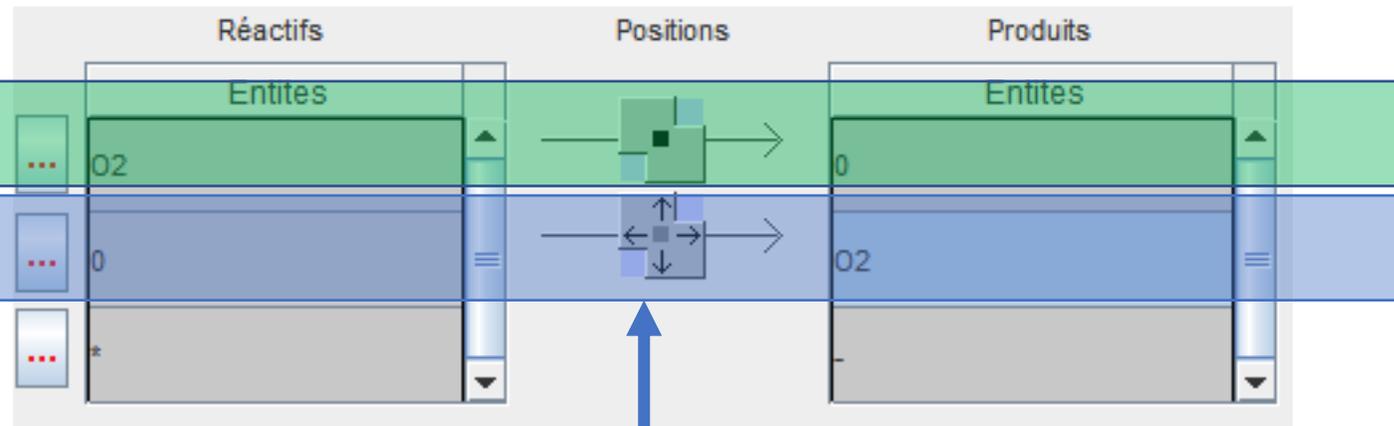
Cliquer sur OK.
Le comportement de mobilité pour O2
Est programmé 😊

Explications de ce que nous venons de réaliser :

Pour garantir que le comportement se produise à chaque tour (si il est possible)

Probabilité

1.0

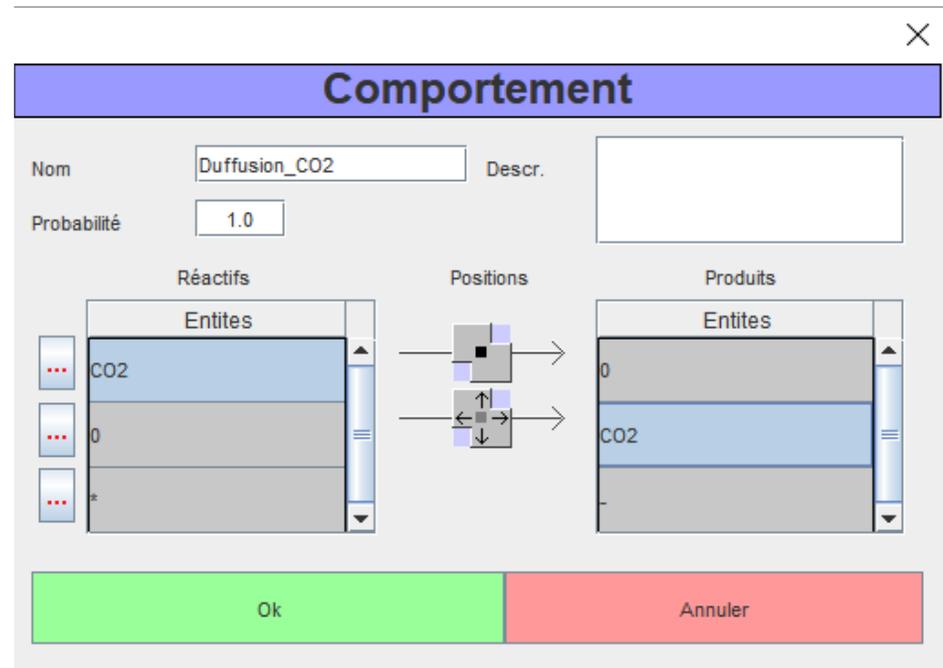


- Pour chaque entité O2 dans une case au début du tour
- Faire disparaître O2 de cette case à la fin du tour.

- Dans une des cases adjacente à la case de départ et vide
- Faire apparaître un O2 à la fin du tour

Réaliser le comportement de diffusion pour le CO2 :

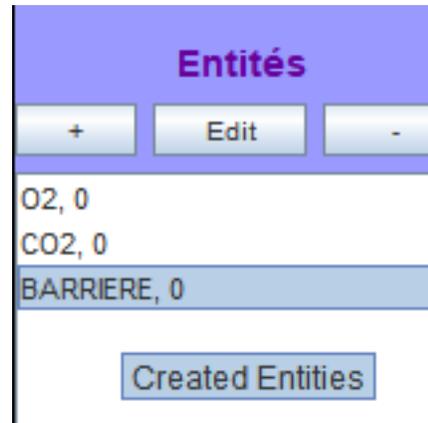
- Je ne vous donne pas les détails, le résultat final devrait être :



Préparer le terrain de jeu :

- L'objectif ici est de tracer une ligne au milieu de l'espace de simulation, ligne faite de plusieurs copies de l'entité « BARRIERE », entité qui n'est impactée par aucune comportement, et qui va donc rester statique et immuable tour après tour.
- Nous percerons par la suite cette entité pour autoriser la diffusion d'un compartiment à l'autre de nos O₂ et CO₂

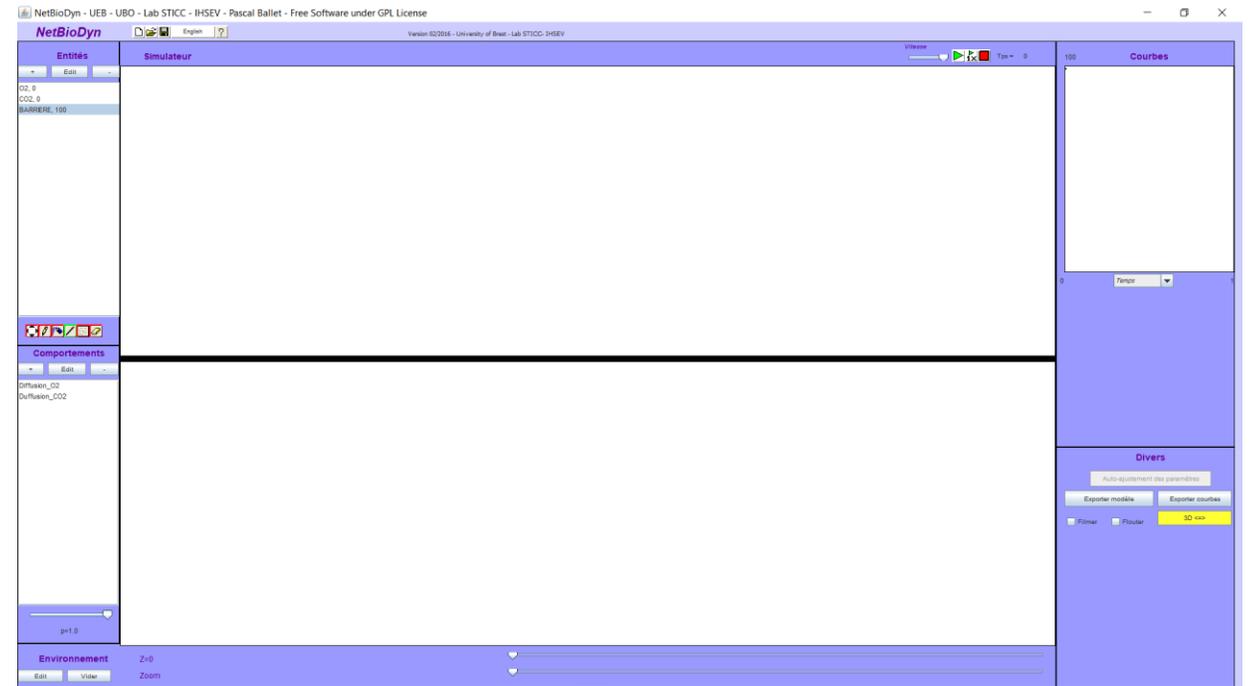
Parmi les entités, sélectionner
L'entité « BARRIERE »



Sélectionner aussi,
L'outil de dessin LINE



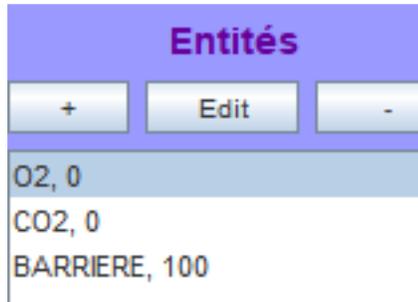
Tracer dans l'espace de la simulation (au milieu), une ligne.
Tous les carrés se trouvant sur cette ligne seront remplis par un
exemplaire de l'entité BARRIERE.



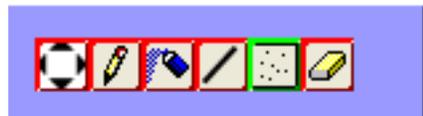
Peupler le terrain :

- L'objectif ici est d'installer des copies de nos entités O₂ et CO₂ dans leur compartiment.
- Pour faire simple, nous allons installer que du O₂ dans l'un et que du CO₂ dans l'autre.
- Plusieurs outils sont à disposition pour installer des copies des entités dans l'espace de la simulation, je vais vous présenter l'outil qui autorise la plus grande maîtrise du nombre d'entités ajoutées.
- Attention au nombre total d'entités, plus il y en a et plus cela va demander de temps de calcul à l'ordinateur (je ne vous parle pas de la version 3D)...

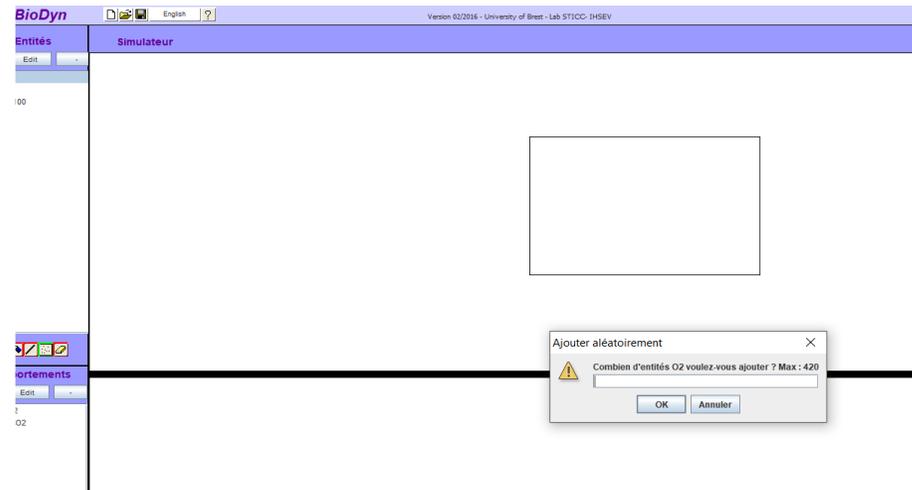
Sélectionner l'entité O2



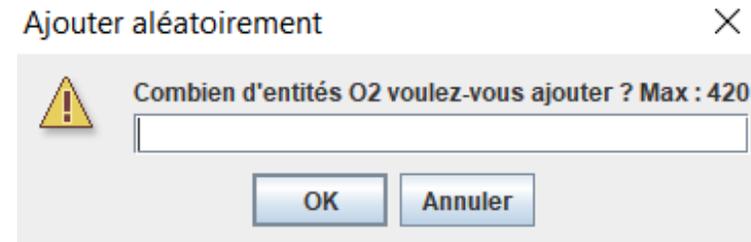
Sélectionner l'outil
« random »



Placer la souris dans le compartiment du haut, et avec un clic gauche (sans relâcher le clic) tracer un rectangle puis relâcher le clic une fois le rectangle tracé. Cela délimite une zone dans laquelle l'outil va positionner aléatoirement un nombre défini de copies de l'entité O2

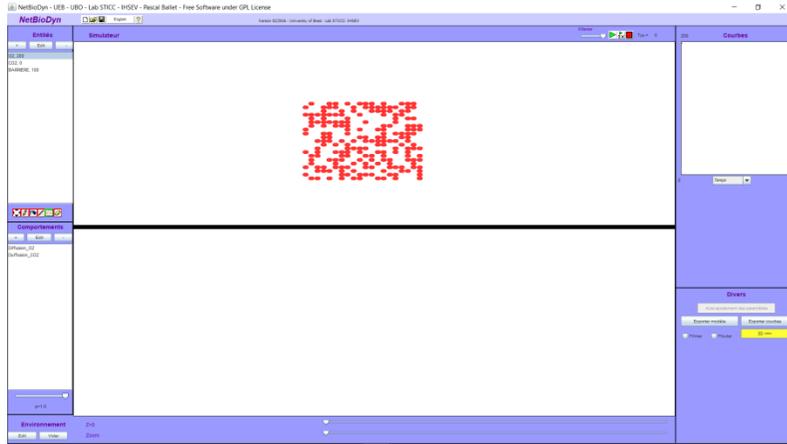


Cela permet de déposer un nombre précis de copies de l'entité (idéal pour reproduire plusieurs fois une simulation avec une même population par exemple). Le nombre Max indiqué est lié à la surface total du rectangle tracé juste avant (ici 420).

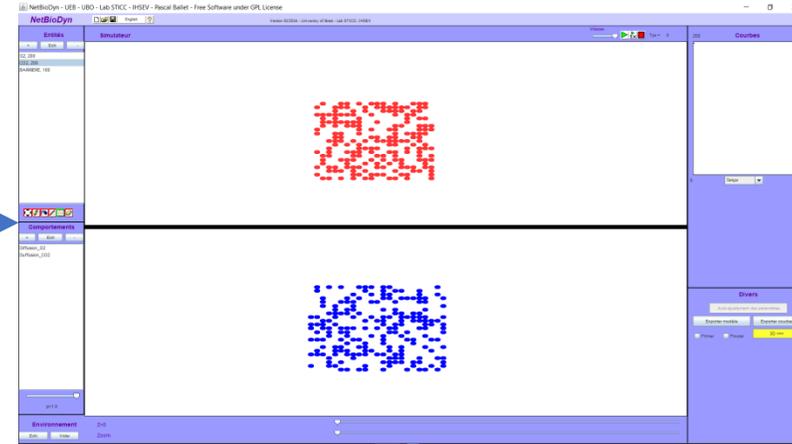


Le résultat et le lancement 😊:

J'ai demandé 200 O₂



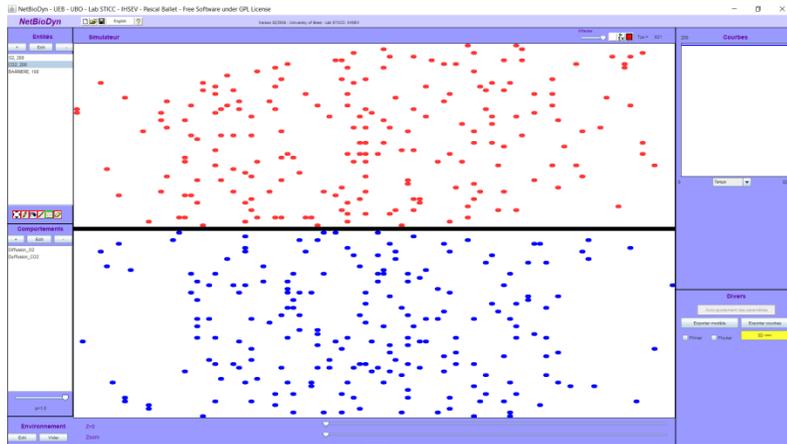
la même manipulation pour 200 CO₂



Cliquer sur LECTURE pour lancer la simulation

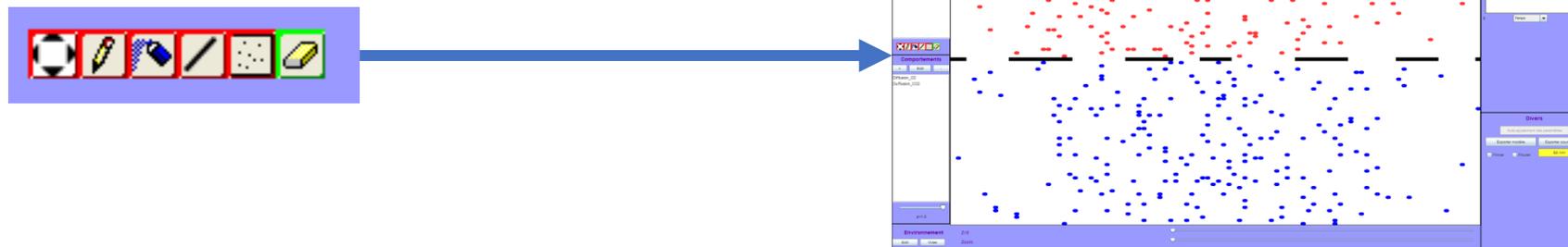


Après 821 tours, les gaz occupent le volume accessible



Laisser diffuser d'un compartiment à l'autre :

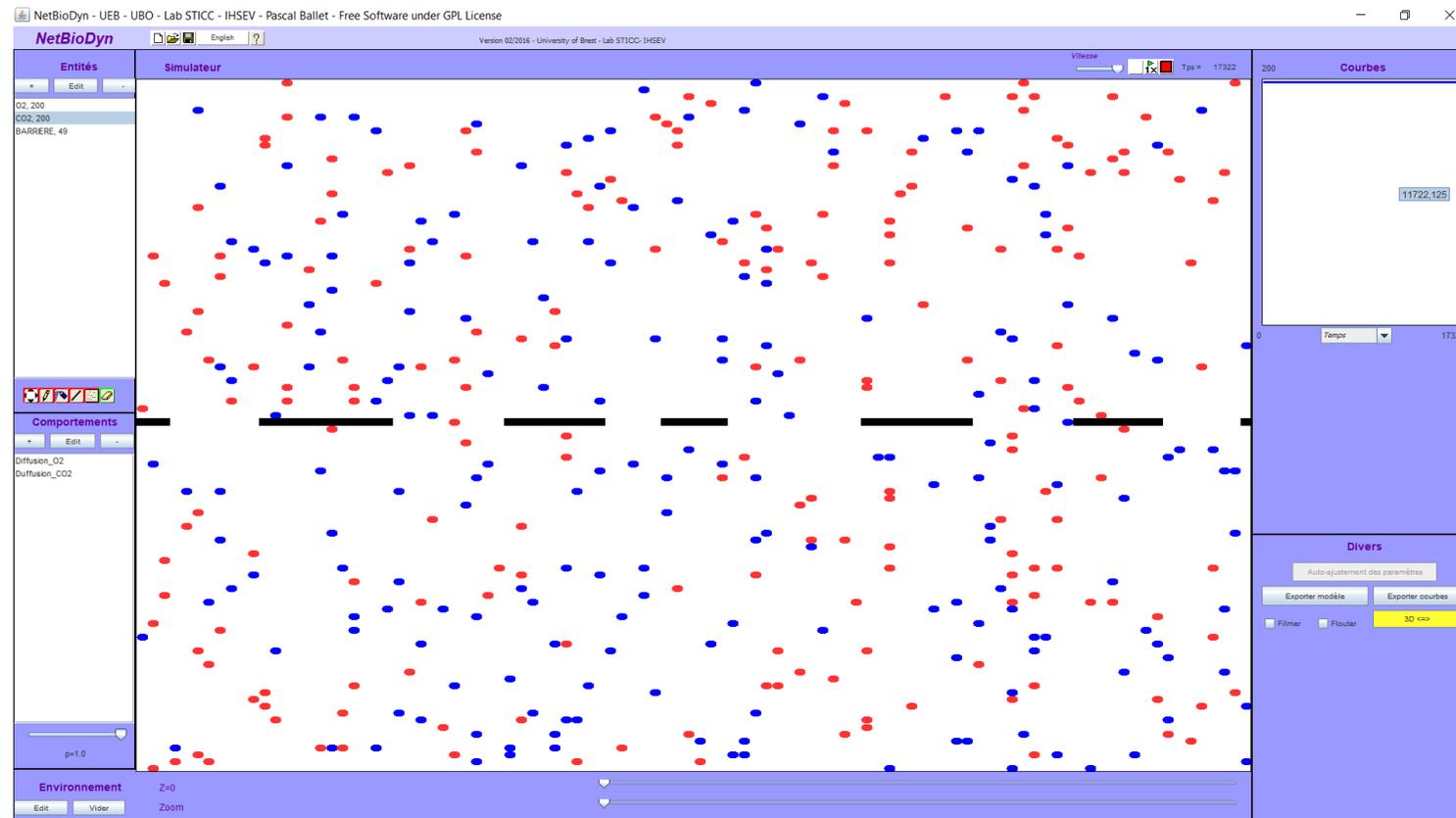
- Pour que la diffusion se fasse entre les compartiments, et que les concentrations tendent vers l'équilibre, il va falloir perforer la ligne de séparation (à l'aide de l'outil « Eraser »),
- Je vous conseil de faire « Pause » dans la simulation le temps de perforer la « membrane », en effet, l'outil d'effacement est non sélectif, et vous risquez d'effacer vos O₂ et CO₂ si ils bougent



Relancer ensuite la simulation en appuyant à nouveau sur le PLAY

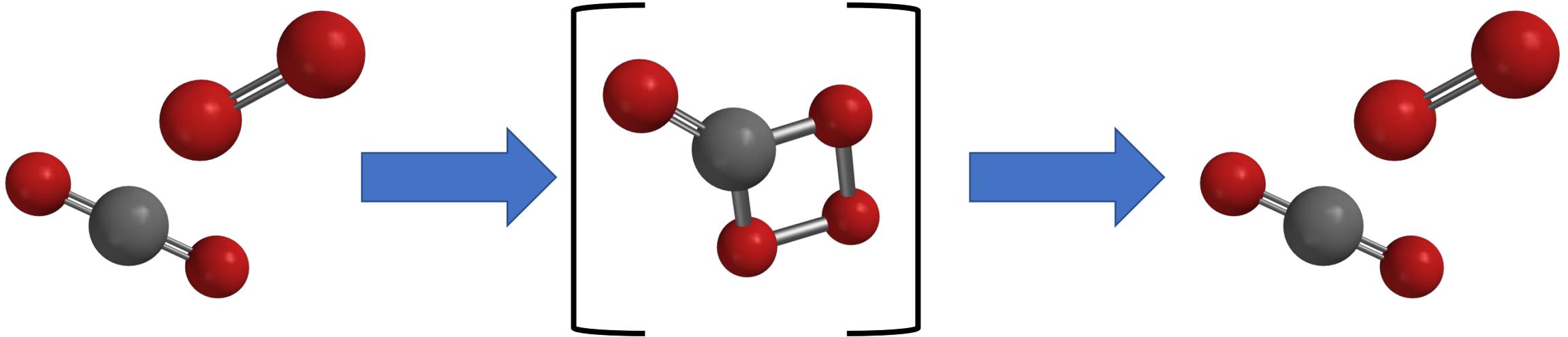
Et voilà :

- Après 17 322 tours (c'était déjà homogène bien avant) :



Abordons maintenant les interactions entre deux entités (ou plus) :

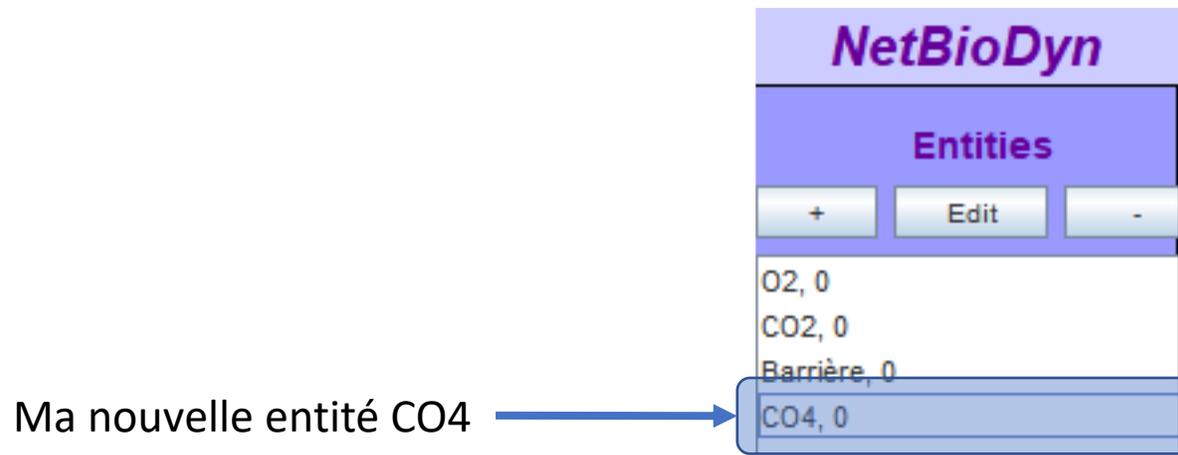
- Pour le moment O₂ et CO₂ ne font que bouger.
- Pour les besoins du tutoriel, nous allons modéliser une réaction « chimique » Je vous propose de modéliser la réaction suivante



O₂ et CO₂ peuvent dans des conditions de températures intenses, former furtivement un intermédiaire réactionnel le tétr oxyde de carbone, qui se dissocie spontanément et rapidement en O₂ et CO₂ (un O est au final échangé entre les 2 molécules)

Vous pouvez continuer d'utiliser votre simulation du début :

- Cependant, dans cette réaction, nous avons du CO4, nous devons donc créer l'entité CO4 :



Le comportement réaction $A + B \rightarrow C$:

- Nous allons créer le comportement qui va représenter la formation du CO4 lorsqu'il y a contact entre CO2 et O2 :

Nom du comportement

Probabilité que ce comportement se réalise. Ici 20%

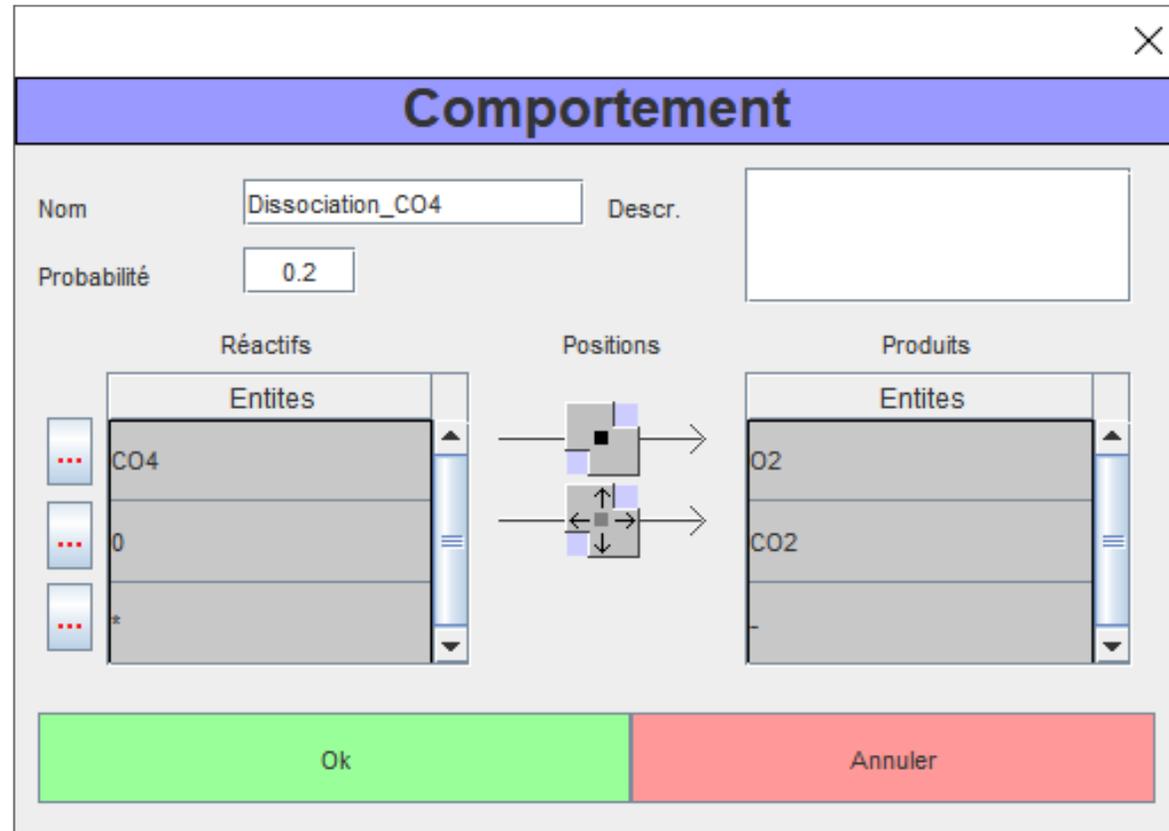
A la place de O2 placer un CO4
A la place du CO2 RIEN (0)

Attention CO4 est une nouvelle entité. Penser à créer son comportement de mouvement 😊

Ici les réactifs c'est simple :

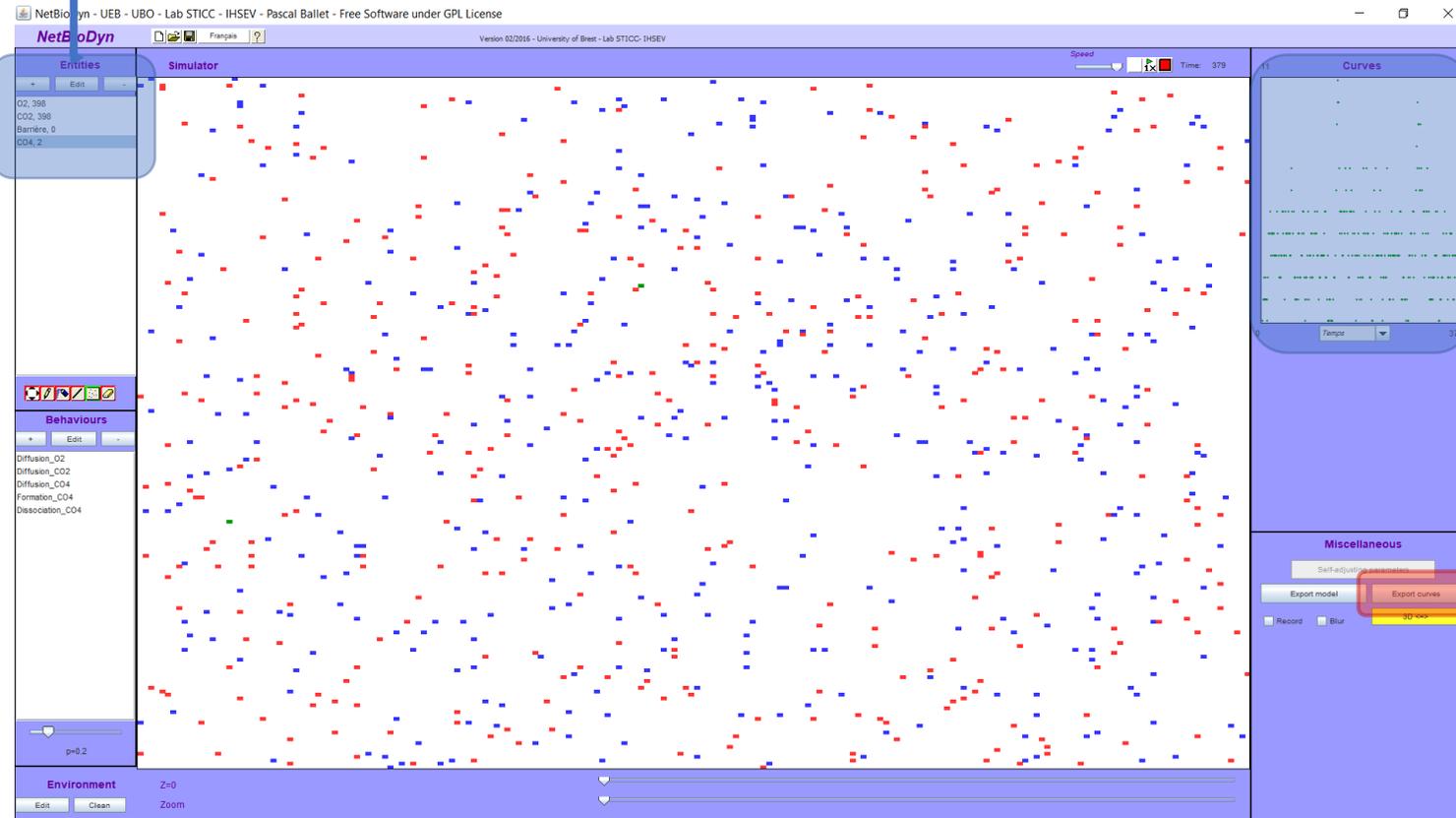
Le comportement réaction $C \rightarrow A + B$:

- Nous allons créer le comportement qui va représenter la dissociation de CO4 et O2 et CO2 (j'ai mis une faible probabilité, mais en vrai elle devrait être très forte).
- Vous devriez obtenir cela :



Résultat Final 379 tours plus tard :

En cliquant sur une entité, vous pouvez afficher un graphique de l'évolution du nombre de cette entité au cours du temps.



En cliquant sur exporter courbes, vous générez un fichier Excel avec toutes les données tour par tour de la simulation. IDEAL POUR EXPLOITER LES TABLEURS EN CLASSE 😊

Choisissez CSV Excel, tableurs et pas Langage R

n.b. le langage R est très utilisé dans le monde académique pour réaliser un traitement statistique des données.



Ce que cela donne dans Excel (ou un autre tableur) :

- Une feuille avec une ligne par tour de la simulation.
- Pour chaque tour, la quantité de chaque entité.



	A	B	C	D	E	F
1		time	O2	CO2	Barrière	CO4
2	0	0	400.0	400.0	0.0	0.0
3	1	1	400.0	400.0	0.0	0.0
4	2	2	399.0	399.0	0.0	1.0
5	3	3	398.0	398.0	0.0	2.0
6	4	4	399.0	399.0	0.0	1.0



Tous les tableurs fonctionnent sur une logique commune :

Dans une case, si les données sont alignées à gauche, c'est que le tableur pense que c'est du TEXTE, si les données sont alignées à droite, alors c'est pour lui une valeur numérique.

Tous mes valeurs O2 / CO2 ... sont à gauche !!!! Car pour mon tableur, le séparateur de décimale attendu est une VIRGULE et pas un POINT (cela peut varier entre les ordinateurs Anglais / Français ..)

La solution : utiliser la fonction RECHERCHER / REMPLACER du tableur pour rechercher les POINTS et les remplacer par des VIRGULES 😊

Après transformation des . en , :

	A	B	C	D	E	F
1		time	O2	CO2	Barrière	CO4
2	0	0	400	400	0	0
3	1	1	400	400	0	0
4	2	2	399	399	0	1
5	3	3	398	398	0	2

Evolution de la quantité de CO4 dans le temps. Ici intérêt limité, mais ça pourrait être par exemple la teneur en Produit d'une réaction enzymatique

