

Experiences In-Virtuo avec le logiciel
NetBioDyn

Pascal BALLETT, Jérémy RIVIERE

October 6, 2014

Université de Bretagne Occidentale - Département d'Informatique - 20 avenue
Le Gorgeu, 29238 BREST Cedex 2 - FRANCE.

Contents

1	Diffusion	3
1.1	Système réel	3
1.2	Modélisation	3
1.2.1	Objectifs	3
1.2.2	Réalisation	3
1.3	Questions	4
2	Mélange par diffusion	5
2.1	Système réel	5
2.2	Modélisation	5
2.2.1	Objectifs	5
2.2.2	Réalisation	5
2.3	Questions	6
3	Dégradation	7
3.1	Système réel	7
3.2	Modélisation	7
3.2.1	Objectifs	7
3.2.2	Réalisation	7
3.3	Questions	7
	Introduction	
	L'expérimentation <i>In-Virtuo</i> (dans le virtuel) permet de s'approcher des expériences In-Vitro ou In-Vivo.	

Chapter 1

Diffusion

1.1 Système réel

Le système réel correspond à la diffusion d'un type de molécule au sein d'un milieu liquide. Au départ, 200 molécules sont placées au centre de l'environnement. A la fin, les molécules, du fait de l'agitation thermique, sont présentes partout dans l'environnement.

1.2 Modélisation

1.2.1 Objectifs

Trouver la courbe de la surface de diffusion en fonction du temps.

1.2.2 Réalisation

La simulation se déroule dans un environnement bi-dimensionnel de 100x100x1. Au milieu, se trouvent 200 molécules.

Un comportement de marche aléatoire est alors appliqué aux molécules.

Le détail est le suivant :

1. Un types moléculaires est requis : *Mol*.
2. Un comportement de marche aléatoire doit être ajoutés.
3. Les entitiés *Mol* sont placées au centre de l'environnement à l'aide du spray. Le surplus est enlevé avec la gomme. Le manque peut être ajouté avec le stylo. Pour rappel, il faut atteindre exactementv 200 molécules en tout. La forme créée par les molécules doit être proche de celle d'un disque.
4. Lancer la simulation pour vérifier que la diffusion se fait bien.
5. Faire Stop et revenir à l'état initial.

1.3 Questions

1. En supposant qu'une molécule de type 1 mesure 1 nm x 1 nm x 1 nm, quelles sont la longueur, la largeur et la hauteur de l'environnement en nm ?
2. Lancer une simulation jusqu'à ce que les molécules touchent les bords de l'environnement. Faire *Pause* dans le simulateur. Noter le nombre de pas de simulation qu'il a fallu pour en arriver là (P_{MAX}).
3. Pour mesurer la vitesse de diffusion des entités au cours du temps, des expériences virtuelles sont à réaliser :
 - (a) Dessiner un graphique avec en abscisse un nombre de pas de simulation P dont les valeurs varient de 0 à P_{MAX} . En ordonnée, il s'agit d'un rayon R (en nm). Ce rayon varie de 0 à R_{MAX} qui correspond à la longueur de l'environnement divisée par 2.
 - (b) Mesurer approximativement le rayon du disque que forment les entités à l'instant initial ($P = 0$). Reporter ce nombre sur votre graphique.
 - (c) Grâce à la simulation réalisée précédemment, un autre point est connu. En effet, à $P = P_{MAX}$ il y a $R = R_{MAX}$.
 - (d) Il faut maintenant ajouter 8 points intermédiaires. Puis il convient de calculer l'intervalle de temps (en pas de simulation) pour placer sur votre abscisse 8 autres points. Les dix points ainsi placés sur l'abscisse, de $P = 0$ à $P = P_{MAX}$ (à équidistance) donne les pas de simulation auxquels il faudra mesurer le rayon du disque formé par les molécules.
 - (e) Lancer une nouvelle simulation, puis à chaque point intermédiaire, faire *Pause* pour noter le rayon et le reporter sur le graphique.
 - (f) Interpoler une courbe approchée reliant les 10 points de mesure.
4. Est-ce que la taille du rayon du disque est proportionnelle aux pas de temps écoulés P ? Si non, quelle fonction mathématique simple pourrait être utilisée pour approximer la courbe ?

Chapter 2

Mélange par diffusion

2.1 Système réel

Le système réel correspond à la diffusion de deux types de molécules au sein d'un même milieu liquide. Au départ, les deux types sont bien séparées en terme de localisation. A la fin, les deux molécules, du fait de l'agitation thermique, sont mélangées.

2.2 Modélisation

2.2.1 Objectifs

Reproduire en simulation le mélange des deux types de molécules.

2.2.2 Réalisation

La simulation se déroule dans un environnement bi-dimensionnel de $100 \times 100 \times 1$. En bas à gauche se trouvent 200 molécules de type 1 et en haut à droite 200 molécules de type 2.

Un comportement de marche aléatoire est appliqué à chaque type de molécules. Le détail est le suivant :

1. Deux types moléculaires sont requis : *Mol 1* et *Mol 2*.
2. Deux comportements de marche aléatoire doivent être ajoutés.
3. Les entités *Mol 1* et *Mol 2* sont placées dans l'environnement à l'aide du spray. Le surplus est enlevé avec la gomme. Le manque peut être ajouté avec le stylo. Pour rappel, il faut atteindre exactement 200 molécules de chaque type, soit 400 entités en tout.
4. Lancer la simulation pour vérifier que le mélange se fait bien.

2.3 Questions

1. En supposant qu'une molécule de type 1 mesure 10 nm x 10 nm x 1 nm (idem pour celle de type 2), quelle est la longueur de l'environnement en nm ?
2. Quelle est la surface de l'environnement en nm^2 ?
3. Quelle est la surface de l'environnement en μm^2 ?
4. Lancer une simulation jusqu'à ce que les molécules vous semblent bien mélangées. Noter le nombre de pas de simulation qu'il a fallu pour en arriver là.
5. Sachant qu'il faut 1 seconde pour que le système réel soit bien mélangé, à combien de temps (en seconde) équivaut un pas de simulation ?

Chapter 3

Dégradation

3.1 Système réel

Le système réel correspond à la dégradation d'un seul type de molécules au sein d'un milieu liquide. Dans cet exemple, peu importe la localisation des entités. A la fin, plus aucune molécule ne doit être présente.

3.2 Modélisation

3.2.1 Objectifs

Reproduire en simulation la dégradation d'un seul types de molécules.

3.2.2 Réalisation

La simulation se déroule dans un environnement bi-dimensionnel de $100 \times 100 \times 1$. 100 molécules d'un même type (par exemple type A) sont placées au hasard dans l'environnement.

1. Un comportement de dégradation doit être ajouté avec la probabilité de 0.01 : type A \Rightarrow 0
2. Vérifier que le nombre de molécules diminue au cours de la simulation.
Mettre la simulation sur *Pause* après la disparition de la dernière molécule.

3.3 Questions

1. Noter le nombre de pas de simulations nécessaires pour que la moitié des molécules aient disparues (1/2 vie en pas de simulation).
2. Trouver une méthode pour calculer la 1/2 vie en fonction de la probabilité du comportement de dégradation.