# Introduction à la science informatique pour l'étude des systèmes dynamiques

Loïc Paulevé

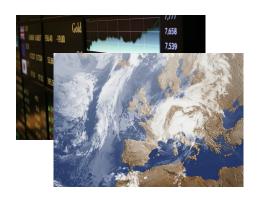
École Polytechnique / LIX (équipe AMIB) pauleve@lix.polytechnique.fr

http://loicpauleve.name

## Plan

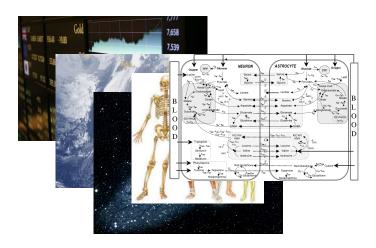
- 1 Motivation
- 2 Quelques bases de l'informatique
- 3 Application à la modélisation des systèmes dynamiques
- 4 Conclusion

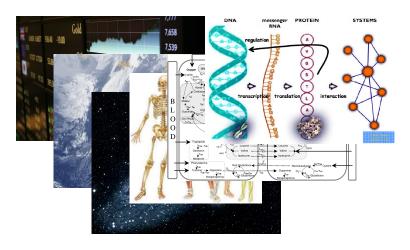






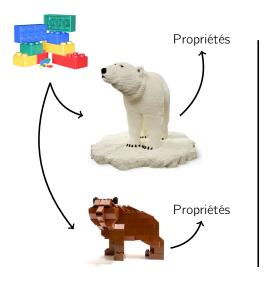






## Le principe de la modélisation

Briques/modèles ← connaissances, expériences, intuitions.





## Quelques buts de la modélisation

#### Reproduire un comportement

- Simulations, analyses exhaustives.
- Prédictions : comportements possibles/impossibles dans le modèle.
- Expériences in vitro : faciles, gratuites, rapides, sans erreur.

#### Comprendre un comportement

- Briques nécessaires ou suffisantes ;
- Robustesse aux modifications du modèle.
- Étude de la causalité, composants clés.
- Relations entre différents modèles du même système.
- ⇒ contrôler le système réel.

#### But de ce cours

#### Donner quelques bases de l'informatique

- Exemples autour des graphes.
- Brève introduction à l'algorithmique.
- Brève introduction aux langages et leur sémantique.

#### Méthodes informatiques pour l'étude des systèmes complexes

- Notion de système de transition.
- Simplification d'un modèle.
- Interprétation abstraite.

## Plan

- 1 Motivation
- 2 Quelques bases de l'informatique
- 3 Application à la modélisation des systèmes dynamiques
- 4 Conclusion

## Humain contre ordinateur



- Intuitions
- Émotions
- Erreurs
- Lenteur (de calcul)



- Stupidité
- Formalisation
- Exactitude
- Rapidité (de calcul)

### **Formalisation**

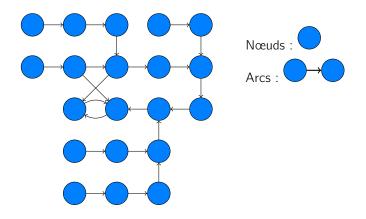
#### Détermine les règles (briques) :

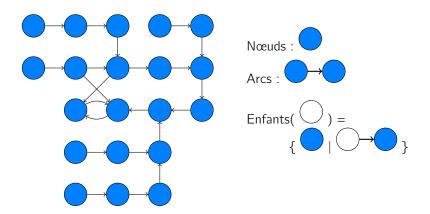
- Formulation (d'un problème);
- Raisonnement (manière de résoudre un problème).

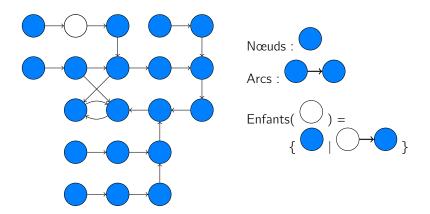
Étape cruciale pour généraliser et prouver un raisonnement.

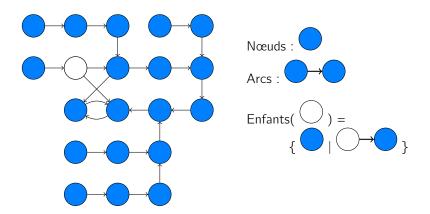
#### Avantages connexes:

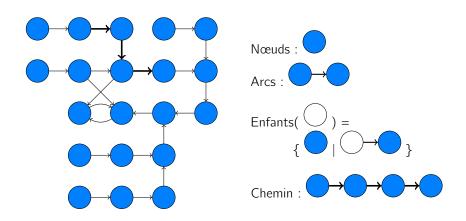
- Augmenter la clarté d'un raisonnement;
- Oblige à réfléchir à certains détails;
- Les détails ont leur importance.











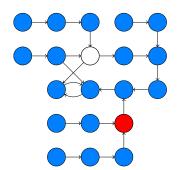
#### Algorithme

- Suite d'opérations élémentaires et non-ambigües.
- Répond à un problème.

#### Algorithme

- Suite d'opérations élémentaires et non-ambigües.
- Répond à un problème.

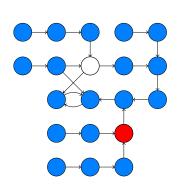
Exemple: Existe-t-il un chemin entre et ?



#### Algorithme

- Suite d'opérations élémentaires et non-ambigües.
- Répond à un problème.

Exemple: Existe-t-il un chemin entre et ?

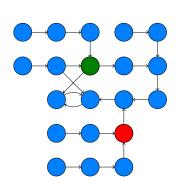


- $TODO = \bigcirc$ ;  $FAIT = \emptyset$ .
- tant que *TODO* n'est pas vide :
  - = TODO.enlever dernier
  - Si = = : répondre OUI
  - $FAIT = FAIT \cup \{ \bigcirc \}$ .
  - pour tout ○∈ Enfants(○) :
  - of a surdue NON
- répondre NON.

#### Algorithme

- Suite d'opérations élémentaires et non-ambigües.
- Répond à un problème.

Exemple: Existe-t-il un chemin entre et ?

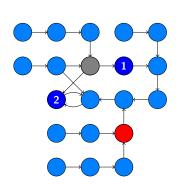


- $TODO = \bigcirc$ ;  $FAIT = \emptyset$ .
- tant que *TODO* n'est pas vide :
  - = TODO.enlever dernier
  - Si = = : répondre OUI
  - $FAIT = FAIT \cup \{ \bigcirc \}$ .
  - pour tout ○∈ Enfants(○) :
- répondre NON.

#### Algorithme

- Suite d'opérations élémentaires et non-ambigües.
- Répond à un problème.

Exemple: Existe-t-il un chemin entre et ?

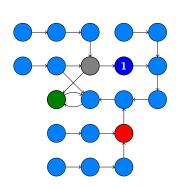


- $TODO = \bigcirc$ ;  $FAIT = \emptyset$ .
- tant que *TODO* n'est pas vide :
  - **O** = **TODO**.enlever dernier
  - Si = = : répondre OUI
  - $FAIT = FAIT \cup \{ \bigcirc \}$ .
  - pour tout ○∈ Enfants(●) :
- répondre NON.

#### Algorithme

- Suite d'opérations élémentaires et non-ambigües.
- Répond à un problème.

Exemple: Existe-t-il un chemin entre et ?

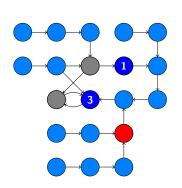


- $TODO = \bigcirc$ ;  $FAIT = \emptyset$ .
- tant que *TODO* n'est pas vide :
  - = TODO.enlever dernier
  - Si = = : répondre OUI
  - $FAIT = FAIT \cup \{ \bigcirc \}$ .
  - pour tout ○∈ Enfants(○):
- répondre NON.

#### Algorithme

- Suite d'opérations élémentaires et non-ambigües.
- Répond à un problème.

Exemple: Existe-t-il un chemin entre et ?

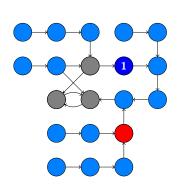


- $TODO = \bigcirc$ ;  $FAIT = \emptyset$ .
- tant que *TODO* n'est pas vide :
  - = TODO.enlever dernier
  - Si = = : répondre OUI
  - $FAIT = FAIT \cup \{ \bigcirc \}$ .
  - pour tout ○∈ Enfants(○):
- répondre NON.

#### Algorithme

- Suite d'opérations élémentaires et non-ambigües.
- Répond à un problème.

Exemple: Existe-t-il un chemin entre et ?

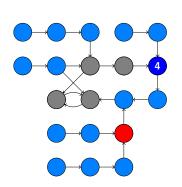


- $TODO = \bigcirc$ ;  $FAIT = \emptyset$ .
- tant que *TODO* n'est pas vide :
  - = TODO.enlever dernier
  - Si = = : répondre OUI
  - $FAIT = FAIT \cup \{ \bigcirc \}$ .
  - pour tout ○∈ Enfants(○) :
- répondre NON.

#### Algorithme

- Suite d'opérations élémentaires et non-ambigües.
- Répond à un problème.

Exemple: Existe-t-il un chemin entre et ?

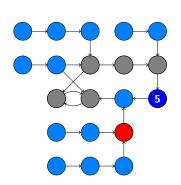


- $TODO = \bigcirc$ ;  $FAIT = \emptyset$ .
- tant que *TODO* n'est pas vide :
  - = TODO.enlever dernier
  - Si = = : répondre OUI
  - $FAIT = FAIT \cup \{ \bigcirc \}$ .
  - pour tout ○∈ Enfants(○):
- répondre NON.

#### Algorithme

- Suite d'opérations élémentaires et non-ambigües.
- Répond à un problème.

Exemple: Existe-t-il un chemin entre et ?

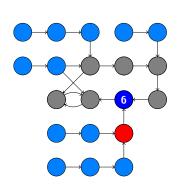


- $TODO = \bigcirc$ ;  $FAIT = \emptyset$ .
- tant que *TODO* n'est pas vide :
  - = TODO.enlever dernier
  - Si = = : répondre OUI
  - $FAIT = FAIT \cup \{ \bigcirc \}$ .
  - pour tout ○∈ Enfants(○):
- répondre NON.

#### Algorithme

- Suite d'opérations élémentaires et non-ambigües.
- Répond à un problème.

Exemple: Existe-t-il un chemin entre et ?

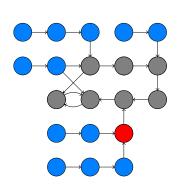


- $TODO = \bigcirc$ ;  $FAIT = \emptyset$ .
- tant que *TODO* n'est pas vide :
  - = TODO.enlever dernier
  - Si = = : répondre OUI
  - $FAIT = FAIT \cup \{ \bigcirc \}$ .
  - pour tout ○∈ Enfants(○):
- répondre NON.

#### Algorithme

- Suite d'opérations élémentaires et non-ambigües.
- Répond à un problème.

Exemple: Existe-t-il un chemin entre et ?



- $TODO = \bigcirc$ ;  $FAIT = \emptyset$ .
- tant que *TODO* n'est pas vide :
  - = TODO.enlever dernier
  - Si = = : répondre OUI
  - $FAIT = FAIT \cup \{ \bigcirc \}$ .
  - pour tout ○∈ Enfants(○):
- répondre NON.

## Complexité d'un algorithme

En fonction de la taille de l'entrée (p. ex. du graphe) :

- DANS LE PIRE DES CAS.
- Nombre d'opérations : complexité en temps.
- Espace requis : complexité en espace.

Algorithme précédent : temps ≈ taille du graphe (idem pour l'espace).

#### Pour schématiser :

- Algorithmes efficaces: taille entrée x 2 ⇒ complexité x 2.
   Entrée de taille 100, temps: 100s;
   Entrée de taille 200, temps: 200s.
- Algorithmes exponentiels: taille entrée x 2 ⇒ complexité<sup>2</sup>.
   Entrée de taille 100, temps: 100s;
   Entrée de taille 200, temps: 10000s (≈ 3h).

## Problèmes et Complexités

Un problème  $\Rightarrow$  0, 1, ou plusieurs algorithmes possibles.

#### Pour certains problèmes :

- Nous ne connaissons pas d'algorithme efficace.
- Nous savons qu'il n'existe pas d'algorithme efficace.
- Nous savons qu'ils sont indécidables (pas d'algorithme possible).

#### Autres critères :

- Complexité en moyenne (dépend de l'application).
- Compromis entre la complexité en espace et en temps.

## Langage et sémantique

But : exprimer de manière compacte un objet (graphe, etc.)

#### Programme

- **1**  $n: \{1, 2, \ldots, 20\}$
- 2 n dizaine  $\rightarrow n/10$
- 3  $n \text{ pair} \rightarrow n/2$
- 4  $n \text{ impair} \rightarrow n+1$

# Langage et sémantique

But : exprimer de manière compacte un objet (graphe, etc.)

#### Programme

- **1**  $n: \{1, 2, \ldots, 20\}$
- 2 n dizaine  $\rightarrow n/10$
- 3  $n \text{ pair} \rightarrow n/2$
- 4  $n \text{ impair} \rightarrow n+1$

#### Sémantique

$$cond(n) \rightarrow f(n)$$
  
 $cond(n) \land m = f(n)$ 



# Langage et sémantique

But : exprimer de manière compacte un objet (graphe, etc.)

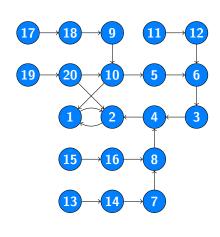
#### Programme

- **1**  $n: \{1, 2, \ldots, 20\}$
- 2 n dizaine  $\rightarrow n/10$
- 3  $n \text{ pair} \rightarrow n/2$
- 4  $n \text{ impair} \rightarrow n+1$

#### Sémantique

$$cond(n) \rightarrow f(n)$$
  
 $cond(n) \land m = f(n)$ 





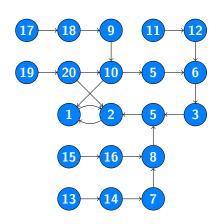
## Plan

- Motivation
- 2 Quelques bases de l'informatique
- 3 Application à la modélisation des systèmes dynamiques
- 4 Conclusion

#### État discret

- Nœud d'un graphe.
- P. ex.: valeur de tous les composants du système:
   nb. de molécules; état qualitatif (absent, un peu, beaucoup); etc.

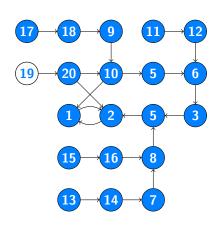
- Arc d'un graphe.
- Le système change d'état.
- Non-déterminisme.



#### État discret

- Nœud d'un graphe.
- P. ex.: valeur de tous les composants du système:
   nb. de molécules; état qualitatif (absent, un peu, beaucoup); etc.

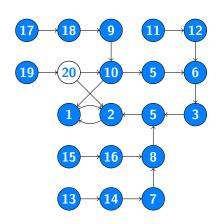
- Arc d'un graphe.
- Le système change d'état.
- Non-déterminisme.



#### État discret

- Nœud d'un graphe.
- P. ex.: valeur de tous les composants du système:
   nb. de molécules; état qualitatif (absent, un peu, beaucoup); etc.

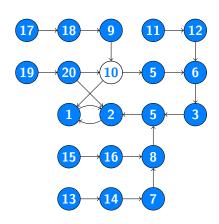
- Arc d'un graphe.
- Le système change d'état.
- Non-déterminisme.



#### État discret

- Nœud d'un graphe.
- P. ex.: valeur de tous les composants du système:
   nb. de molécules; état qualitatif (absent, un peu, beaucoup); etc.

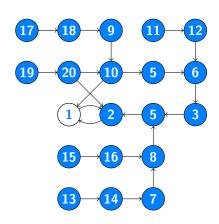
- Arc d'un graphe.
- Le système change d'état.
- Non-déterminisme.



#### État discret

- Nœud d'un graphe.
- P. ex.: valeur de tous les composants du système:
   nb. de molécules; état qualitatif (absent, un peu, beaucoup); etc.

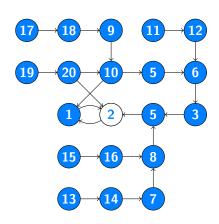
- Arc d'un graphe.
- Le système change d'état.
- Non-déterminisme.



#### État discret

- Nœud d'un graphe.
- P. ex.: valeur de tous les composants du système:
   nb. de molécules; état qualitatif (absent, un peu, beaucoup); etc.

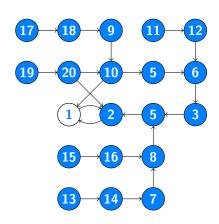
- Arc d'un graphe.
- Le système change d'état.
- Non-déterminisme.



#### État discret

- Nœud d'un graphe.
- P. ex.: valeur de tous les composants du système:
   nb. de molécules; état qualitatif (absent, un peu, beaucoup); etc.

- Arc d'un graphe.
- Le système change d'état.
- Non-déterminisme.



# Autre exemple de modèle

### Programme

- **1** *a* : {0, 1, 2}
- **2** *b* : {0, 1}
- 3 si b = 0 : a +
- **4** si b = 1 et a < 2 : a a
- **5** si a > 0: b+
- **6** si a = 0: b -

# Autre exemple de modèle

## Programme

- **1** *a* : {0, 1, 2}
- **2** *b* : {0, 1}
- 3 si b = 0 : a +
- **4** si b = 1 et a < 2: a a = 1
- **5** si a > 0: b+
- **6** si a = 0: b -

01

- 11
- 21

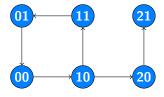
00

- 10
- 20

# Autre exemple de modèle

## Programme

- **1** *a* : {0, 1, 2}
- **2** *b* : {0, 1}
- 3 si b = 0 : a +
- **4** si b = 1 et a < 2: a a = 1
- **5** si a > 0: b+
- **6** si a = 0 : b -



# Utilité pour l'étude du système réel

Généralement, modèle = approximation supérieure du système réel.

Prouver l'existence ou l'absence de comportements (suite d'états)

- Simulation : exemple (non-déterministe) de comportement.
- Vérification formelle (exhaustivité de l'analyse) : prouve notamment l'absence de comportement.

### Comprendre l'émergence de certains comportements

- Analyse de causalité : trouver les responsables.
- Guide le raffinement du modèle, ou le contrôle du système réel.

## Les défis

## Étant donné le graphe des transitions, nous voulons :

- Vérifier l'existence/l'absence de comportements (atteignabilités);
- rechercher l'existence de cycles limites;
- rechercher les causes d'un comportement; etc.

En pratique, les propriétés recherchées se prouvent efficacement.

## Les défis

## Étant donné le graphe des transitions, nous voulons :

- Vérifier l'existence/l'absence de comportements (atteignabilités);
- rechercher l'existence de cycles limites;
- rechercher les causes d'un comportement; etc.

En pratique, les propriétés recherchées se prouvent efficacement.

Problème : taille du graphe exponentielle selon le nb de composants.

⇒ explosion combinatoire des comportements.

Même si les algorithmes sont efficaces, le graphe devient trop grand.

## Les défis

## Étant donné le graphe des transitions, nous voulons :

- Vérifier l'existence/l'absence de comportements (atteignabilités);
- rechercher l'existence de cycles limites;
- rechercher les causes d'un comportement; etc.

En pratique, les propriétés recherchées se prouvent efficacement.

Problème : taille du graphe exponentielle selon le nb de composants.

⇒ explosion combinatoire des comportements.

Même si les algorithmes sont efficaces, le graphe devient trop grand.

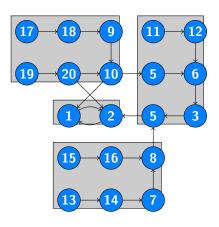
- ⇒ nécessité de simplifier un modèle.
- ⇒ trouver l'explication la plus simple.

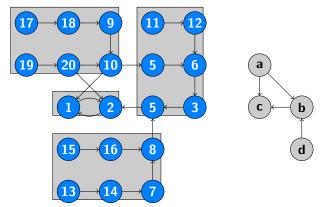
- Espace d'état trop grand (voire infini)
- ⇒ grouper (partitionner) les états.

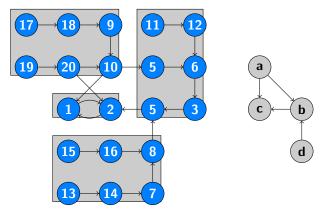
- Espace d'état trop grand (voire infini)
- ⇒ grouper (partitionner) les états.

#### Processus d'abstraction

- Un groupe = état abstrait;
- ⇒ transitions?
- Plusieurs stratégies : existentielle, universelle, etc.

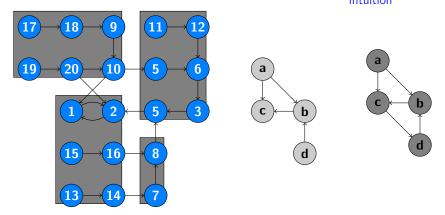






Impact sur les comportements (et donc les preuves)

- Tout comportement concret se retrouve dans le modèle abstrait.
- La réciproque n'est généralement pas vraie.



Impact sur les comportements (et donc les preuves)

- Tout comportement concret se retrouve dans le modèle abstrait.
- La réciproque n'est généralement pas vraie.

### Problématiques associées

- Validité des abstractions (théorie).
- Efficacité d'une abstraction.
- Perte d'information.

#### Comment choisir une bonne abstraction?

 $\Rightarrow$  dépend de la question à répondre.

But : étudier l'évolution du signe de l'état.

## Programme

- 1  $n: \{-1000 \text{ milliard}, \dots, 1000 \text{ milliard}\}$
- 2 n dizaine  $\rightarrow n/10$
- 3  $n \text{ pair} \rightarrow n/2$
- 4  $n \text{ impair} \rightarrow n+1$

But : étudier l'évolution du signe de l'état.

## Programme

- 1  $n: \{-1000 \text{ milliard}, \dots, 1000 \text{ milliard}\}$
- 2 n dizaine  $\rightarrow n/10$
- 3  $n \text{ pair} \rightarrow n/2$
- 4 *n* impair  $\rightarrow n+1$

## Programme abstrait

- 1  $n^{\#}: \{-, 0, +\}$
- $n^{\#} \rightarrow n^{\#}$
- $n^\# \to n^\#$
- 4  $n^{\#}$  est  $\rightarrow 0$   $n^{\#}$  est  $- \rightarrow n^{\#}$  $n^{\#}$  est  $+ \rightarrow n^{\#}$

But : étudier l'évolution du signe de l'état.

## Programme

- 1  $n: \{-1000 \text{ milliard}, \dots, 1000 \text{ milliard}\}$
- 2 n dizaine  $\rightarrow n/10$
- 3  $n \text{ pair} \rightarrow n/2$
- 4  $n \text{ impair} \rightarrow n+1$

## Programme abstrait

- 1  $n^{\#}: \{-, 0, +\}$
- $n^{\#} \rightarrow n^{\#}$
- 3  $n^{\#} \to n^{\#}$
- 4  $n^{\#}$  est  $\rightarrow 0$   $n^{\#}$  est  $- \rightarrow n^{\#}$  $n^{\#}$  est  $+ \rightarrow n^{\#}$





## L'interprétation abstraite (Cousot & Cousot)

- Cadre formel générique pour manipuler et prouver les abstractions.
- Abstractions automatiques.
- Propriétés remarquables et leurs conséquences.
- Liens entre le système concret et le système abstrait.

Idées générales

#### Nous nous fixons:

```
un domaine concret D;
p. ex. {arbre, banane, cheval, voiture, ...}.
un domaine abstrait D#;
p. ex. {1, 2, 3, ...}.
```

Idées générales

#### Nous nous fixons:

```
un domaine concret D;
p. ex. {arbre, banane, cheval, voiture, ...}.
un domaine abstrait D#;
```

un domaine abstrait  $D^{\#}$ p. ex.  $\{1, 2, 3, ...\}$ .

#### Nous définissons alors :

• une fonction d'abstraction  $\alpha$ ; p. ex. : longueur des mots  $\alpha(\{arbre\}) = \{5\}$   $\alpha(\{banane\}) = \{6\}$   $\alpha(\{un, cheval, mange, une, banane\}) = \{2, 3, 5, 6\}$ 

Idées générales

#### Nous nous fixons:

```
    un domaine concret D;
    p. ex. {arbre, banane, cheval, voiture, . . . }.
```

un domaine abstrait D#;
 p. ex. {1, 2, 3, ...}.

#### Nous définissons alors :

- une fonction d'abstraction  $\alpha$ ; p. ex. : longueur des mots  $\alpha(\{arbre\}) = \{5\}$   $\alpha(\{banane\}) = \{6\}$   $\alpha(\{un, cheval, mange, une, banane\}) = \{2, 3, 5, 6\}$
- une fonction de concrétisation  $\gamma$ :  $\gamma(\{6\}) = \{\text{banane, cheval, machin, } \dots\}$

Idées générales (suite)

```
\begin{split} &\alpha(\{\text{un, cheval, mange, une, banane}\}) = \{2, 3, 5, 6\} \\ &\gamma(\{6\}) = \{\text{banane, cheval, machin, } \ldots\} \\ &\text{Propriétés de base } (d \text{ est un sous-ensemble de } D, d^{\#} \text{ de } D^{\#}) \\ &\bullet \alpha(d) \subseteq \alpha(d \cup \ldots) \,; \end{split}
```

•  $\gamma(d^{\#}) \subseteq \gamma(d^{\#} \cup \dots)$ .

Idées générales (suite)

$$\begin{split} &\alpha\big(\{\mathrm{un},\mathrm{cheval},\mathrm{mange},\mathrm{une},\mathrm{banane}\}\big) = \{2,3,5,6\}\\ &\gamma\big(\{6\}\big) = \{\mathrm{banane},\mathrm{cheval},\mathrm{machin},\ldots\} \end{split}$$

Propriétés de base (d est un sous-ensemble de D,  $d^{\#}$  de  $D^{\#}$ )

- $\alpha(d) \subseteq \alpha(d \cup \dots)$ ;
- $\gamma(d^\#) \subseteq \gamma(d^\# \cup \dots)$ .

### Propriétés remarquables

- $d \subseteq \gamma(\alpha(d))$ ;
- $\alpha(\gamma(d^{\#})) \subseteq d^{\#}$ .

 $\Rightarrow$  connexion de Galois entre D et  $D^{\#}$ .

## Plan

- Motivation
- 2 Quelques bases de l'informatique
- 3 Application à la modélisation des systèmes dynamiques
- 4 Conclusion

Applications en bio-informatique

L'interprétation abstraite permet (formellement) de :

- Simplifier, réduire un modèle.
- Réduire la complexité de certains calculs.
- Conserver un lien avec le modèle original (interprétation des preuves, etc).

Applications en bio-informatique

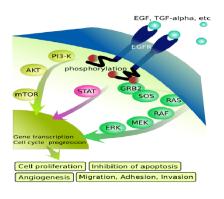
## L'interprétation abstraite permet (formellement) de :

- Simplifier, réduire un modèle.
- Réduire la complexité de certains calculs.
- Conserver un lien avec le modèle original (interprétation des preuves, etc).

## Exemples de travaux récents (et en cours)

- Réduction automatique de modèles à base de règles (Feret et al) :
  - Modélisation des systèmes en Kappa;
  - Sémantiques continues (ODE) et stochastiques.

# **Signalling Pathways**



## tion abstraite

en bio-informatique

t) de:

interprétation des

Eikuch, 2007 ! de règles (Feret et al) :

- Modélisation des systèmes en Kappa;
- Sémantiques continues (ODE) et stochastiques.

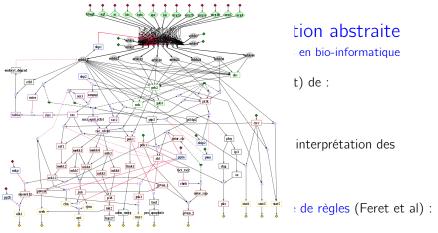
#### Applications en bio-informatique

## L'interprétation abstraite permet (formellement) de :

- Simplifier, réduire un modèle.
- Réduire la complexité de certains calculs.
- Conserver un lien avec le modèle original (interprétation des preuves, etc).

## Exemples de travaux récents (et en cours)

- Réduction automatique de modèles à base de règles (Feret et al) :
  - Modélisation des systèmes en Kappa;
  - Sémantiques continues (ODE) et stochastiques.
- Vérification formelle de grands réseaux de régulation (Paulevé et al) :
  - Modélisation des systèmes en Process Hitting.
  - Extraction de composants clés.



- Sémantiques continues (ODE) et stochastiques.
- Vérification formelle de grands réseaux de régulation (Paulevé et al) :
  - Modélisation des systèmes en Process Hitting.
  - Extraction de composants clés.

## Conclusion

## Étude des systèmes dynamiques :

- Comportement global émergent complexe.
- Systèmes de grande taille.
- Nombre gigantesque de comportements possibles.

### But: trouver les explications les plus simples.

L'informatique apporte des méthodes automatiques réutilisables.

#### Abstraction des modèles

- Réduction des modèles.
- Simplification des modèles.
- Connexions théoriques entre les différents modèles.