Introduction à l'Algèbre Différentielle avec Applications

François Boulier
Univ. Lille, CRIStAL, CFHP

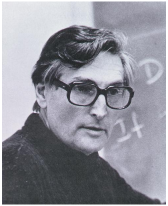
14 février 2018

Ritt et Kolchin

Joseph Fels Ritt.
Differential Equations from the Algebraic Standpoint
AMS Coll. Pub. XIV, 1932

Joseph Fels Ritt.
Differential Algebra
AMS Coll. Pub. XXXIII, 1950

Ellis Robert Kolchin.
Differential Algebra and Algebraic Groups
Acad. Press, 1973



Un extrait de la préface de Ritt (1932)

Il est habituel, lorsqu'on traite des systèmes d'équations différentielles, de supposer ces systèmes sous forme canonique. De telles formes sont inappropriées pour la représentation des systèmes généraux. Il est vrai que des méthodes ont été proposées pour réduire les systèmes généraux à différents types canoniques. Mais les limitations qui accompagnent l'usage du théorème des fonctions implicites, l'absence de méthodes pour gérer les phénomènes de dégénerescence qui vont très probablement apparaître lors des processus d'élimination et l'absence de techniques pour prévenir l'apparition de solutions parasites sont tout simplement les symptômes de la futilité intrinsèque de telles méthodes de réduction.

Maintenant, dans la théorie des systèmes d'équations algébriques, on observe un spectacle bien plus réjouissant. Le Kronecker's Festschrift de 1882 a abouti à une fondation solide de la théorie de l'élimination algébrique et à la théorie générale des variétés algébriques. Les contributions de Mertens, Hilbert, König, Lasker, Macaulay, Henzelt, Emmy Nöther, van der Waerden et d'autres, ont apporté, à cette branche de l'algèbre, un haut degré de perfection. Dans les notions de variété irréductible, d'idéal de polynômes, on trouve de la matière pour des investigations qualitatives et combinatoires très poussées. Du côté formel, on dispose de méthodes d'élimination universellement applicables et des formules pour les résultants.

Dérivations

Une dérivation sur un anneau $\mathscr{R}$ est une opération unaire telle que, pour tous $a, b \in \mathscr{R}$,

$$\begin{aligned} (a+b)' &= a' + b'\,, \\ (a\,b)' &= a\,b' + a'\,b\,. \end{aligned}$$

Exercices. Montrer que

$0' = 0$

Dérivations

Une dérivation sur un anneau $\mathscr{R}$ est une opération unaire telle que, pour tous $a, b \in \mathscr{R}$,

$$\begin{aligned} (a+b)' &= a' + b' \,, \\ (a\,b)' &= a\,b' + a'\,b \,. \end{aligned}$$

Exercices. Montrer que

$0' = (0+0)' = 2 \times 0'$ donc $0' = 0$.

Dérivations

Une dérivation sur un anneau $\mathscr{R}$ est une opération unaire telle que, pour tous $a, b \in \mathscr{R}$,

$$\begin{aligned} (a+b)' &= a' + b' \,, \\ (a\,b)' &= a\,b' + a'\,b \,. \end{aligned}$$

Exercices. Montrer que

$0' = (0+0)' = 2 \times 0'$ donc $0' = 0$.
$1' = 0$

Dérivations

Une dérivation sur un anneau $\mathscr{R}$ est une opération unaire telle que, pour tous $a, b \in \mathscr{R}$,

$$\begin{aligned} (a+b)' &= a' + b' \,, \\ (a\,b)' &= a\,b' + a'\,b \,. \end{aligned}$$

Exercices. Montrer que

$0' = (0+0)' = 2 \times 0'$ donc $0' = 0$.
$1' = (1 \times 1)' = 1 \times 1' + 1' \times 1$ donc $1' = 0$.

Dérivations

Une dérivation sur un anneau $\mathscr{R}$ est une opération unaire telle que, pour tous $a, b \in \mathscr{R}$,

$$\begin{aligned} (a+b)' &= a' + b'\,, \\ (a\,b)' &= a\,b' + a'\,b\,. \end{aligned}$$

Exercices. Montrer que

$0' = (0+0)' = 2 \times 0'$ donc $0' = 0$.
$1' = (1 \times 1)' = 1 \times 1' + 1' \times 1$ donc $1' = 0$.
$(a/b)' = (a'\,b - a\,b')/b^2$

Dérivations

Une dérivation sur un anneau $\mathscr{R}$ est une opération unaire telle que, pour tous $a, b \in \mathscr{R}$,

$$\begin{aligned} (a+b)' &= a' + b' \,, \\ (a\,b)' &= a\,b' + a'\,b \,. \end{aligned}$$

Exercices. Montrer que

$0' = (0+0)' = 2 \times 0'$ donc $0' = 0$.
$1' = (1 \times 1)' = 1 \times 1' + 1' \times 1$ donc $1' = 0$.

$$\begin{aligned} ((a/b) \times b)' = a' \quad & \text{donc} \quad (a/b)' \times b + (a/b) \times b' = a' \\ & \text{donc} \quad (a/b)' = (a'\,b - a\,b')/b^2. \end{aligned}$$

Polynômes différentiels

Le membre gauche de l'EDO suivante est un polynôme différentiel

$$\dot{y}^2 - 4\,y = 0\,.$$

- Anneau de polynômes différentiels $\mathscr{F}\{y\}$,
- Une dérivation δ (pour $\mathrm{d}/\mathrm{d}t$)
- Une indéterminée différentielle y (pour la fonction inconnue $y(t)$),
- Le symbole $\dot{y}$ est une dérivée (de l'indéterminée différentielle),
- Un corps différentiel de coefficients $\mathscr{F} = \mathbb{Q}, \mathbb{Q}(t)$.

Polynômes différentiels

Le membre gauche de l'EDP suivante est un polynôme différentiel

$$u_t = u_{xx}\,.$$

- Anneau de polynômes différentiels $\mathscr{F}\{u\}$,
- deux dérivations δ_x, δ_t (pour $\partial/\partial x, \partial/\partial t$),
- Une indéterminée différentielle u (pour la fonction inconnue $u(t,x)$),
- Les symboles u_t, u_{xx} sont des dérivées (de l'indéterminée différentielle), notées aussi θu où $\theta = \delta_t, \delta_x^2$ (expression générale $\theta = \delta_t^a\,\delta_x^b$),
- un corps différentiel de coefficients $\mathscr{F} = \mathbb{Q}, \mathbb{Q}(x,t)$.

Classements (rankings)

Un classement est un ordre total sur l'ensemble des dérivées des indéterminées différentielles. Fixons un classement. La dérivée dominante d'un polynôme différentiel p est définie comme la plus grande dérivée figurant dans p.

Le polynôme différentiel

$$\dot{y}^2 - 4\,y$$

admet $\dot{y}$ pour dérivée dominante vis-à-vis du classement

$$\cdots > \ddot{y} > \dot{y} > y$$

(seul classement possible ici). En tirant la dérivée dominante,

$$\dot{y}^2 = 4\,y\,.$$

Classements (rankings)

Un classement est un ordre total sur l'ensemble des dérivées des indéterminées différentielles. Fixons un classement. La dérivée dominante d'un polynôme différentiel p est définie comme la plus grande dérivée figurant dans p.

Le polynôme différentiel

$$u_t - u_{xx}$$

admet u_t pour dérivée dominante vis-à-vis de tout classement de la forme

$$\mathrm{ord}(\theta, t) > \mathrm{ord}(\phi, t) \Rightarrow \theta u > \phi v$$

(classement qui élimine la dérivation δ_t). En tirant la dérivée dominante,

$$u_t = u_{xx}\,.$$

Classements (rankings)

Un classement est un ordre total sur l'ensemble des dérivées des indéterminées différentielles. Fixons un classement. La dérivée dominante d'un polynôme différentiel p est définie comme la plus grande dérivée figurant dans p.

Le polynôme différentiel

$$u_t - u_{xx}$$

admet u_{xx} pour dérivée dominante vis-à-vis de tout classement compatible avec l'ordre total

$$\mathrm{ord}(\theta) > \mathrm{ord}(\phi) \Rightarrow \theta u > \phi v$$

(classements "naturels" pour le thm de Cauchy-Kowalevskaia). En tirant la dérivée dominante,

$$u_{xx} = u_t \,.$$

Intégration de fractions différentielles

F. Boulier, F. Lemaire, J. Lallemand, G. Regensburger, M. Rosenkranz.
Additive Normal Forms and Integration of Differential Fractions.
J. Symb. Comp. 77, pp. 16-38, 2016.

$$\begin{tikzcd} \frac{\dot{u}^2+v}{\dot{v}} \arrow[r, bend left, "\delta"] & \frac{2\,\ddot{u}\,\dot{u}\,\dot{v}-\ddot{v}\,(\dot{u}^2+v)+\dot{v}^2}{\dot{v}^2} \arrow[l, bend left, "\text{integrate}"] \end{tikzcd}$$

Si la fraction F n'est pas intégrable, l'algorithme la décompose en une partie intégrable R et une partie qui ne l'est pas W. Cette décomposition dépend du classement.

$$\text{integrate}(F, \delta) = (W, R)\,, \quad F = W + \delta\, R\,.$$

L'algorithme est additif :

$$\text{integrate}(F_1 + F_2, \delta) = (W_1 + W_2, R_1 + R_2)$$

Intégration de polynômes différentiels

Les polynômes sont des cas particuliers de fractions.

$$\mathrm{integrate}(F, \delta) = (W, R), \quad F = W + \delta\, R\,.$$

Le polynôme W est une combinaison linéaire de monômes non intégrables :

Déf : $M = x^e v_1^{d_1} \cdots v_s^{d_s}$ ($e \geq 0; v_1 > v_2 > \cdots > v_s$) est intégrable

soit $s = 0$

soit $\operatorname{ord} v_1 > 0$ et $(d_1 = 1)$ et $(s = 1$ ou $\delta v_2 \leq v_1)$

Exemples ($\cdots > v_{xx} > u_{xx} > v_x > u_x > v > u$)

- x^2, $u_x u$, $v_x u$, $u_{xx} v$ sont intégrables
- u, u_x^2, $u_x v$ ne sont pas intégrables

Application à la mise sous forme intégrale

L'EDO paramétrique suivante provient d'un calcul

$$\begin{aligned}\ddot{y}\,y^2 + 2\,\ddot{y}\,y + \ddot{y} + \dot{y}\,y^2\,k_{12} + \dot{y}\,y^2\,k_{21} + 2\,\dot{y}\,y\,k_{12} + 2\,\dot{y}\,y\,k_{21} + {} \\ \dot{y}\,k_{12} + \dot{y}\,k_{21} + \dot{y}\,V_e - \dot{u}\,y^2 - 2\,\dot{u}\,y - \dot{u} - y^2\,u\,k_{21} + {} \\ y^2\,k_{21}\,V_e - 2\,y\,u\,k_{21} + y\,k_{21}\,V_e - u\,k_{21} \quad &= \quad 0\,.\end{aligned}$$

L'algorithme integrate la reformule en

$$\begin{aligned}-\theta_1\,\boxed{\mathrm{u(t)}} + \theta_2\,\boxed{\frac{y(t)}{y(t)+1}} + \theta_3\,\boxed{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{y(t)^2}{y(t)+1}\right)} \\ -\,\theta_4\,\boxed{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{1}{y(t)+1}\right)} \quad &= \quad \boxed{\dot{u}(t) - \ddot{y}(t)}\,,\end{aligned}$$

où les θ_i désignent les *blocs de paramètres* :

$$\theta_1 = \boxed{k_{21}}\,, \quad \theta_2 = \boxed{k_{21}\,V_e}\,, \quad \theta_3 = \boxed{k_{12} + k_{21}}\,, \quad \theta_4 = \boxed{k_{12} + k_{21} + V_e}\,.$$

Application à la mise sous forme intégrale

L'EDO paramétrique suivante provient d'un calcul

$$\begin{aligned}\ddot{y}\,y^2 + 2\,\ddot{y}\,y + \ddot{y} + \dot{y}\,y^2\,k_{12} + \dot{y}\,y^2\,k_{21} + 2\,\dot{y}\,y\,k_{12} + 2\,\dot{y}\,y\,k_{21} +& \\ \dot{y}\,k_{12} + \dot{y}\,k_{21} + \dot{y}\,V_e - \dot{u}\,y^2 - 2\,\dot{u}\,y - \dot{u} - y^2\,u\,k_{21} +& \\ y^2\,k_{21}\,V_e - 2\,y\,u\,k_{21} + y\,k_{21}\,V_e - u\,k_{21} &= 0\,.\end{aligned}$$

Puis, en intégrant deux fois

$$-\theta_1 \int_{t_0}^{t} (t-\tau)\,u(\tau)\,\mathrm{d}\tau + \theta_2 \int_{t_0}^{t} (t-\tau)\,\frac{y(\tau)}{y(\tau)+1}\,\mathrm{d}\tau$$

$$+\,\theta_3 \int_{t_0}^{t} \frac{y^2(\tau)}{y(\tau)+1}\,\mathrm{d}\tau - \theta_4 \int_{t_0}^{t} \frac{1}{y(\tau)+1}\,\mathrm{d}\tau$$

$$= \int_{t_0}^{t} u(\tau)\,\mathrm{d}\tau - u(t_0)\,(t-t_0) - y(t) + \dot{y}(t_0)\,(t-t_0) + y(t_0)$$

Application à la mise sous forme intégrale

L'EDO paramétrique suivante provient d'un calcul

$$\begin{aligned}\ddot{y}\,y^2 + 2\,\ddot{y}\,y + \ddot{y} + \dot{y}\,y^2\,k_{12} + \dot{y}\,y^2\,k_{21} + 2\,\dot{y}\,y\,k_{12} + 2\,\dot{y}\,y\,k_{21} + {} \\ \dot{y}\,k_{12} + \dot{y}\,k_{21} + \dot{y}\,V_e - \dot{u}\,y^2 - 2\,\dot{u}\,y - \dot{u} - y^2\,u\,k_{21} + {} \\ y^2\,k_{21}\,V_e - 2\,y\,u\,k_{21} + y\,k_{21}\,V_e - u\,k_{21} \quad = \quad 0\,.\end{aligned}$$

- L'algorithme integrate a été efficace parce qu'on l'a appliqué sur une fraction différentielle.
- La généralisation aux fractions de la notion de monôme non intégrable n'est pas simple.
- Les codes numériques obtenus à partir de la forme intégrale sont intéressants : 1) meilleure prise en compte des entrées constantes par morceaux ; 2) meilleur comportement en présence de bruit.

Idéal d'un Anneau

$$45 = 3^2 \times 5 \qquad \text{vs} \qquad (45) = (3)^2 \cap (5)$$

Dans $\mathbb{Z}$, tout idéal est une (unique) intersection de puissances d'idéaux premiers.

- l'idéal (p) est l'ensemble des multiples de p.
- L'idéal (p_1, p_2) est l'ensemble des $a_1\, p_1 + a_2\, p_2$ où les a_i sont des éléments de l'anneau.

Idéal d'un Anneau

$$\left\{ \begin{array}{r} x - y = 0 \\ x^2 + y^2 = 4 \end{array} \right. \qquad (x-y,\ x^2+y^2-4) = (x-2,\ y-2) \cap (x+2,\ y+2)$$

Au système d'équations on associe un idéal de $\mathbb{Q}[x, y]$ qui est l'intersection de deux idéaux premiers. Ces idéaux premiers correspondent aux composantes irréductibles de la variété algébrique du système.

Idée

Décrire les solutions d'un système est difficile. Décrire l'idéal engendré par le système est algorithmique (calcul formel).

- Bases de Gröbner,
- Chaînes régulières (ensembles caractéristiques).

Idéal différentiel engendré

Solutions $y(t) = (t + c)^2$ et $y(t) = 0$.

$$\dot{y}^2 - 4\,y = 0 \qquad \begin{array}{rcl} [\dot{y}^2 - 4\,y] & = & [\dot{y}^2 - 4\,y,\, (\ddot{y} - 2)^2] \cap [y] \\ \{\dot{y}^2 - 4\,y\} & = & \{\dot{y}^2 - 4\,y,\, \ddot{y} - 2\} \cap \{y\} \end{array}$$

- L'idéal différentiel $[p]$ est l'idéal $(p, \dot{p}, \ddot{p}, \ldots)$ engendré par p et toutes ses dérivées.
- L'idéal différentiel (parfait) $\{p\}$ est l'ensemble des polynômes différentiels dont une puissance appartient à $[p]$.

Idéal différentiel engendré

Solutions $y(t) = (t+c)^2$ et $y(t) = 0$.

$$\dot{y}^2 - 4\,y = 0 \qquad \begin{array}{rcl} [\dot{y}^2 - 4\,y] & = & [\dot{y}^2 - 4\,y,\, (\ddot{y}-2)^2] \cap [y] \\ \{\dot{y}^2 - 4\,y\} & = & \{\dot{y}^2 - 4\,y,\, \ddot{y}-2\} \cap \{y\} \end{array}$$

À l'EDO on associe un idéal différentiel parfait de $\mathbb{Q}\{y\}$ qui est une intersection d'idéaux différentiels premiers. Ces idéaux différentiels premiers correspondent aux composantes irréductibles de la variété algébrique différentielle.

Idée

Le problème de l'appartenance à un idéal différentiel est indécidable. Le problème de l'appartenance à un idéal différentiel parfait est algorithmique (chaînes régulières différentielles).

Idéal différentiel défini par une chaîne différentielle régulière

Les solutions de l'EDO $p = 0$ suivante correspondent à $\{p\}$.

$$\dot{y}^2 \quad = \quad 4\,y\,(u - y)^2\,.$$

Cette équation est aussi une chaîne différentielle régulière pour tout classement qui assure que $\dot{y}$ est la dérivée dominante. Elle s'interprète alors comme un ensemble de règles de réécriture

$$\begin{array}{rcl} \dot{y}^2 & \rightarrow & 4\,y\,(u - y)^2\,, \\ & \vdots & \end{array}$$

Idéal différentiel défini par une chaîne différentielle régulière

Les solutions de l'EDO $p = 0$ suivante correspondent à $\{p\}$.

$$\dot{y}^2 \quad = \quad 4\,y\,(u - y)^2\,.$$

Cette équation est aussi une chaîne différentielle régulière pour tout classement qui assure que $\dot{y}$ est la dérivée dominante. Elle s'interprète alors comme un ensemble de règles de réécriture

$$\begin{aligned}
\dot{y}^2 \quad &\rightarrow \quad 4\,y\,(u - y)^2\,, \\
\underbrace{2\,\dot{y}}_{s_p}\;\ddot{y} \quad &= \quad 4\,\dot{y}\,(u - y)^2 + 8\,y\,(\dot{u} - \dot{y})\,(u - y)\,, \\
&\vdots
\end{aligned}$$

Idéal différentiel défini par une chaîne différentielle régulière

Les solutions de l'EDO $p = 0$ suivante correspondent à $\{p\}$.

$$\dot{y}^2 = 4\,y\,(u - y)^2\,.$$

$$\begin{aligned} \dot{y}^2 &\rightarrow 4\,y\,(u - y)^2\,, \\ \ddot{y} &\rightarrow \frac{4\,\dot{y}\,(u - y)^2 + 8\,y\,(\dot{u} - \dot{y})\,(u - y)}{2\,\dot{y}}. \end{aligned}$$

Idéal différentiel défini par une chaîne différentielle régulière

Les solutions de l'EDO $p = 0$ suivante correspondent à $\{p\}$.

$$\dot{y}^2 = 4\,y\,(u-y)^2\,.$$

$$\begin{aligned} \dot{y}^2 &\rightarrow 4\,y\,(u-y)^2\,,\\ \ddot{y} &\rightarrow \frac{4\,\dot{y}\,(u-y)^2 + 8\,y\,(\dot{u}-\dot{y})\,(u-y)}{2\,\dot{y}}. \end{aligned}$$

La division par le séparant a une traduction en termes algébriques. L'idéal différentiel défini par p en tant que chaîne différentielle régulière est $[p]:{s_p}^\infty$. Sur l'exemple, la saturation a un effet car

$$\ddot{y} - \frac{\dot{u}\,\dot{y}}{u-y} - 2\,(u-y)\,(u-3\,y) \quad \in [p]:{s_p}^\infty\,, \qquad \notin \{p\}\,.$$

On peut montrer que $\{p\} = [p]:{s_p}^\infty \cap [y]$.

Problèmes algorithmiques en algèbre différentielle

Côté négatif

Jan Denef, Leonard Lipshitz.
Power Series Solutions of Algebraic Differential Equations.
Mathematische Annalen, 1984

Ualbai Umirbaev.
Algorithmic problems for differential algebras.
Journal of Algebra vol. 455, 2016

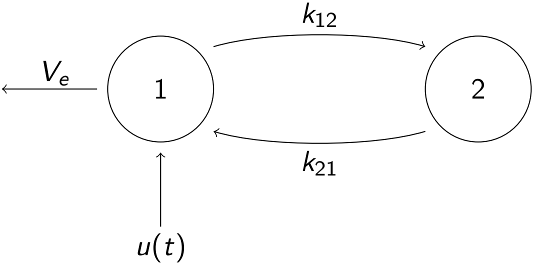
Côté positif

Abraham Seidenberg.
An elimination theory for differential algebra.
U. Calif. Publ. Math. vol. 3, 1956

François Boulier, Daniel Lazard, François Ollivier, Michel Petitot.
Representation for the radical of a finitely generated differential ideal
In proceedings ISSAC 1995

François Boulier, François Lemaire, Adrien Poteaux, Marc Moreno Maza.
An Equivalence Theorem for Regular Differential Chains.
À paraître au Journal of Symb. Comp. 2018

Un modèle à deux compartiments



Un modèle mathématique possible :

$$\begin{aligned}
\dot{x}_1(t) &= -k_{12}\,x_1(t) + k_{21}\,x_2(t) - \frac{V_e\,x_1(t)}{1 + x_1(t)} + u(t)\,, \\
\dot{x}_2(t) &= k_{12}\,x_1(t) - k_{21}\,x_2(t)\,, \qquad (1) \\
y(t) &= x_1(t)\,.
\end{aligned}$$

Le problème à résoudre

$$\begin{aligned}
\dot{x}_1(t) &= -k_{12}\,x_1(t) + k_{21}\,x_2(t) - \frac{V_e\,x_1(t)}{1+x_1(t)} + u(t)\,,\\
\dot{x}_2(t) &= k_{12}\,x_1(t) - k_{21}\,x_2(t)\,,\\
y(t) &= x_1(t)\,.
\end{aligned}$$

Fixons : des valeurs pour les paramètres k_{12}, k_{21} et V_e,
des conditions initiales pour $y(0) = x_1(0)$ et $x_2(0)$,
une fonction pour l'entrée $u(t)$.

Intégrons le système pour obtenir une sortie $y(t)$.

Pb. À partir des courbes $u(t)$ et $y(t)$, retrouver les valeurs des paramètres k_{12}, k_{21} et V_e ?

Équation Entrée-Sortie (forme brute)

Par élimination différentielle, on peut calculer une équation entrée-sortie : une équation différentielle non linéaire, conséquence du modèle mathématique, où ne figurent que l'entrée, la sortie, certaines de leurs dérivées et les paramètres à estimer.

$$\begin{aligned}\ddot{y}\,y^2 + 2\,\ddot{y}\,y + \ddot{y} + \dot{y}\,y^2\,k_{12} + \dot{y}\,y^2\,k_{21} + 2\,\dot{y}\,y\,k_{12} + 2\,\dot{y}\,y\,k_{21} + {}&\\ \dot{y}\,k_{12} + \dot{y}\,k_{21} + \dot{y}\,V_e - \dot{u}\,y^2 - 2\,\dot{u}\,y - \dot{u} - y^2\,u\,k_{21} + {}&\\ y^2\,k_{21}\,V_e - 2\,y\,u\,k_{21} + y\,k_{21}\,V_e - u\,k_{21} &= 0\,.\end{aligned}$$

Cette équation est définie comme

$$\{\text{éqs. du modèle}\} \quad \cap \quad \underbrace{\mathbb{Q}[V_e, k_{12}, k_{21}]\{y, u\}}_{\text{spécifié par un classement}} \quad .$$

La méthode de l'idéal entrée-sortie

L. Ljung, S. T. Glad
On global identifiability for arbitrary model parametrisations.
Automatica vol. 30, 1994

Lilianne Denis–Vidal, Ghislaine Joly–Blanchard, Céline Noiret
System identifiability (symbolic computation) and parameter estimation (numerical computation)
Numerical Algorithms vol. 34, 2003

Djamila Moulay, Nathalie Verdière, Lilianne Denis–Vidal Identifiability of parameters in an epidemiologic model modeling the transmission of the Chikungunya
In proceedings MOSIM 2012

QSSA pour systèmes de réactions chimiques

La forme standard du théorème de Tikhonov

En supposant ε petit, approximer

$$\dot{x} = f(x, y, \varepsilon), \quad \varepsilon\, \dot{y} = g(x, y, \varepsilon)$$

par

$$\dot{x} = f(x, y, 0), \quad 0 = g(x, y, 0).$$

- Il n'existe pas d'algorithme connu pour mettre un système sous forme standard. Les variables lentes et rapides s'obtiennent souvent après changement de coordonnées.
- Pour les systèmes de réactions chimiques, la transformation est algorithmique si on connaît les réactions lentes et rapides. Il suffit de simplifier une DAE par élimination différentielle.

La réduction de Michaelis-Menten revisitée

Le système initial

$$E + S \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} C \xrightarrow{k_3} E + P$$

Modèle différentiel par application de la loi d'action de masse

$$\begin{aligned}
\dot{E} &= k_3\,C - k_1\,E\,S + k_2\,C\,,\\
\dot{S} &= -k_1\,E\,S + k_2\,C\,,\\
\dot{C} &= -k_3\,C + k_1\,E\,S - k_2\,C\,,\\
\dot{P} &= k_3\,C\,.
\end{aligned}$$

L'approximation en supposant $k_1,\, k_2 \gg k_3$

$$\dot{S} = -\frac{V_{\max}\,S}{K + S}$$

$V_{\max}$ des K sont des paramètres.

La réduction de Michaelis-Menten revisitée

$$E + S \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} C \xrightarrow{k_3} E + P$$

Les contributions de la réaction rapide sont en rouge.

$$\begin{aligned}
\dot{E} &= k_3\, C - (k_1\, E\, S - k_2\, C)\,,\\
\dot{S} &= -(k_1\, E\, S - k_2\, C)\,,\\
\dot{C} &= -k_3\, C + k_1\, E\, S - k_2\, C\,,\\
\dot{P} &= k_3\, C\,.
\end{aligned}$$

La réduction de Michaelis-Menten revisitée

$$E + S \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} C \xrightarrow{k_3} E + P$$

- La conservation du flot est modélisée en remplaçant la contribution de la réaction rapide par une nouvelle variable F_1

$$\begin{aligned} \dot{E} &= k_3\, C - F_1\,, \\ \dot{S} &= -F_1\,, \\ \dot{C} &= -k_3\, C + F_1\,, \\ \dot{P} &= k_3\, C\,. \end{aligned}$$

La réduction de Michaelis-Menten revisitée

$$E + S \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} C \xrightarrow{k_3} E + P$$

- La conservation du flot est modélisée via F_1
- On s'intéresse à la dynamique du système sur la variété algébrique définie par la relation d'équilibre (DAE).

$$\begin{aligned}
\dot{E} &= k_3\, C - F_1 \,, \\
\dot{S} &= -F_1 \,, \\
\dot{C} &= -k_3\, C + F_1 \,, \\
\dot{P} &= k_3\, C \,, \\
0 &= k_1\, E\, S - k_2\, C \,.
\end{aligned}$$

La réduction de Michaelis-Menten revisitée

$$E + S \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} C \xrightarrow{k_3} E + P$$

- La conservation du flot est modélisée via F_1
- On s'intéresse à la dynamique du système sur la variété algébrique définie par la relation d'équilibre (DAE).

$$\begin{aligned} \dot{E} &= k_3\,C - F_1\,, \\ \dot{S} &= -F_1\,, \\ \dot{C} &= -k_3\,C + F_1\,, \\ \dot{P} &= k_3\,C\,, \\ 0 &= k_1\,E\,S - k_2\,C\,. \end{aligned}$$

- Formule brute obtenue par élimination de F_1

$$\dot{S} = -\frac{k_1^2\,k_3\,E\,S^2 + k_1\,k_2\,k_3\,E\,S}{k_1\,k_2\,(E+S) + k_2^2}.$$

Bibliographie

P. Kokotovic, H. K. Khalil, J. O'Reilly.
Singular Perturbation Methods in Control : Analysis and Design.
SIAM (1999).

V. Van Breusegem, G. Bastin.
Reduced order dynamical modelling of reaction systems : a singular perturbation approach
30th IEEE Conf. on Decision and Control. (1991).

François Boulier, Marc Lefranc, François Lemaire, Pierre-Emmanuel Morant.
Model Reduction of Chemical Reaction Systems using Elimination
Mathematics in Computer Science vol. 5, 2011

Perspectives

- Des méthodes qui s'appliquent à des modèles pas trop gros.
- Importance des études théoriques motivées par des applications.

- Question théorique : mettre au point une théorie algorithmique de l'élimination pour équations intégro-différentielles.
- Motivations pour les modèles intégro-différentiels : meilleures prise en compte des entrées constantes par morceaux et résistance au bruit.
- Application à la modélisation du couple neurone-astrocyte en situation ischémique (collab. avec une équipe de modélisatrices et une équipe INSERM).