



Programme

10^{EMES} JOURNEES SCIENTIFIQUES DU LABEX NUMEV

SOLUTIONS NUMÉRIQUES, MATÉRIELLES ET MODÉLISATION
POUR L'ENVIRONNEMENT ET LE VIVANT

Mardi 9 et mercredi 10 novembre 2021

Université de Montpellier, Campus St Priest, Amphithéâtre Moreau, et sur Zoom

Mardi 9 novembre 2021

9h00-10h00	Mot de bienvenue et point d'étape sur le LabEx NUMEV Andrea Parmeggiani, Emmanuel Le Clézio, Nabil Zemiti, co-directeurs du LabEx NUMEV, Université de Montpellier
------------	--

SESSION 1. CONNAITRE – KNOWING

10h00-10h10 **Présentations-flash**

Axe Capteurs et Vecteurs

Jérémie Torres, IES et Sébastien Druon, LIRMM

Axe Modélisation

Franck Jourdan, LMGC et John Palmeri, L2C

10h10-11h00 **Keynote 1 – Roland Pellenq, University of Washington, USA**

« Bridging length and time scales in the modeling of complex porous materials. »

Concerning length-scales, I will introduce the concept of Potential of Mean Force, PMF, as a way to implement upscaling modeling from the nano-scale to micron-scale. As regards to time scales, I will introduce metadynamics concepts as a way to implement upscaling modelling from the time scale of the elementary chemical reaction to geological time scales.

A PMF is a free energy function representing in an effective way the interactions between objects (cement hydrates, clay platelets, etc.) at thermodynamics conditions. The PMF is therefore the key piece of information allowing to coarse-grained Physical-Chemistry information in a meso-scale model formulation. The use of PMF offers a huge computational advantage as it allows a straight up-scaling to the meso-scale while keeping essential interactions information that are the hallmark of Physical-Chemistry processes. Such a coarse-grained modeling integrates atomistic response into inter-particle potentials that fully propagate molecular scale information all the way to the meso-scale.

Concerning time scales, I will be introduce the reactive replica exchange molecular dynamics (RExMD) to investigate the geological conversion of two important classes of gas-forming constituents of terrestrial organic matter: lignin and cellulose. This conversion takes place over a time window of hundreds of millions of years. I will show that it can be modelled and deciphered using reactive force fields coupled to a RExMD approach.

11h00-11h30 **Pause-café**

11h30-12h00

Success story 1 – Rahima Sidi Boulenouar, IFSTTAR, Paris

« *Real-time dynamical monitoring of plant status in normal and stress conditions: from low fields NMR in laboratory to compact NMR in plants.* »

Today, understanding how plants respond to water stress is essential to meet the challenge of developing new cultivars and new irrigation strategies, consistent with the maintenance of crop productivity in the context of global change. In this context, the study of plant/water relations is of central interest for modeling plant and organ responses to biotic and abiotic constraints. Paradoxically, there are very few direct and non-invasive methods to quantify and measure the level and the flow of water in plants. For this purpose, we report on the development of an innovative methodology based on Nuclear Magnetic Resonance relaxometry and imaging at low and high magnetic fields, respectively, to study the water content, the phloem and xylem transport in sorghum plants. The combination of these approaches allows us to seek new eco-physiological biomarkers and to design experiments in the laboratory and even in field conditions.

One particular interesting result concerns the investigation of the spatial distribution of water in stems (knot and inter knot) from T1 and T2 MRI images. The modification of the NMR relaxation parameters during dynamic diurnal cycle will be presented in normal and abiotic stress conditions. A direct application could permit to extract eco-physiological biomarkers which allow to explore and model water fluxes during heat and water stresses and analyze their impact on the development of young reproductive organs.

12h00-12h30

Projet nouveau 1 – Christophe Coillot, L2C

« *Le module doctoral d'Education à la Transition Ecologique (ETE).* »

A l'issue de la COP21, les États se sont engagés à baisser drastiquement leurs émissions de gaz à effet de serre. La stratégie nationale bas carbone (SNBC) impose une réduction d'au moins 30 % sur la décennie en cours pour atteindre la neutralité carbone en 2050. Cette bifurcation radicale vers une société décarbonée requiert une prise de conscience collective des enjeux et des moyens d'action. L'université peut être le terreau fertile de cette transformation pour former des scientifiques (professeurs, chercheurs, ingénieurs, citoyens) conscients des enjeux et disposant de compétences adaptées.

Ainsi, le module expérimental ETE, destiné aux doctorant.e.s de l'ED I2S, visait à assurer un socle commun de connaissances nouvelles et transverses autour des problématiques environnementales (dont, en particulier, le changement climatique) et d'ouvrir aux solutions pour y répondre individuellement, professionnellement et collectivement. Il s'agissait également de transmettre des connaissances pratiques pour agir. Par exemple dans les domaines de l'ingénierie, les techniques d'ecoconception, qui intègrent une dimension éthique aux processus de conception, illustrent clairement ce changement de paradigme.

Nous présenterons le contexte de l'Éducation à la Transition Ecologique (ETE), les enjeux, les objectifs et les initiatives. Plus particulièrement nous détaillerons le programme du module ETE en nous appuyant sur quelques point-clefs des cours qui ont été dispensés.

12h30-14h00 Déjeuner

SESSION 2. COMPRENDRE - UNDERSTANDING

14h00-14h10 Présentations-flash

Axe Données, Algorithmes et Calculs

Pascal Poncelet, LIRMM et Nadine Hilgert, INRAe MISTEA

PI Génomes

Fabio Pardi, LIRMM et Gilles Didier, IMAG

14h10-15h00 Keynote 2 – Alessandro Veneziani, Emory University, Atlanta, USA

« *Cardiovascular mathematics between Data, Models and Clinics.* »

Working in Cardiovascular Mathematics is a rewarding experience, as one has the opportunity to bridge theory and practice with the ultimate purpose of improving healthcare. The reliability and efficiency required by the clinical timelines naturally triggered the development of data assimilation, uncertainty quantification, and reduced-order modeling techniques. The integration of Data-driven and Model-driven approaches is crucial in this field, where each patient may represent a different and unique challenging problem. In this talk, we will see some examples, ranging from aortic diseases to bioresorbable stents, pointing out the role of computational mechanics in the “Big-Data” era.

15h00-15h30 Success story 2 – Jean-Charles Walter, L2C

« *Genomic physics: biophysical modeling confronted to genomic data.* »

The last decade has seen a spectacular development of genomic physics both in bacteria and eukaryotes. This is due in large part to the development of experimental techniques, which allow to probe (i) the motion of nucleic acids (chromosomal DNA and RNA) *in vivo* by means of microscopy techniques and (ii) the interactions of these nucleic acids with other actors of the cell (like proteins and molecular motors) by means of high-throughput sequencing techniques. I will focus on three different processes : (i) the modeling of translation with a ballistic model describing the motion of ribosomes on messenger RNA, (ii) the physical mechanism of liquid-liquid phase separation, which is found to be universally spread in the cells to increase, locally and transiently, the concentration of a molecular actor (proteins, RNA etc.). We illustrate this process with the example of the bacterial DNA segregation where liquid-liquid phase separation is used to increase the local concentration in order to catalyze ATP hydrolysis. Finally (iii) I give a general framework on how polymer physics can help to infer the organization of DNA *in vivo* from microscopy and high-throughput sequencing experiments and apply it to the modeling of bacterial DNA in *Escherichia coli* and to the epigenetic regulation via polycomb domains in *Drosophila*.

15h30-16h00 Projet nouveau 2 – Estelle Pitard, L2C

« *PROJET SEAGRASS : Modélisation de la dynamique de populations d'herbiers littoraux et données spatio-temporelles.* »

Ce projet vise à rapprocher une approche théorique de modélisation spatio-temporelle de dynamique des populations végétales, des données de terrain et de télédétection à travers une thèse de doctorat. Nous développerons dans un premier temps des modèles incluant les effets de changements tels que les variations saisonnières ou les perturbations climatiques et anthropiques. Ces modèles serviront à construire des cartes et des évolutions réalistes d'occupation spatiale d'herbiers littoraux, afin de prévoir leur occupation future sur la base de différents scénarios. La thèse portera sur le développement d'une méthode qui permettra de disposer de modèles spatialement explicites d'herbiers s'appuyant sur des données de terrain et de télédétection satellitaire à haute résolution temporelle et spatiale sur des sites pilotes du littoral méditerranéen.

SESSION 3. CONSTRUIRE - IMPLEMENTING

16h30-16h40 Présentations-flash

PI Assistance au geste chirurgical

Nabil Zemiti, LIRMM et Simon Le Floch, LMGC

PI Mouvement

Julien Lagarde, Euromov DHM et Sofiane Ramdani, LIRMM

16h40-17h30 Keynote 3 – Paolo Fiorini, University of Verona, Italy

« Knowledge and Autonomy for Surgical Robots. »

AI-based robot applications face the challenge of providing the robot with enough knowledge so that the robot can take autonomous decisions and understand its environment. In our research we explore a few methods to accomplish this: top-down, bottom-up and learning. In this talk I will present our current results of knowledge representation in the context of robotic surgery, and explore the challenges of the research.

19h30-22h30 : Soirée « Science et Improvisation » à la Brasserie du Dôme au 2, avenue Clémenceau à Montpellier - présentations des doctorants et doctorantes NUMEV suivi d'un spectacle inspiré des sujets de thèse par la Compagnie du Capitaine.

A suivre en direct à partir de 21h sur Zoom (les personnes inscrites aux Journées ont reçu le lien).

Mercredi 10 novembre 2021

9h00-9h30 Success story 3 – Thomas Guiho, INRIA Camin

« Spinal cord stimulation to restore functions in people with spinal cord injury - a highly multidisciplinary challenge. »

Spinal cord injury results in the loss of movement and sensory feedback but also in disruption of organ function. In addition to limb impairments, nearly all people with spinal cord injury lose bladder control and are prone to kidney failure if they do not perform intermittent (self-) catheterization. Spinal cord stimulation (SCS) is a promising approach to boost patient rehabilitation as it facilitates the orderly recruitment of nerve fibers at the spinal cord level and should eventually lead to the orderly recruitment of paralyzed muscles. Although well documented for lower limb rehabilitation, SCS remains underused for bladder function and its mechanism of action has yet to be elucidated even for widely investigated motor functions.

Early in my career, I had the opportunity to investigate SCS for bladder – PhD work (CAMIN team, INRIA Montpellier) – and upper-limb functions – Post-doc in the UK (Prof Andrew Jackson lab in Newcastle). After 3.5 years in the UK, I obtained a Starting Research Position at INRIA and return to the CAMIN team. My daily work combines experimental planning on large animals, electrophysiology and signal processing.

The LabEx Numev played an important role in my career path by funding half of my PhD grant and supported me throughout my PhD by helping financing experiments that led to three publications in international peer-reviewed journal.

9h30-10h00 Projet nouveau 3 – Franck Jourdan, LMGC

« Etude numérique de l'influence d'un implant fémoral personnalisé sur les contraintes fémoropatellaires d'une prothèse totale de genou. »

La mise en place d'une prothèse totale de genou (PTG) moderne laisse 10 à 25% de patients insatisfaits, se plaignant jusqu'à 45% d'entre eux de douleurs antérieures de genou résiduelles. Ces douleurs sont généralement en rapport avec un excès de contraintes entre la rotule et le fémur prothétique. Elles surviennent globalement lorsque les patients ont les jambes « arquées », c'est à dire un mauvais alignement entre le fémur et le tibia. L'objectif de l'étude, qui se situe dans le cadre de la thèse de doctorat de Louis Dagneaux, chirurgien orthopédique, est de mettre au point un modèle éléments finis, biomécanique capable de donner des informations sur la cause des douleurs. Le modèle numérique doit prendre en compte la variabilité anatomique des patients ainsi que différentes PTG du marché. Cette étude est un travail préalable à la conception future d'implants fémoraux modulaires prenant en compte le phénotype du genou du patient, qui réduiraient les contraintes sur la rotule ainsi que les douleurs.

10h00-10h30 Pause-café

SESSION 4. ANALYSER - ANALYSING

10h30-10h40 Présentations-flash

Axe Modèles Expérimentaux et Mesures

Gladys Massiera, L2C et Benoît Charlot, IES

PI Océan et Littoral

Serge Bernard, LIRMM et Pascale Fabre, L2C

10h40-11h30 Keynote 4 – Joshua Taylor, University of Toronto, Canada**« *Convex Optimization of Bioprocesses.* »**

In this talk, we begin by optimizing the gradostat, in which several chemostats are interconnected by mass flow and diffusion. The gradostat is of interest both as a classical nonlinear system and because the basic network structure and nonlinearities appear in a wide variety of bioprocesses, including wastewater treatment. We formulate a convex relaxation for optimizing the gradostat. The relaxation is exact under several conditions, for instance, if the gradostat is outflow connected and its flow matrix is irreducible. When the microbial growth in the bioreactors is described by the Monod or Contois functions, the relaxation is a second-order cone program, which can be solved at scales of over 10^5 variables in minutes with industrial software. We also discuss how to extend the work to a general class of bioprocesses, and present an example based on wastewater treatment.

11h30-12h00 Success story 4 – Agnès Burgers, ENSAM**« *De l'ingénierie de la construction à l'Architecture, une ouverture à l'interdisciplinarité.* »**

Agnès Burgers est actuellement maître de conférences à l'Ecole Nationale Supérieure d'Architecture de Montpellier, où elle enseigne principalement sur les thématiques des matériaux, de l'impact environnemental des constructions et de la transition écologique.

Issue d'une formation d'ingénieur construction, elle s'engage en 2013, dans un doctorat sur la caractérisation physico-mécanique des bois de pins méditerranéen, soutenu par le Labex Numev. L'étude du matériau bois sera une initiation à l'interdisciplinarité, qu'Agnès Burgers choisira de continuer à porter à travers le montage du master Sciences du Bois à l'Université de Montpellier, également soutenu par le Labex.

Aujourd'hui son activité d'enseignante-chercheuse dans le champ des sciences techniques pour l'architecture s'inscrit dans d'autres formes d'interdisciplinarité, où le numérique au service de environnement et du vivant a toute sa place.

12h00-12h30 Projet nouveau 4 – Matthieu George, L2C**« *Dégradation de polymères en milieu aquatique.* »**

La pollution par les déchets plastiques est un défi environnemental majeur résultant de leur accumulation dans les milieux terrestres et marins, sous forme de macro, micro, voire de nano-plastiques. Nos activités de recherche visent à déterminer la cinétique de génération de sous-produits de dégradation particuliers (micro et nano-plastiques (MPs, NPs) ou partiellement solubles (oligomères, par exemple) et de caractériser les tailles, natures chimiques et temps de persistance de ces produits en milieu marin. Mieux connaître les sous-produits de dégradation des plastiques dans l'environnement est essentiel pour évaluer ensuite leur potentielle toxicité. Ces études sont menées à la fois pour des plastiques conventionnels et pour des matériaux biodégradables alternatifs, dont on ne peut exclure à l'heure actuelle qu'ils produisent également des MP, étant donné que leur biodégradation ultime requiert des conditions spécifiques rarement réunies dans un environnement aquatique.

CLOTURE DES JOURNEES SCIENTIFIQUES

