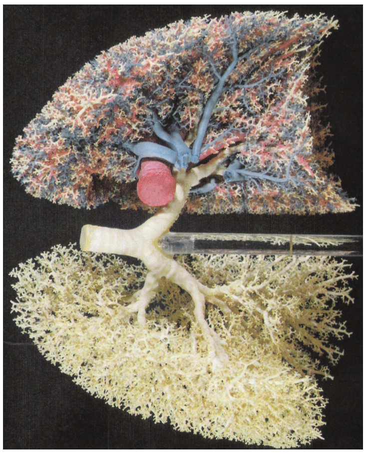
Graphes et réseaux en Sciences du Vivant

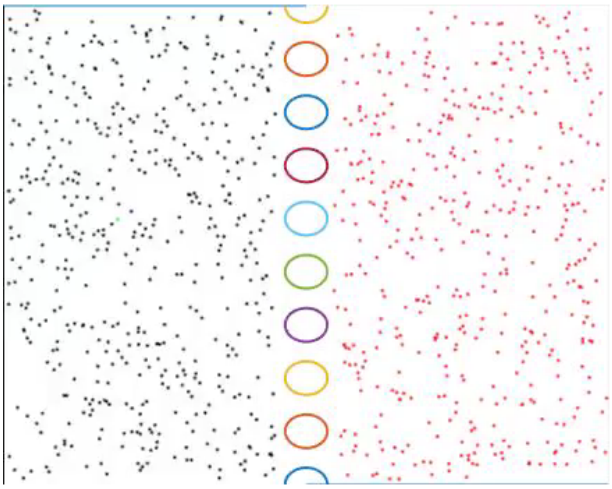
B. Maury
Laboratoire de Mathématiques d'Orsay
& DMA, Ecole Normale Supérieure

Graphes et réseaux en Sciences du Vivant

B. Maury
Laboratoire de Mathématiques d'Orsay
& DMA, Ecole Normale Supérieure



« Bon » Laplacien : loi phénoménologique monotone + ….



Continu

Fick

$$J = -D\nabla\rho$$

Ohm locale

$$J = -\sigma\nabla V$$

Darcy

$$u = -k\nabla p$$

Elasticité linéaire

$$-\sigma = -\mu(\nabla u + \nabla^T u) - \lambda\nabla\cdot u\, Id$$

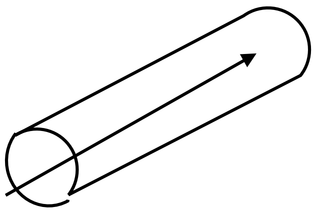
Discret

Diffusion entre compartiments

$$Q_{1\to 2} = -D(C_2 - C_1)$$

Ohm

$$U = RI \qquad I = -\frac{1}{R}(U_1 - U_1)$$



Poiseuille

$$Q = -\frac{1}{R}(P_2 - P_1)$$

Ressort linéaire

$$f = -k(x - x_0)$$

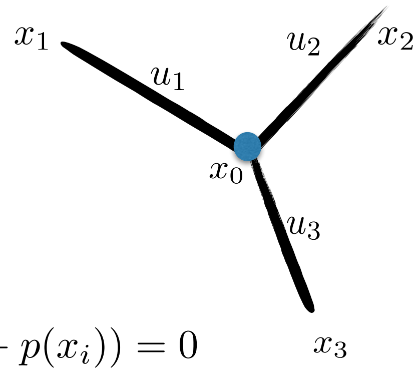
…. + principe de conservation

Continu (Darcy)

$$\int_{\partial\omega} u \cdot n = 0 \Longrightarrow \nabla \cdot u = 0$$

$$-\nabla \cdot k \nabla p = -k \Delta p = 0$$

Discret (Poiseuille)



$$\sum u_i = 0$$

$$\sum c_i (p(x_0) - p(x_i)) = 0$$

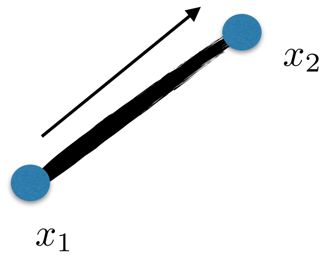
Principe fondamental

Loi phénoménologique

Principe du maximum :

$$p(x_0) = \frac{\sum c_i p(x_i)}{\sum c_i}$$

Principe du maximum très robuste :

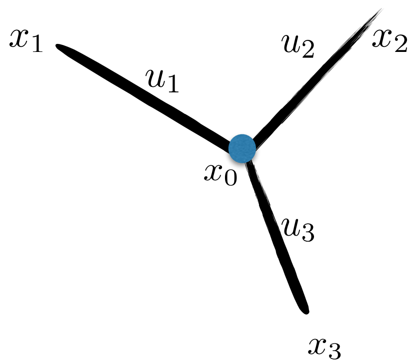


Pour toute loi phénoménologique monotone, i.e.

$$u(x_1, x_2) = \varphi(p(x_1), p(x_2)) \quad \text{avec} \quad \mathrm{sign}\varphi(p_1, p_2) = \mathrm{sign}(p_1 - p_2)$$

on a

$$\sum \varphi(p(x_0), p(x_i)) = 0 \Longrightarrow p(x_0) \in \mathrm{conv}(p(x_i))$$



Cadre abstrait

Réseau $\mathcal{N} = (V, E, r, o, \Gamma)$

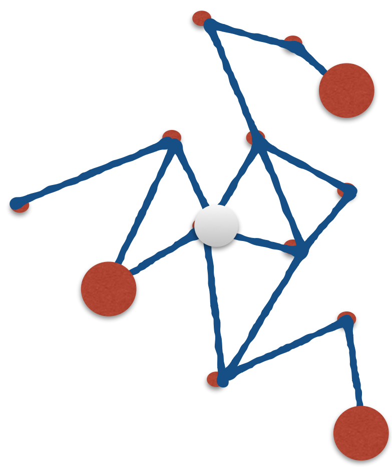
Sommets V

Arêtes E

Résistances r

Racine o

Frontière Γ



Cadre abstrait

Loi de Kirchhof $\quad -\sum_{y\sim x} u(x,y) = du(x) = 0$

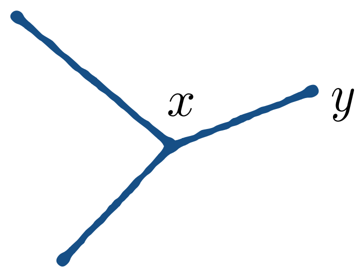
Loi de Poiseuille / Ohm $\quad p(x)-p(y) = d^\star(x,y) = r(x,y)u(x,y)$

Analogie avec le problème de Darcy

$$\begin{cases} u + \frac{1}{r} d^\star p & = & 0 \quad \text{in } \; E \\ du & = & 0 \quad \text{in } \; \mathring{V} = V \setminus (\{o\} \cup \Gamma) \end{cases} \qquad \begin{cases} \mathbf{u} + k\nabla \mathrm{p} & = & 0 \\ -\nabla\cdot\mathbf{u} & = & 0 \end{cases}$$

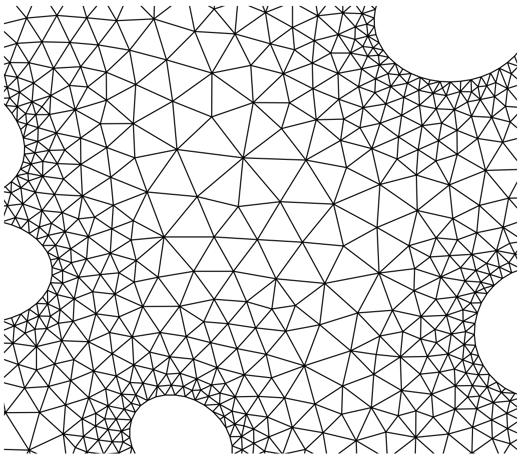
On élimine la vitesse : problème de Dirichlet

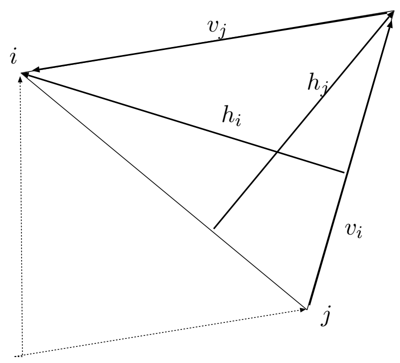
$$\begin{cases} -\Delta p(x) & = & 0 \quad \forall x \in \mathring{V}\,, \\ p(o) & = & 0 \\ p(x) & = & g(x) \quad \forall x \in \Gamma \end{cases}$$



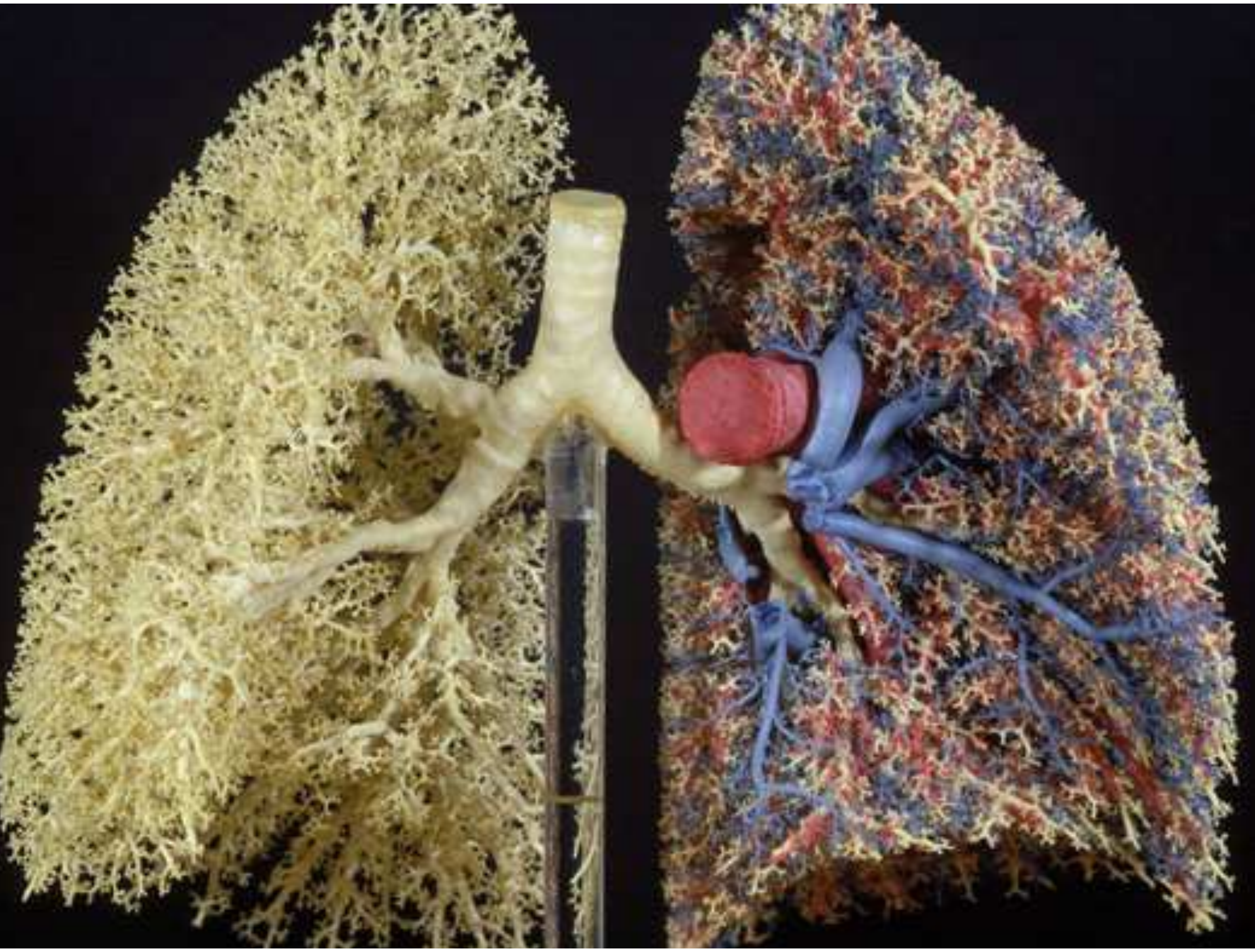
avec $\quad -\Delta p(x) = dcd^\star p(x) = \sum_{y\sim x} c(x,y)(p(x)-p(y))$

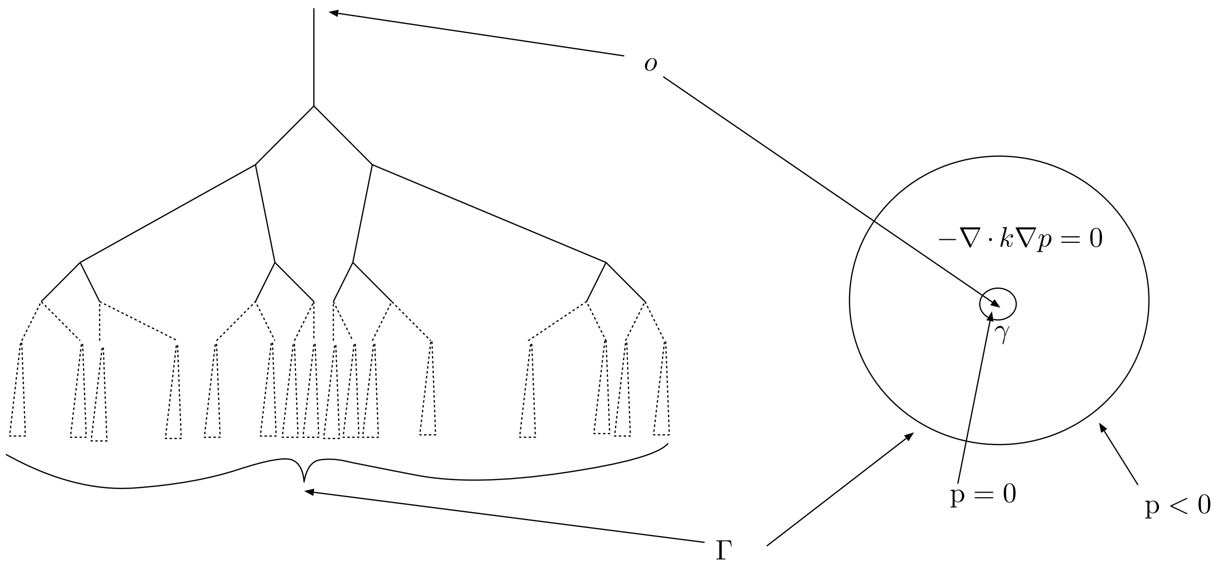
Remarque (pour numériciens) : le laplacien discrétisé par éléments finis peut être vu comme exprimant un réseau résistif, si tous les angles sont **aigus**





$$\int_K \nabla w_i \cdot \nabla w_j = \mathrm{aire}(K)\, h_i \cdot h_j \frac{1}{|h_i|^2\,|h_j|^2} = \frac{D}{2}\frac{v_i \cdot v_j}{|v_i|\,|v_j|}|h_i|\,|h_j|\frac{1}{|h_i|^2\,|h_j|^2} = \frac{v_i \cdot v_j}{2D} \qquad D = v_i \wedge v_j$$





o
$-\nabla \cdot k\nabla p = 0$
γ
p = 0
p < 0
Γ

La théorie autour du problème de Poisson est essentiellement transposable dans le cas discret (Doyle & Snell, 84), avec quelques différences

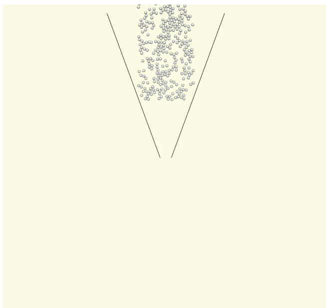
La notion de **régularité** n'a pas de sens (au moins pour un réseau fini)

Interprétation probabiliste (mouvement brownien remplacé par **marche aléatoire**, avec probabilités de transition inversement proportionnelles aux résistances)

L'interprétation de l'équation de la chaleur comme flot gradient de l'entropie dans l'espace de Wasserstein est transposable :
flot gradient de l'**entropie** relative par rapport à la mesure stationnaire pour une certaine métrique de type **Wassertein** (J. Maas 2011)

Pour les réseaux infinis (la frontière, ou espaces des bouts, est alors l'ensemble des chemins vers l'infini quotienté par la relation d'équivalence d'être confondus au delà d'un certain rang), on ne peut pas définir la **trace** comme extension de la notion de restriction de fonctions régulières définies au-delà de la frontière : on doit procéder de l'intérieur

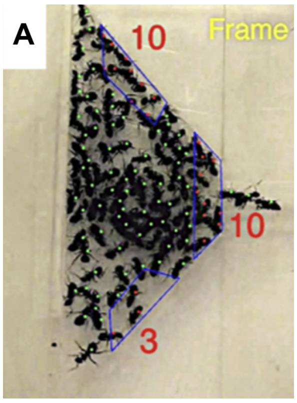
Autre contexte : transport congestionné



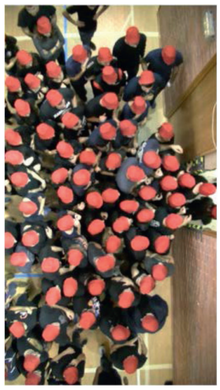
A. Lefebvre & S. faure

S. Rafai & P. Peyla (Liphy)

Zuriguel et al. 16’



Parisi et al. 15’



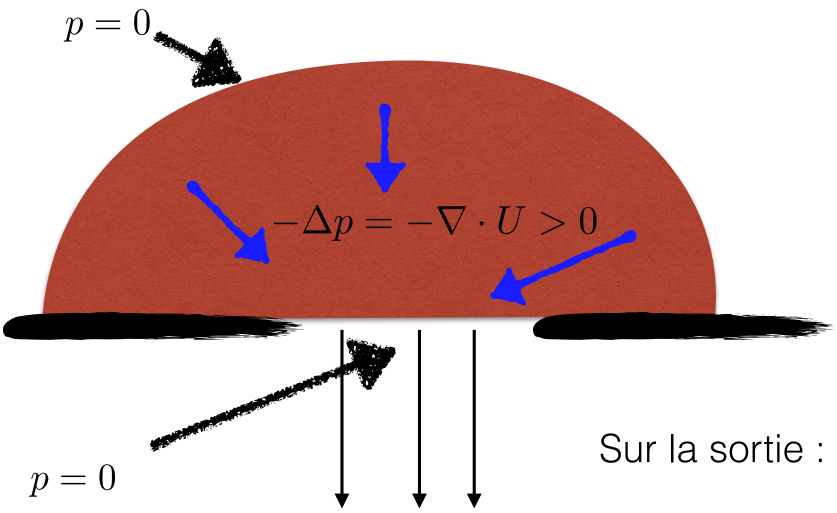
Garcimartin et al. 14’

Transport congestionné macro
(avec A. Roudneff-Chupin et F. Santambrogio)

U : vitesse spontanée

Contrainte : $\nabla \cdot u \geq 0$ sur la zone saturée

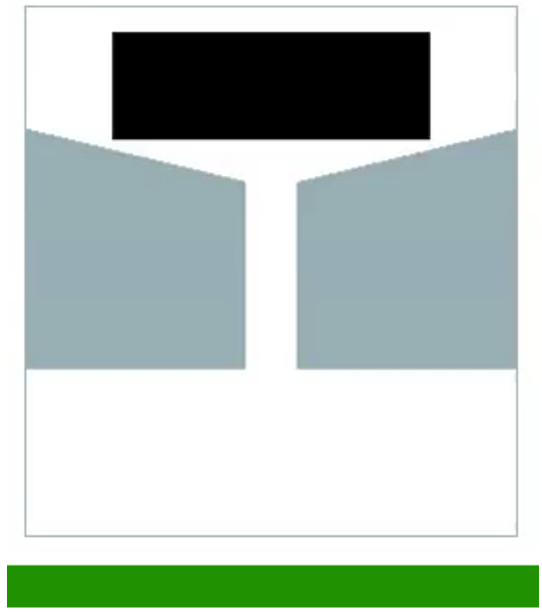
u : vitesse effective, la plus proche de U parmi les vitesses admissibles



$$\left|\begin{array}{lcl} u + \nabla p & = & U \\ -\nabla \cdot u & \leq & 0 \\ p & \geq & 0 \\ \displaystyle\int_\omega u \cdot \nabla p & = & 0, \end{array}\right.$$

Sur la sortie : $u \cdot n = U \cdot n - \dfrac{\partial p}{\partial n} \geq U \cdot n$

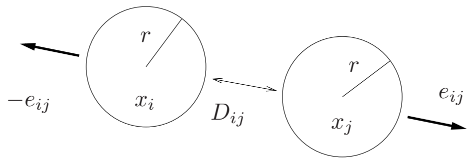
Les gens sortent plus vite que s'ils étaient seuls …



Calculs : A. Roudneff-Chupin & J. Dambrine

Transport congestionné micro
(avec J. Venel)

$U = (U_1, \ldots, U_N)$ vitesses spontanées



Contrainte : $G_{ij} \cdot u \geq 0$ quand i et j sont en contact

$$G_{ij} = \nabla D_{ij}(x) = (0, \ldots, 0, -e_{ij}, 0, \ldots, 0, e_{ij}, 0, \ldots, 0) \in \mathbb{R}^{2N}$$

$$\left| \begin{array}{rcl} u - \sum_{i \sim j} p_{ij}\, G_{ij} & = & U, \\ -G_{ij} \cdot u & \leq & 0 \quad \forall i \sim j, \\ & p \geq 0, & \\ G_{ij} \cdot u > 0 \Longrightarrow p_{ij} = 0. & & \end{array} \right.$$

$$\left| \begin{array}{lcl} u + B^\star p & = & U, \\ Bu & \leq & 0, \\ p & \geq & 0, \\ p \cdot Bu & = & 0. \end{array} \right.$$

Rappel du macro :

$$\left| \begin{array}{rcl} u + \nabla p & = & U \\ -\nabla \cdot u & \leq & 0 \\ p & \geq & 0 \\ \int_\omega u \cdot \nabla p & = & 0, \end{array} \right.$$

Problème de Poisson discret

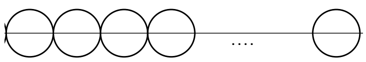
Discret

$$BB^{\star}u = BU$$

Continu

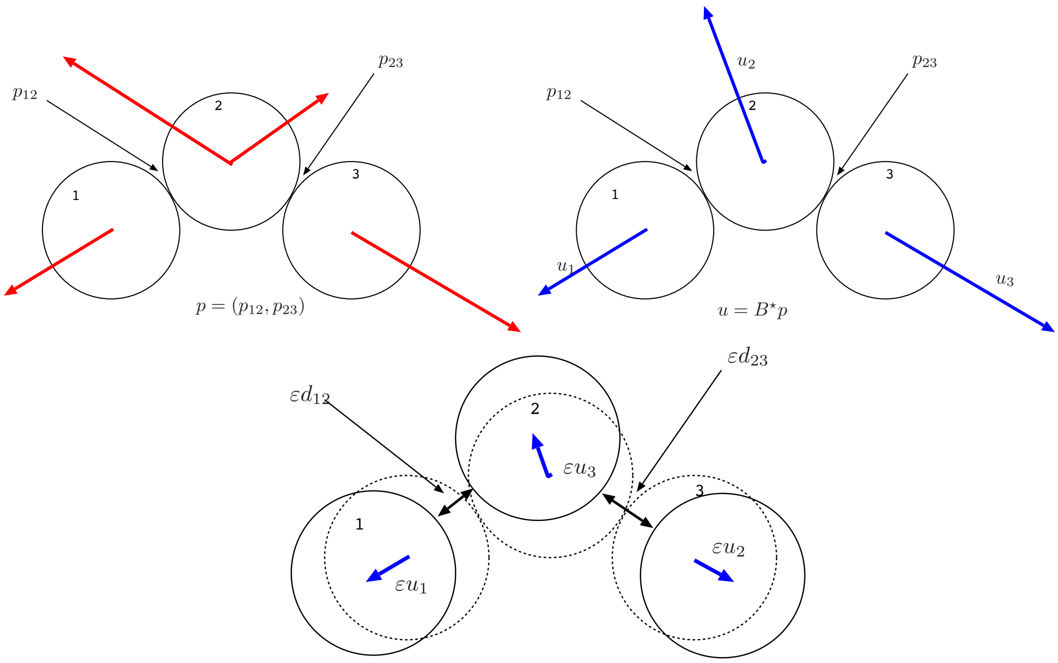
$$-\Delta p = -\nabla \cdot U > 0$$

En dim 1 :

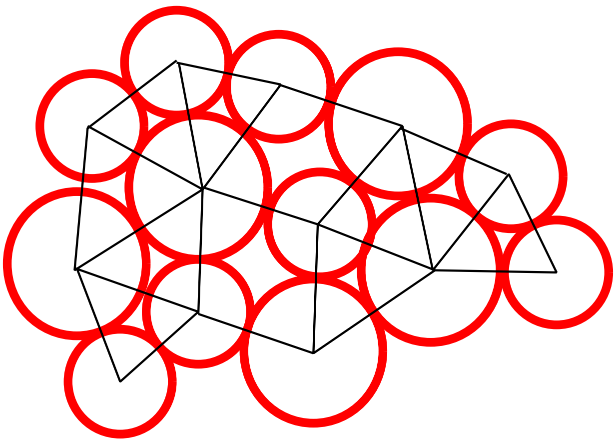


$$B = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 1 & -1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 1 & -1 \end{pmatrix} \qquad BB^{\star} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdot & \cdot \\ 0 & -1 & \cdot & \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & & & \cdot & 2 & -1 \\ 0 & \cdot & \cdot & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

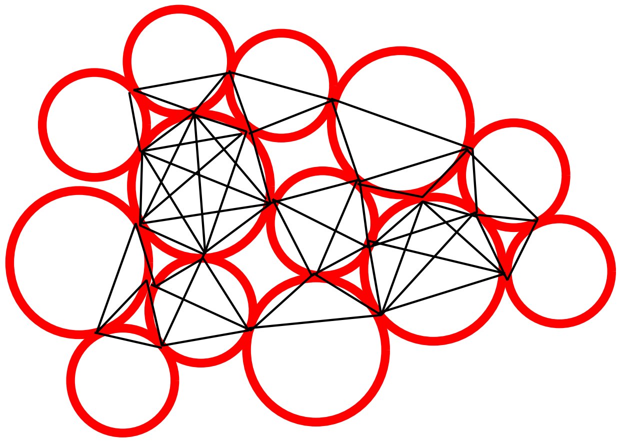
En dimension supérieure …



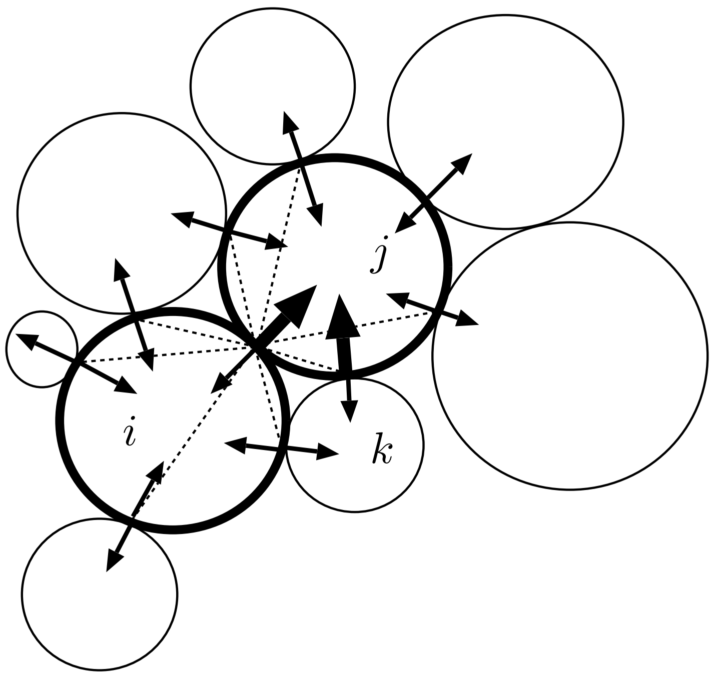
p_{12}
p_{23}
1
2
3
$p = (p_{12}, p_{23})$
u_2
u_1
u_3
$u = B^{\star}p$
εd_{12}
εd_{23}
εu_3
εu_2
εu_1



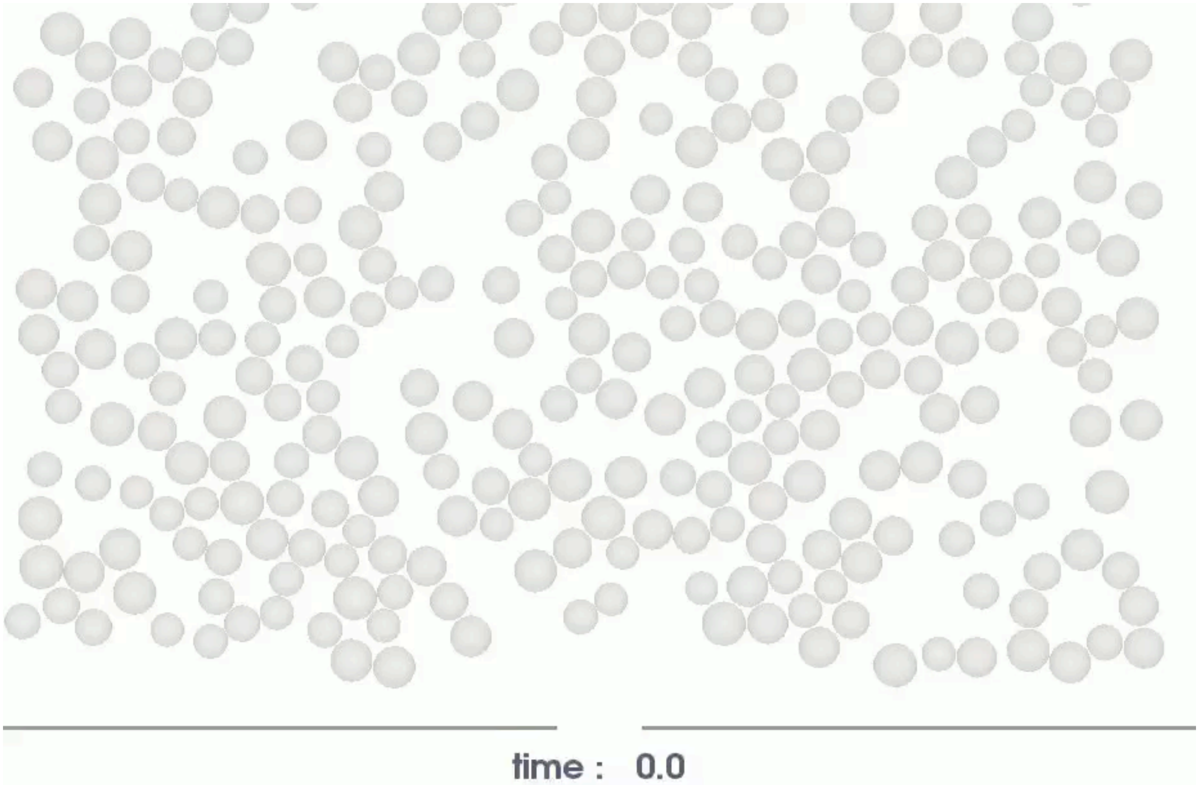
Graphe primal



Graphe dual



La matrice n’est pas à diagonale dominante,
en outre certains éléments extra diagonaux sont **positifs**



Calculs : S. Faure

Conséquence concrète : effet faster is slower