

Influence des conditions de bord dans les réseaux d'automates booléens à seuil et application à la biologie

Sylvain Sené

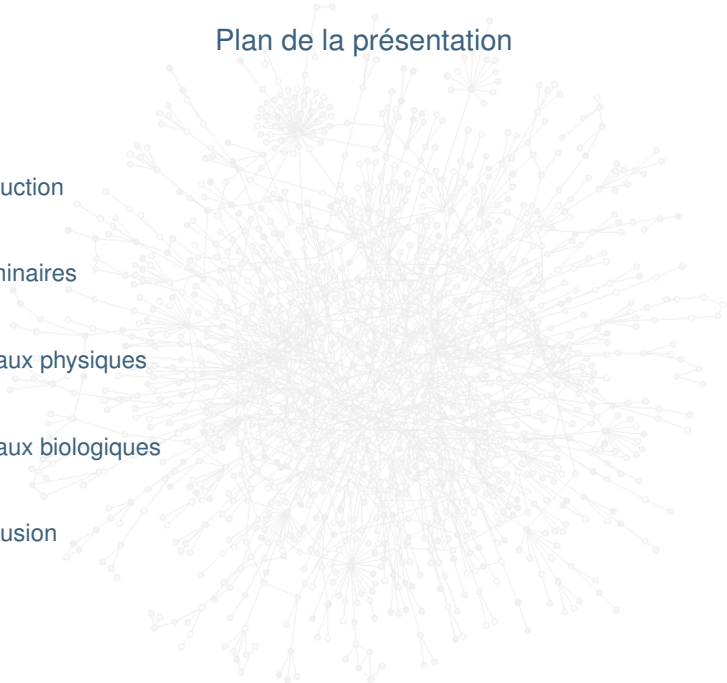
Directeurs de thèse
Jacques Demongeot et Michel Morvan

15 octobre 2008



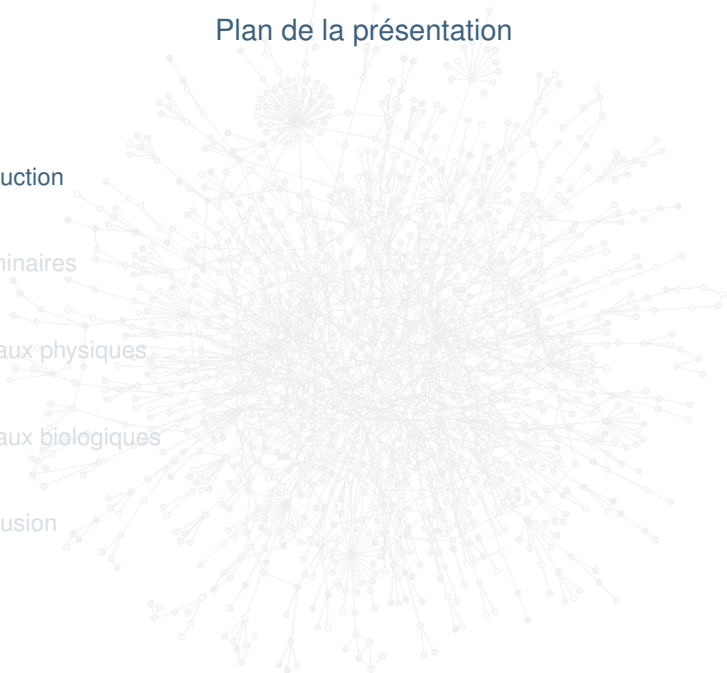
Plan de la présentation

- 1 Introduction
- 2 Préliminaires
- 3 Réseaux physiques
- 4 Réseaux biologiques
- 5 Conclusion

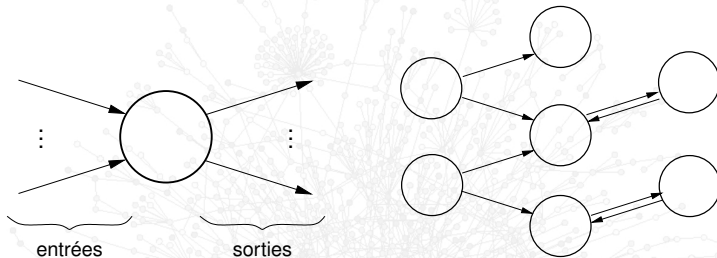


Plan de la présentation

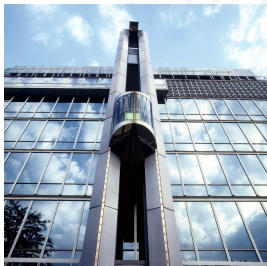
- 1 Introduction
- 2 Préliminaires
- 3 Réseaux physiques
- 4 Réseaux biologiques
- 5 Conclusion



Automates et réseaux d'automates



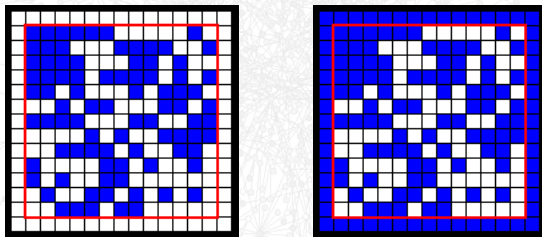
Quelques exemples d'automates dans la vie quotidienne



Bords dans les automates cellulaires

Automates en interaction placés sur une grille régulière mettant à jour leur état au cours du temps en fonction d'une règle commune

Exemple
L'automate cellulaire 2D "MAJORITÉ"

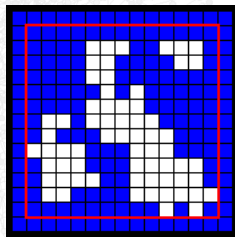
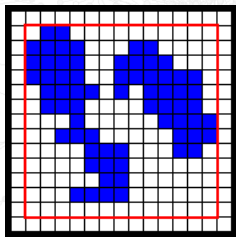


$t = 0$

Bords dans les automates cellulaires

Automates en interaction placés sur une grille régulière mettant à jour leur état au cours du temps en fonction d'une règle commune

Exemple
L'automate cellulaire 2D "MAJORITÉ"

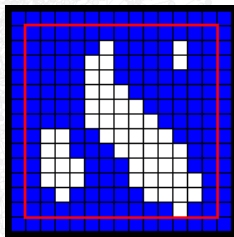
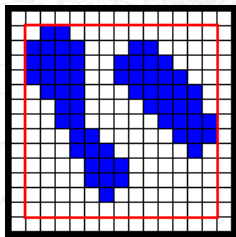


$t = 1$

Bords dans les automates cellulaires

Automates en interaction placés sur une grille régulière mettant à jour leur état au cours du temps en fonction d'une règle commune

Exemple
L'automate cellulaire 2D "MAJORITÉ"

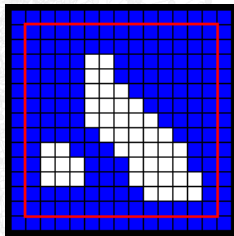
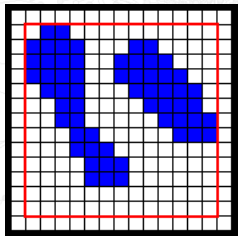


$t = 2$

Bords dans les automates cellulaires

Automates en interaction placés sur une grille régulière mettant à jour leur état au cours du temps en fonction d'une règle commune

Exemple
L'automate cellulaire 2D "MAJORITÉ"

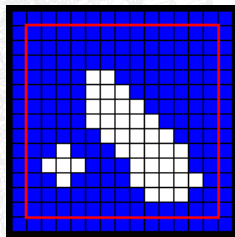
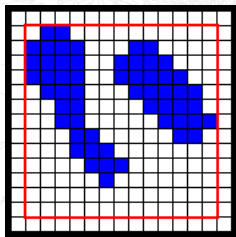


$t = 3$

Bords dans les automates cellulaires

Automates en interaction placés sur une grille régulière mettant à jour leur état au cours du temps en fonction d'une règle commune

Exemple
L'automate cellulaire 2D "MAJORITÉ"

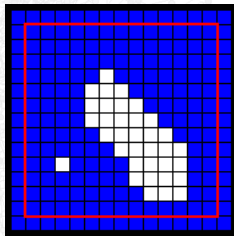
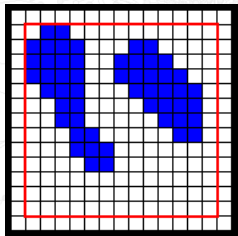


$t = 4$

Bords dans les automates cellulaires

Automates en interaction placés sur une grille régulière mettant à jour leur état au cours du temps en fonction d'une règle commune

Exemple
L'automate cellulaire 2D "MAJORITÉ"

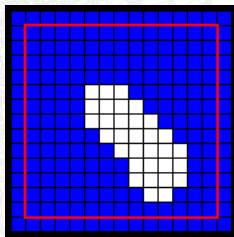
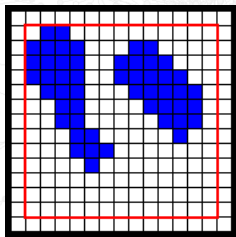


$t = 5$

Bords dans les automates cellulaires

Automates en interaction placés sur une grille régulière mettant à jour leur état au cours du temps en fonction d'une règle commune

Exemple
L'automate cellulaire 2D "MAJORITÉ"

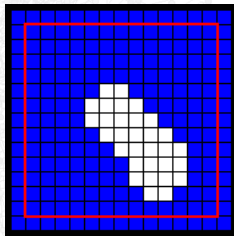
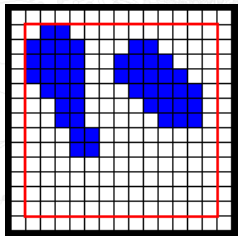


$t = 6$

Bords dans les automates cellulaires

Automates en interaction placés sur une grille régulière mettant à jour leur état au cours du temps en fonction d'une règle commune

Exemple
L'automate cellulaire 2D "MAJORITÉ"

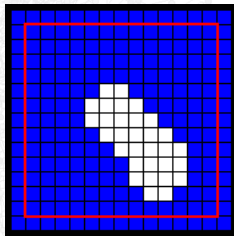
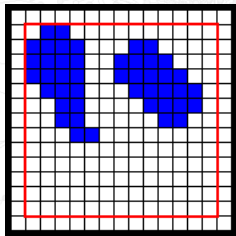


$t = 7$

Bords dans les automates cellulaires

Automates en interaction placés sur une grille régulière mettant à jour leur état au cours du temps en fonction d'une règle commune

Exemple
L'automate cellulaire 2D "MAJORITÉ"

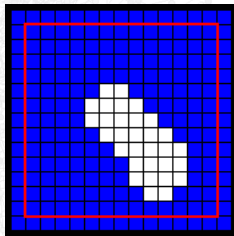
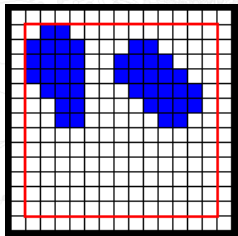


$t = 8$

Bords dans les automates cellulaires

Automates en interaction placés sur une grille régulière mettant à jour leur état au cours du temps en fonction d'une règle commune

Exemple
L'automate cellulaire 2D "MAJORITÉ"

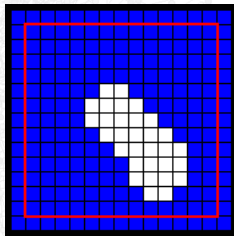
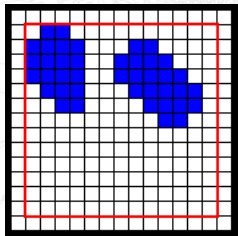


$t = 9$

Bords dans les automates cellulaires

Automates en interaction placés sur une grille régulière mettant à jour leur état au cours du temps en fonction d'une règle commune

Exemple
L'automate cellulaire 2D "MAJORITÉ"

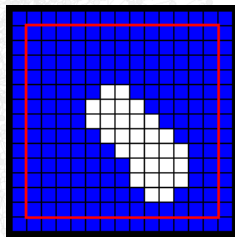
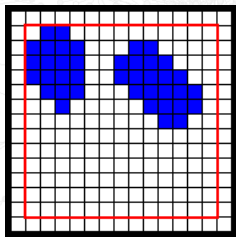


$t = 10$

Bords dans les automates cellulaires

Automates en interaction placés sur une grille régulière mettant à jour leur état au cours du temps en fonction d'une règle commune

Exemple
L'automate cellulaire 2D "MAJORITÉ"

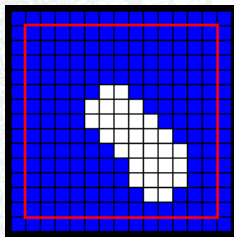
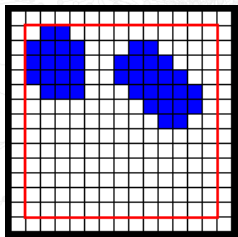


$t = 11$

Bords dans les automates cellulaires

Automates en interaction placés sur une grille régulière mettant à jour leur état au cours du temps en fonction d'une règle commune

Exemple
L'automate cellulaire 2D "MAJORITÉ"

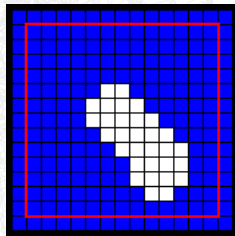
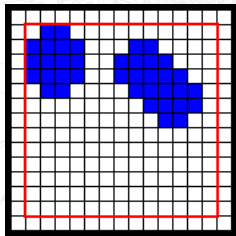


$t = 12$

Bords dans les automates cellulaires

Automates en interaction placés sur une grille régulière mettant à jour leur état au cours du temps en fonction d'une règle commune

Exemple
L'automate cellulaire 2D "MAJORITÉ"

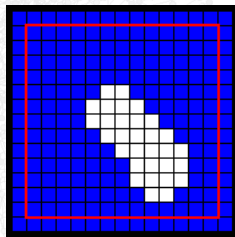
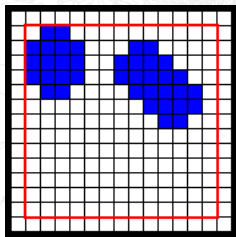


$t = 13$

Bords dans les automates cellulaires

Automates en interaction placés sur une grille régulière mettant à jour leur état au cours du temps en fonction d'une règle commune

Exemple
L'automate cellulaire 2D "MAJORITÉ"



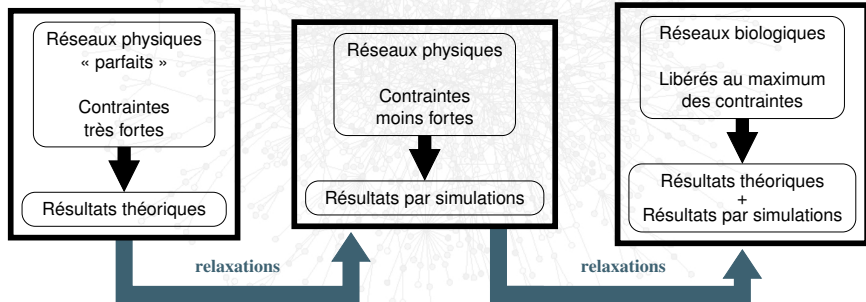
$t = 14$

Objectif : avancer vers la réalité biologique

Idée générale

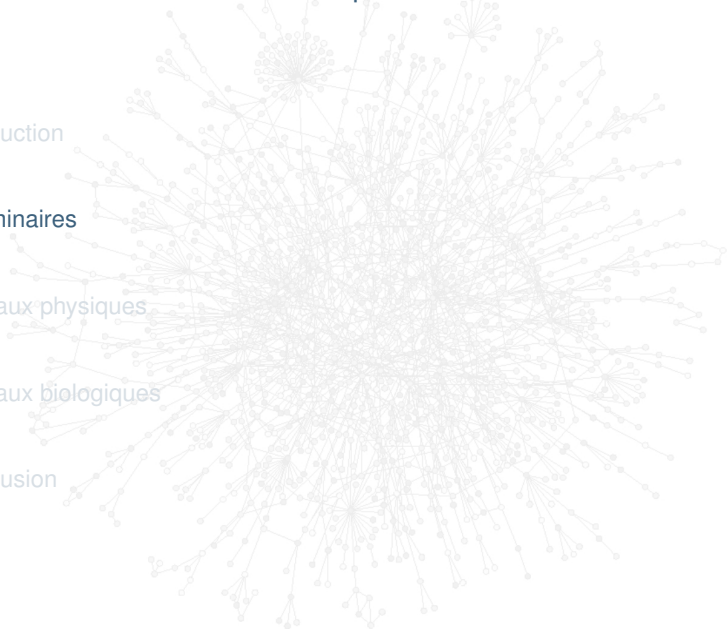
➔ Réseaux d'automates booléens : candidats pertinents à la modélisation de certains mécanismes de régulation biologique

Comprendre l'influence des conditions de bord dans des réseaux d'automates de plus en plus proches de la réalité biologique



Plan de la présentation

- 1 Introduction
- 2 Préliminaires**
- 3 Réseaux physiques
- 4 Réseaux biologiques
- 5 Conclusion



Systèmes dynamiques

Définition

Un système dynamique est un système régi par des interactions entre éléments ayant lieu au cours du temps. Formellement, il s'agit d'un triplet (\mathbb{X}, T, f) où :

- \mathbb{X} est l'espace des configurations,
- T est l'espace du temps,
- F est une fonction $F : \mathbb{X} \times T \mapsto \mathbb{X}$, appelée fonction de transition globale, qui satisfait
 - $\forall x \in \mathbb{X}, F(x, 0) = x$
 - $\forall x \in \mathbb{X}, \forall t_1, t_2 \in T, F(F(x, t_1), t_2) = F(x, t_1 + t_2)$

Attracteurs et bassins d'attraction

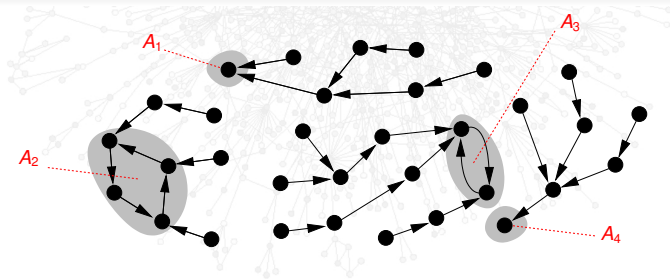
Contexte : Systèmes dynamiques discrets

Définition

L'ensemble des points fixes et des cycles limites d'un système est appelé l'ensemble de ses attracteurs.

Définition

L'ensemble des configurations dont l'évolution amène à un même attracteur A est appelé le bassin d'attraction de A .



Attracteurs et bassins d'attraction

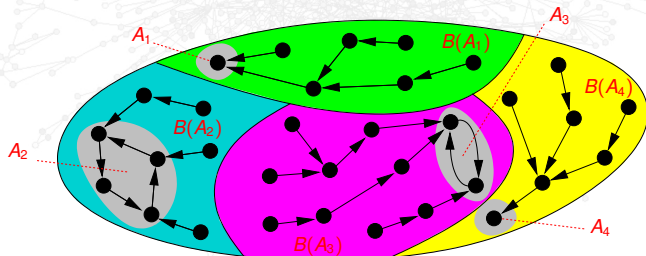
Contexte : Systèmes dynamiques discrets

Définition

L'ensemble des points fixes et des cycles limites d'un système est appelé l'ensemble de ses attracteurs.

Définition

L'ensemble des configurations dont l'évolution amène à un même attracteur A est appelé le bassin d'attraction de A .



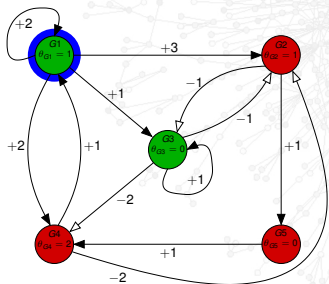
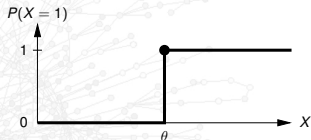
Réseaux d'automates booléens à seuil

McCulloch & Pitts, Journal of Mathematical Biology, 1943

Hopfield, PNAS, 1982

Fonction de transition locale déterministe

$$x_i(t+1) = \begin{cases} 0 & \text{si } \sum_{j \in \mathcal{V}_i} w_{ij} \cdot x_j(t) - \theta_i < 0 \\ 1 & \text{sinon} \end{cases}$$



$$W = \begin{pmatrix} +2 & 0 & 0 & +1 & 0 \\ +3 & 0 & -1 & -2 & 0 \\ +1 & -1 & +1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & -2 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\theta = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

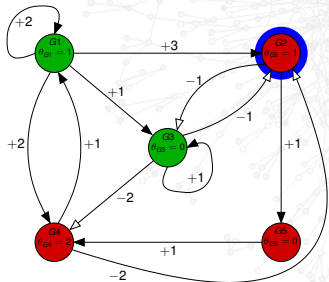
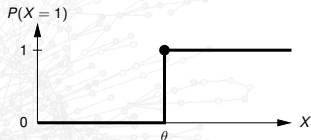
Réseaux d'automates booléens à seuil

McCulloch & Pitts, Journal of Mathematical Biology, 1943

Hopfield, PNAS, 1982

Fonction de transition locale déterministe

$$x_i(t+1) = \begin{cases} 0 & \text{si } \sum_{j \in \mathcal{V}_i} w_{ij} \cdot x_j(t) - \theta_i < 0 \\ 1 & \text{sinon} \end{cases}$$



$$W = \begin{pmatrix} +2 & 0 & 0 & +1 & 0 \\ +3 & 0 & -1 & -2 & 0 \\ +1 & -1 & +1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & -2 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \theta = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

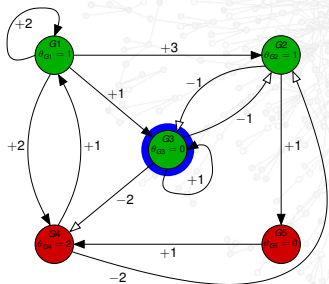
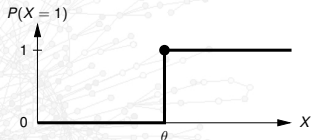
Réseaux d'automates booléens à seuil

McCulloch & Pitts, Journal of Mathematical Biology, 1943

Hopfield, PNAS, 1982

Fonction de transition locale déterministe

$$x_i(t+1) = \begin{cases} 0 & \text{si } \sum_{j \in \mathcal{V}_i} w_{ij} \cdot x_j(t) - \theta_i < 0 \\ 1 & \text{sinon} \end{cases}$$



$$W = \begin{pmatrix} +2 & 0 & 0 & +1 & 0 \\ +3 & 0 & -1 & -2 & 0 \\ +1 & -1 & +1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & -2 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\theta = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

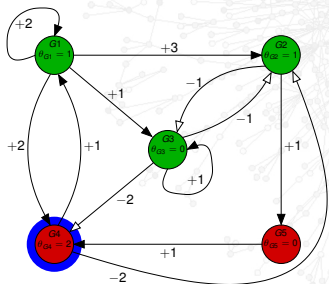
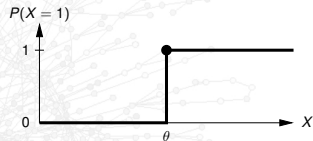
Réseaux d'automates booléens à seuil

McCulloch & Pitts, Journal of Mathematical Biology, 1943

Hopfield, PNAS, 1982

Fonction de transition locale déterministe

$$x_i(t+1) = \begin{cases} 0 & \text{si } \sum_{j \in \mathcal{V}_i} w_{ij} \cdot x_j(t) - \theta_i < 0 \\ 1 & \text{sinon} \end{cases}$$



$$W = \begin{pmatrix} +2 & 0 & 0 & +1 & 0 \\ +3 & 0 & -1 & -2 & 0 \\ +1 & -1 & +1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & -2 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\theta = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

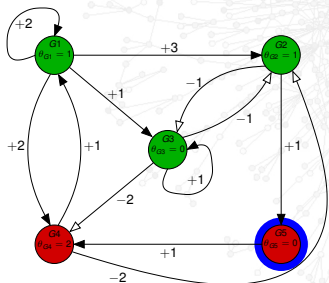
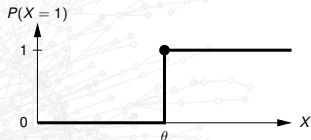
Réseaux d'automates booléens à seuil

McCulloch & Pitts, Journal of Mathematical Biology, 1943

Hopfield, PNAS, 1982

Fonction de transition locale déterministe

$$x_i(t+1) = \begin{cases} 0 & \text{si } \sum_{j \in \mathcal{V}_i} w_{ij} \cdot x_j(t) - \theta_i < 0 \\ 1 & \text{sinon} \end{cases}$$



$$W = \begin{pmatrix} +2 & 0 & 0 & +1 & 0 \\ +3 & 0 & -1 & -2 & 0 \\ +1 & -1 & +1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & -2 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\theta = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

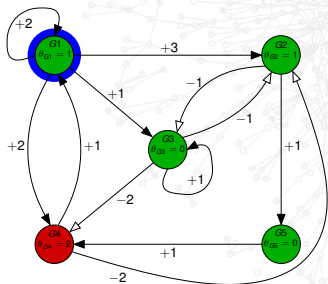
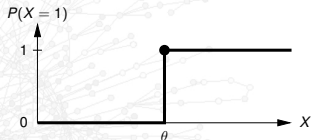
Réseaux d'automates booléens à seuil

McCulloch & Pitts, Journal of Mathematical Biology, 1943

Hopfield, PNAS, 1982

Fonction de transition locale déterministe

$$x_i(t+1) = \begin{cases} 0 & \text{si } \sum_{j \in \mathcal{V}_i} w_{ij} \cdot x_j(t) - \theta_i < 0 \\ 1 & \text{sinon} \end{cases}$$



$$W = \begin{pmatrix} +2 & 0 & 0 & +1 & 0 \\ +3 & 0 & -1 & -2 & 0 \\ +1 & -1 & +1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & -2 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\theta = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

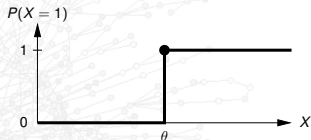
Réseaux d'automates booléens à seuil

McCulloch & Pitts, Journal of Mathematical Biology, 1943

Hopfield, PNAS, 1982

Fonction de transition locale déterministe

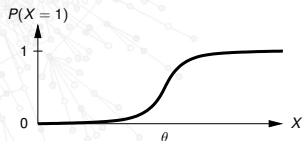
$$x_i(t+1) = \begin{cases} 0 & \text{si } \sum_{j \in \mathcal{V}_i} w_{ij} \cdot x_j(t) - \theta_i < 0 \\ 1 & \text{sinon} \end{cases}$$



Fonction de transition locale stochastique

$$P(x_i(t+1) = \alpha \mid x_j(t), \forall j \in \mathcal{V}_i)$$

$$\frac{e^{(\alpha \cdot \sum_{j \in \mathcal{V}_i} w_{ij} \cdot x_j(t) - \theta_i) / T}}{1 + e^{(\sum_{j \in \mathcal{V}_i} w_{ij} \cdot x_j(t) - \theta_i) / T}}$$



Centre et bord d'un réseau

Définition

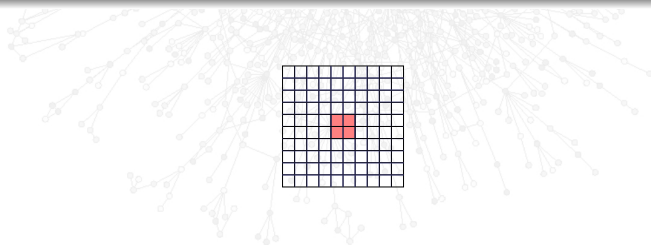
L'excentricité $\epsilon(v)$ d'un sommet v d'un graphe G est la distance maximale entre v et tous les autres sommets de G .

Définition

Le centre d'un réseau d'automates est l'ensemble des sommets d'excentricité minimale de son graphe d'interaction.

Définition

Le bord d'un réseau d'automates est l'ensemble des sommets source de son graphe d'interaction.



Centre et bord d'un réseau

Définition

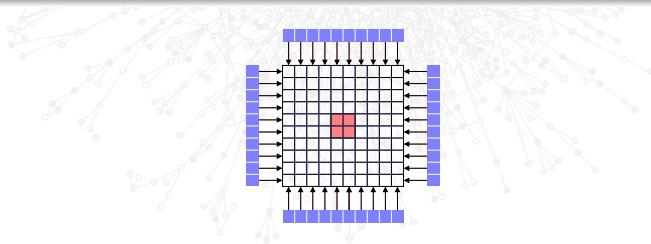
L'excentricité $\epsilon(v)$ d'un sommet v d'un graphe G est la distance maximale entre v et tous les autres sommets de G .

Définition

Le centre d'un réseau d'automates est l'ensemble des sommets d'excentricité minimale de son graphe d'interaction.

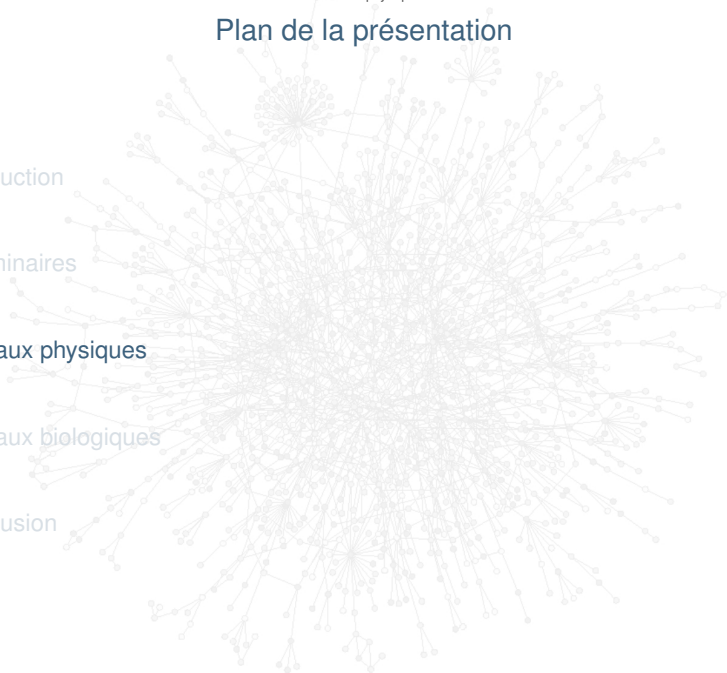
Définition

Le bord d'un réseau d'automates est l'ensemble des sommets source de son graphe d'interaction.



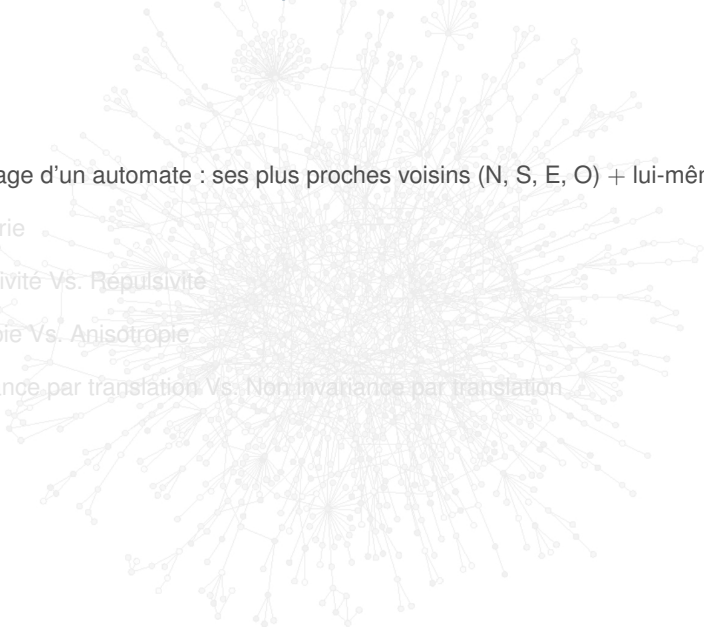
Plan de la présentation

- 1 Introduction
- 2 Préliminaires
- 3 Réseaux physiques**
- 4 Réseaux biologiques
- 5 Conclusion



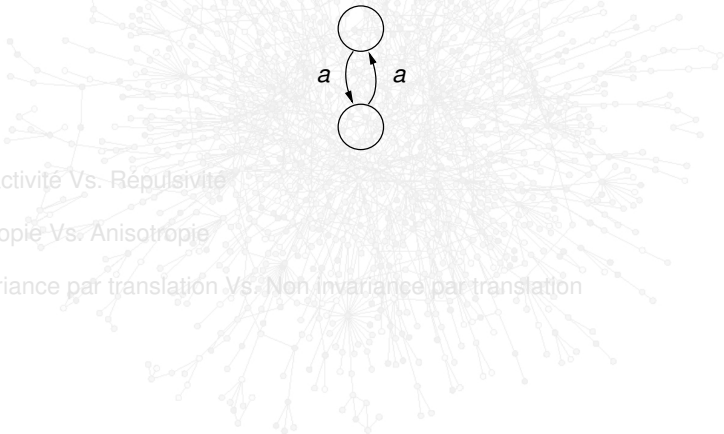
Quelques définitions

- Voisinage d'un automate : ses plus proches voisins (N, S, E, O) + lui-même
- Symétrie
- Attractivité Vs. Répulsivité
- Isotropie Vs. Anisotropie
- Invariance par translation Vs. Non invariance par translation



Quelques définitions

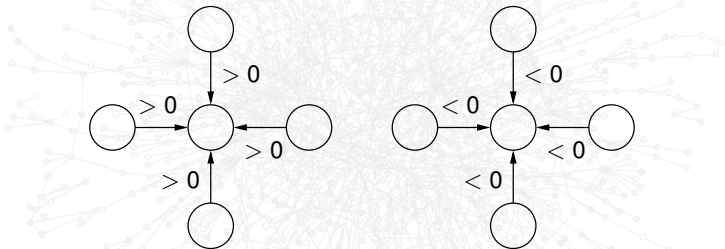
- Voisinage d'un automate : ses plus proches voisins (N, S, E, O) + lui-même
- Symétrie



- Attractivité Vs. Répulsivité
- Isotropie Vs. Anisotropie
- Invariance par translation Vs. Non invariance par translation

Quelques définitions

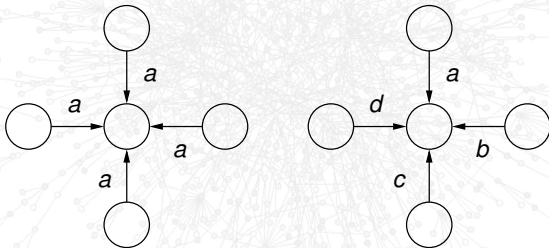
- Voisinage d'un automate : ses plus proches voisins (N, S, E, O) + lui-même
- Symétrie
- Attractivité Vs. Répulsivité



- Isotropie Vs. Anisotropie
- Invariance par translation Vs. Non invariance par translation

Quelques définitions

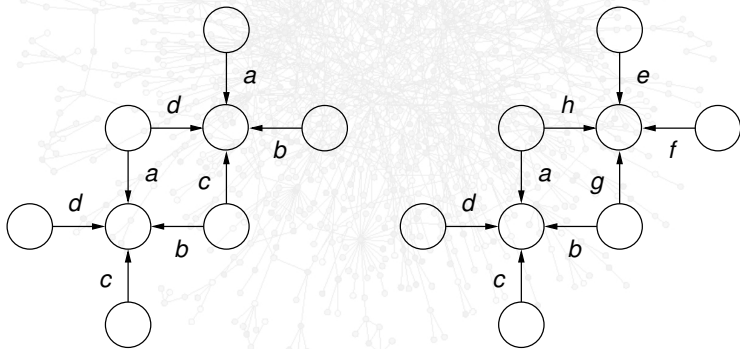
- Voisinage d'un automate : ses plus proches voisins (N, S, E, O) + lui-même
- Symétrie
- Attractivité Vs. Répulsivité
- Isotropie Vs. Anisotropie



- Invariance par translation Vs. Non invariance par translation

Quelques définitions

- Voisinage d'un automate : ses plus proches voisins (N, S, E, O) + lui-même
- Symétrie
- Attractivité Vs. Répulsivité
- Isotropie Vs. Anisotropie
- Invariance par translation Vs. Non invariance par translation



Mesure invariante



Objectif

Proposer une expression générale de la mesure invariante d'un réseau d'automates booléens à seuil en dynamique bloc-séquentielle

Restriction au cas des réseaux *feed-forward*



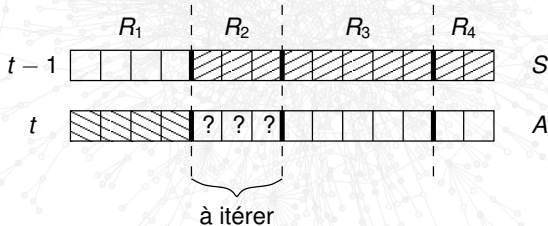
Mesure invariante

Objectif

Proposer une expression générale de la mesure invariante d'un réseau d'automates booléens à seuil en dynamique bloc-séquentielle

Restriction au cas des réseaux *feed-forward*

Cas général



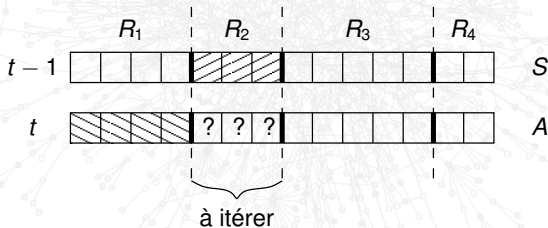
Mesure invariante

Objectif

Proposer une expression générale de la mesure invariante d'un réseau d'automates booléens à seuil en dynamique bloc-séquentielle

Restriction au cas des réseaux *feed-forward*

Cas *feed-forward*

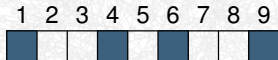


Mesure invariante

Objectif

Proposer une expression générale de la mesure invariante d'un réseau d'automates booléens à seuil en dynamique bloc-séquentielle

Notation ensembliste des configurations



Notation classique

$$x = (100101001)$$

Notation ensembliste

$$x = \{1, 4, 6, 9\}$$

Idée générale

- Hypothèse : dynamique bloc-séquentielle dans un réseau symétrique R *feed-forward*



Invariance pour la markovienne globale et pour toutes les markoviennes locales aux blocs

- Recherche de $\mu(A)$ pour une configuration quelconque A
- Focalisation au niveau des blocs et écriture de la formule de définition générale de la mesure invariante locale au i -eme bloc

$$\mu_i(A) \equiv \sum_{D \subset B} \mu_i(A \cup D \cup A^{*1}) \cdot \mathcal{M}_i(A \cup D \cup A^{*1}, A)$$

- Proposition d'une formule pour $\mu_i(A \cup D \cup A^{*1})$
- Simplification grâce à l'hypothèse de symétrie
- Obtention de $\mu_i(A) = \prod_{j=1}^m \mu_j(A) = \sum_{S \subset A} \mu(S) \cdot \mathcal{M}(S, A)$

Idée générale

- Hypothèse : dynamique bloc-séquentielle dans un réseau symétrique R *feed-forward*



Invariance pour la markovienne globale et pour toutes les markoviennes locales aux blocs

- Recherche de $\mu(A)$ pour une configuration quelconque A
- Focalisation au niveau des blocs et écriture de la formule de définition générale de la mesure invariante locale au i -eme bloc

$$\mu_i(A) \equiv \sum_{D \subset B} \mu_i(A \cup D \cup A^{*1}) \cdot \mathcal{M}_i(A \cup D \cup A^{*1}, A)$$

- Proposition d'une formule pour $\mu_i(A \cup D \cup A^{*1})$
- Simplification grâce à l'hypothèse de symétrie
- Obtention de $\mu_i(A) = \prod_{j=1}^m \mu_j(A) = \sum_{S \subset A} \mu(S) \cdot \mathcal{M}(S, A)$

Idée générale

- Hypothèse : dynamique bloc-séquentielle dans un réseau symétrique R *feed-forward*



Invariance pour la markovienne globale et pour toutes les markoviennes locales aux blocs

- Recherche de $\mu(A)$ pour une configuration quelconque A
- Focalisation au niveau des blocs et écriture de la formule de définition générale de la mesure invariante locale au i -ème bloc

$$\mu_i(A) = \sum_{D \subset R_i} \mu_i(A_i \cup D \cup A^{i+1}) \cdot \mathcal{M}_i(A_i \cup D \cup A^{i+1}, A)$$

- Proposition d'une formule pour $\mu_i(A_i \cup D \cup A^{i+1})$
- Simplification grâce à l'hypothèse de symétrie
- Obtention de $\mu_i(A) = \prod_{i=1}^m \mu_i(A) = \sum_{S \subset A} \mu(S) \cdot \mathcal{M}(S, A)$

Idée générale

- Hypothèse : dynamique bloc-séquentielle dans un réseau symétrique R *feed-forward*



Invariance pour la markovienne globale et pour toutes les markoviennes locales aux blocs

- Recherche de $\mu(A)$ pour une configuration quelconque A
- Focalisation au niveau des blocs et écriture de la formule de définition générale de la mesure invariante locale au i -ème bloc

$$\mu_i(A) = \sum_{D \subset R_i} \mu_i(A_i \cup D \cup A^{i+1}) \cdot \mathcal{M}_i(A_i \cup D \cup A^{i+1}, A)$$

- Proposition d'une formule pour $\mu_i(A_i \cup D \cup A^{i+1})$

- Simplification grâce à l'hypothèse de symétrie

- Obtention de $\mu_i(A) = \prod_{j=1}^m \mu_j(A) = \sum_{S \subset A} \mu(S) \cdot \mathcal{M}(S, A)$

Idée générale

- Hypothèse : dynamique bloc-séquentielle dans un réseau symétrique R *feed-forward*



Invariance pour la markovienne globale et pour toutes les markoviennes locales aux blocs

- Recherche de $\mu(A)$ pour une configuration quelconque A
- Focalisation au niveau des blocs et écriture de la formule de définition générale de la mesure invariante locale au i -ème bloc

$$\mu_i(A) = \sum_{D \subset R_i} \mu_i(A_i \cup D \cup A^{i+1}) \cdot \mathcal{M}_i(A_i \cup D \cup A^{i+1}, A)$$

- Proposition d'une formule pour $\mu_i(A_i \cup D \cup A^{i+1})$
- Simplification grâce à l'hypothèse de symétrie
- Obtention de $\mu_i(A) = \prod_{i=1}^m \mu_i(A) = \sum_{S \subset A} \mu(S) \cdot \mathcal{M}(S, A)$

Idée générale

- Hypothèse : dynamique bloc-séquentielle dans un réseau symétrique R *feed-forward*



Invariance pour la markovienne globale et pour toutes les markoviennes locales aux blocs


- Recherche de $\mu(A)$ pour une configuration quelconque A
- Focalisation au niveau des blocs et écriture de la formule de définition générale de la mesure invariante locale au i -ème bloc

$$\mu_i(A) = \sum_{D \subset R_i} \mu_i(A_i \cup D \cup A^{i+1}) \cdot \mathcal{M}_i(A_i \cup D \cup A^{i+1}, A)$$

- Proposition d'une formule pour $\mu_i(A_i \cup D \cup A^{i+1})$
- Simplification grâce à l'hypothèse de symétrie
- Obtention de $\mu(A) = \prod_{i=1}^m \mu_i(A) = \sum_{S \subset R} \mu(S) \cdot \mathcal{M}(S, A)$

Modes d'itération et transitions de phase (1)

Principe de transition de phase

 Soit R un réseau. On calcule 2 mesures invariantes : l'une, μ_{B0} , quand on ajoute à R un bord $B0$, l'autre, μ_{B1} , quand on affecte à R un bord $B1$.

Définition


Il y a transition de phase si les deux mesures invariantes μ_{B0} et μ_{B1} sont différentes.

Théorème

Si une transition de phase due à l'influence des conditions de bord émerge du comportement asymptotique d'un réseau d'automates booléens à seuil R , elle est observable en dynamique parallèle, séquentielle, et dans toutes les dynamiques blocs-séquentielles équivalentes à des dynamiques blocs-parallèles issues de subdivisions successives de R en blocs creux.

Modes d'itération et transitions de phase (1)

Principe de transition de phase

 Soit R un réseau. On calcule 2 mesures invariantes : l'une, μ_{B0} , quand on ajoute à R un bord $B0$, l'autre, μ_{B1} , quand on affecte à R un bord $B1$.

Définition

Il y a transition de phase si les deux mesures invariantes μ_{B0} et μ_{B1} sont différentes.

Théorème

Si une transition de phase due à l'influence des conditions de bord émerge du comportement asymptotique d'un réseau d'automates booléens à seuil R , elle est observable en dynamique parallèle, séquentielle, et dans toutes les dynamiques blocs-séquentielles équivalentes à des dynamiques blocs-parallèles issues de subdivisions successives de R en blocs creux.

Modes d'itération et transitions de phase (2)

La probabilité stationnaire d'une configuration x peut s'exprimer comme :

$$\mu(x) = \frac{e^{E(x)}}{\sum_{y \in \mathcal{X}} e^{E(y)}} = \frac{e^{E(x)}}{Z}$$

Définition

L'énergie libre de R , notée $\psi(R)$, est le logarithme de la fonction de partition.

Idee générale de la preuve

➔ Trouver une relation de proportionalité entre $\psi_{par}(R)$ et $\psi_{seq}(R)$ telle que :

$$\psi_{par}(R) = \gamma \cdot \psi_{seq}(R)$$



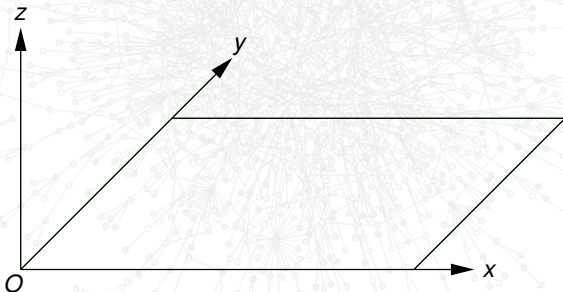
On ne change pas la relation d'égalité ou d'inégalité entre les mesures invariantes quand on passe d'un mode d'itération à un autre

Vers l'observation de transitions de phase

Objectif

Contourner les difficultés d'obtenir des résultats théoriques sur des réseaux plus complexes

- Représenter graphiquement les transitions de phase dues à l'influence des conditions de bords si elles existent



Exploration des phénomènes de transition de phase en 2D

Objectif

Trouver comment mesurer concrètement des transitions de phase

Idée

- ➔ Une mesure invariante donne une indication sur la fréquence d'apparition des configurations à l'asymptotique.
- ➔ Elle donne donc une indication sur la fréquence d'activation des automates.

Définition

L'activité d'un automate d'un réseau R est le nombre de fois où cet automate est à l'état actif au cours de l'évolution de R .

- ➔ On a une transition de phase si l'activité centrale d'un réseau soumis à des conditions de bord $B0$ est différente de son activité centrale lorsqu'il est soumis à des conditions différentes $B1$.

Réseaux attractifs homogènes

Réseaux physiques "parfaits"

Diagramme de phase

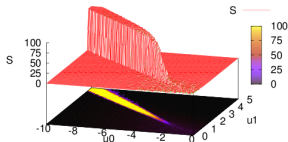

 11×11

Diagramme de phase

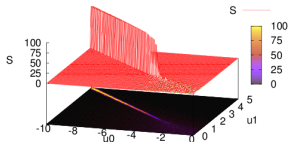
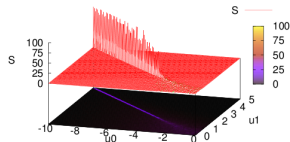

 37×37

Diagramme de phase


 131×131

Réseaux physiques avec contrainte d'auto-interaction relâchée

Diagramme de phase

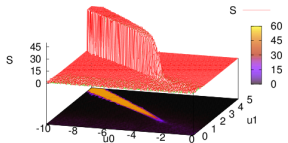

 11×11

Diagramme de phase

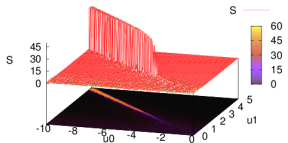
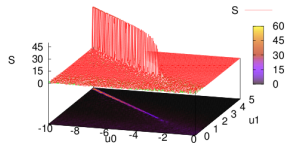

 37×37

Diagramme de phase


 131×131

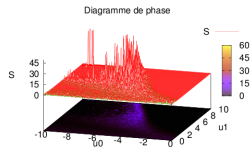
Réseaux plus complexes

- Réseaux attractifs

Forme triangulaire des domaines de transition de phase



Influence plus importante des conditions de bord

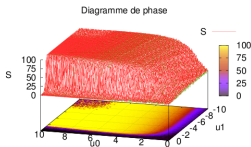


- Réseaux répulsifs

Forme “parabolique” des domaines de transition de phase
 Variations de l’emplacement du domaine dans les réseaux physiques avec auto-interaction forcée

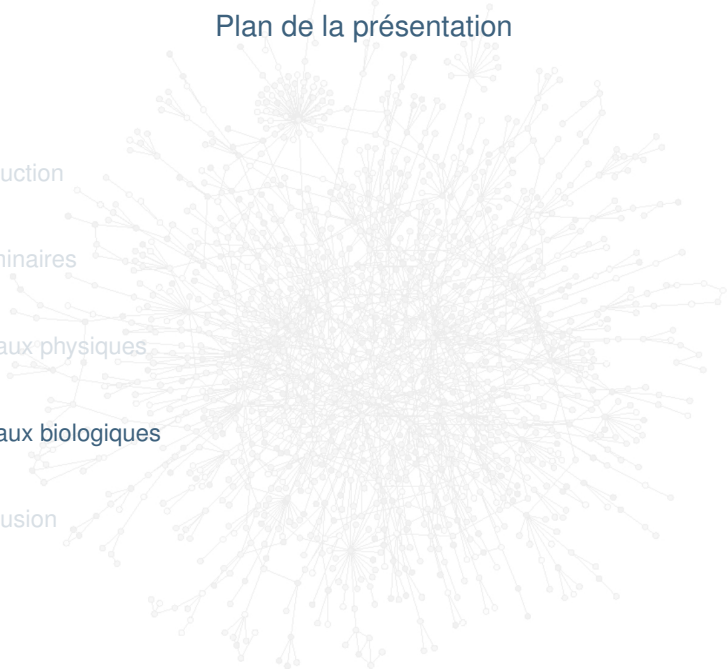


Réseaux avec condition d’auto-interaction relaxée plus sensibles à l’influence des conditions de bord mais moins sensibles à la relaxation des contraintes

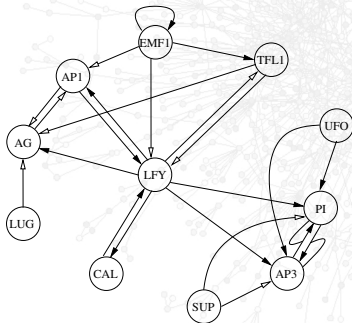
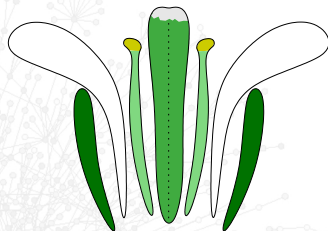


Plan de la présentation

- 1 Introduction
- 2 Préliminaires
- 3 Réseaux physiques
- 4 Réseaux biologiques**
- 5 Conclusion



Morphogenèse florale d'*Arabidopsis thaliana*



| Attracteurs | Tissus cellulaires |
|----------------|--------------------|
| Point fixe 1 | Sépales |
| Point fixe 2 | Pétales |
| Point fixe 3 | Étamines |
| Point fixe 4 | Carpelles |
| Point fixe 5 | Inflorescence |
| Point fixe 6 | Mutant |
| Cycle limite 1 | — |
| ⋮ | ⋮ |
| Cycle limite 7 | — |

Mendoza & Alvarez-Buylla, Journal of Theoretical Biology, 1998

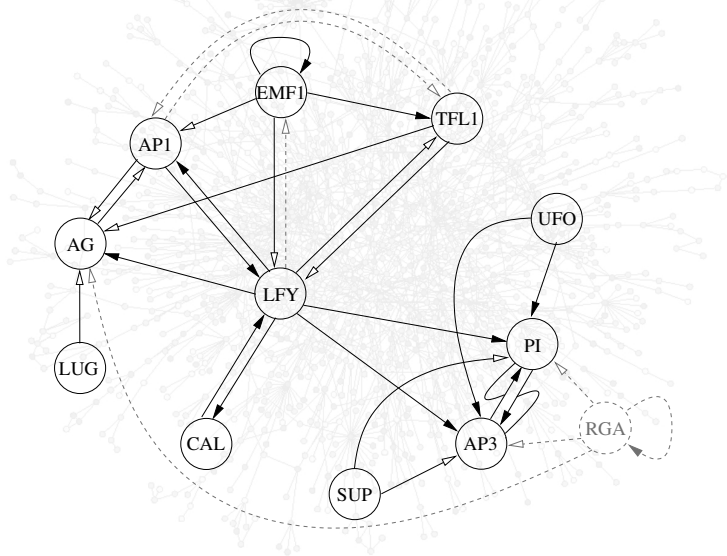
Résultats expérimentaux sur l'influence de la gibbérelline

Goto & Pharis, Canadian Journal of Botany, 1999

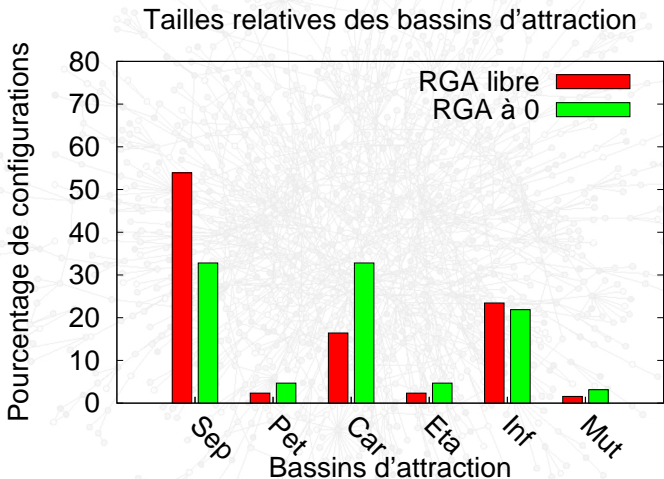


Variations autour du réseau de Mendoza

Modèle déterministe et dynamique séquentielle



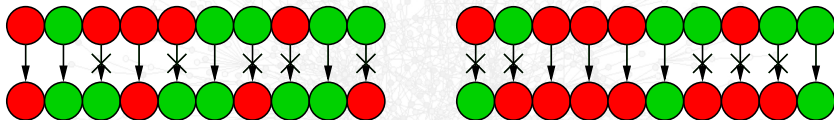
Tailles relatives des bassins d'attraction



Robustesse du système face à des perturbations d'états

Objectif

Calculer les probabilités de changement de bassins d'attraction en fonction d'un paramètre stochastique de perturbation d'état.



Obtention des formules explicites des polynômes caractéristiques des probabilités de changement de bassins d'attraction en fonction du taux de perturbation d'état α

Algorithme

$$P(c \rightarrow c' | p_k) = 0 \text{ ou } 1$$

$$P(c \rightarrow c' | k) = \frac{\sum_{p_k \in P_k} P(c \rightarrow c' | p_k)}{\binom{n}{k}}$$

$$P_\alpha(k) = \binom{n}{k} \cdot \alpha^k \cdot (1 - \alpha)^{n-k}$$

$$P_\alpha(c \rightarrow c') = \sum_{k=0}^n (P(c \rightarrow c' | k) \cdot P_\alpha(k))$$

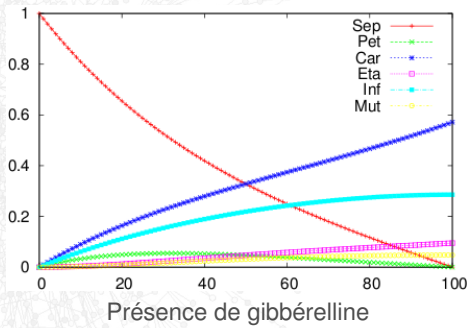
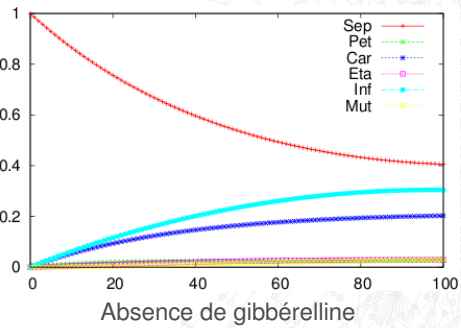
$$P_\alpha(c \rightarrow B_j) = \sum_{c' \in B_j} P_\alpha(c \rightarrow c')$$

$$P_\alpha(B_i \rightarrow B_j) = \frac{\sum_{c \in B_i} P_\alpha(c \rightarrow B_j)}{|B_i|}$$



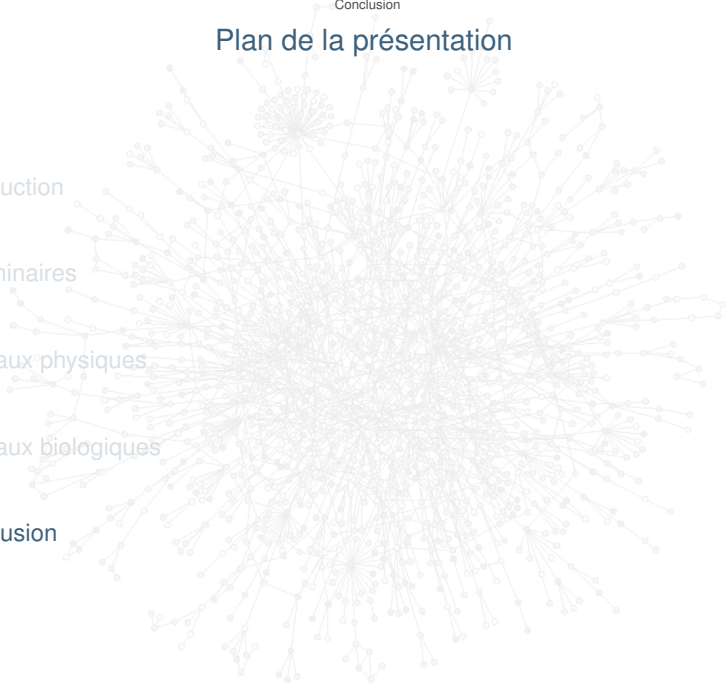
$$P_\alpha(B_i \rightarrow B_j) = z_n \cdot \alpha^n + z_{n-1} \cdot \alpha^{n-1} \cdot (1 - \alpha) + \dots + z_1 \cdot \alpha \cdot (1 - \alpha)^{n-1} + z_0 \cdot (1 - \alpha)^n$$

Bassin d'origine — Sépales

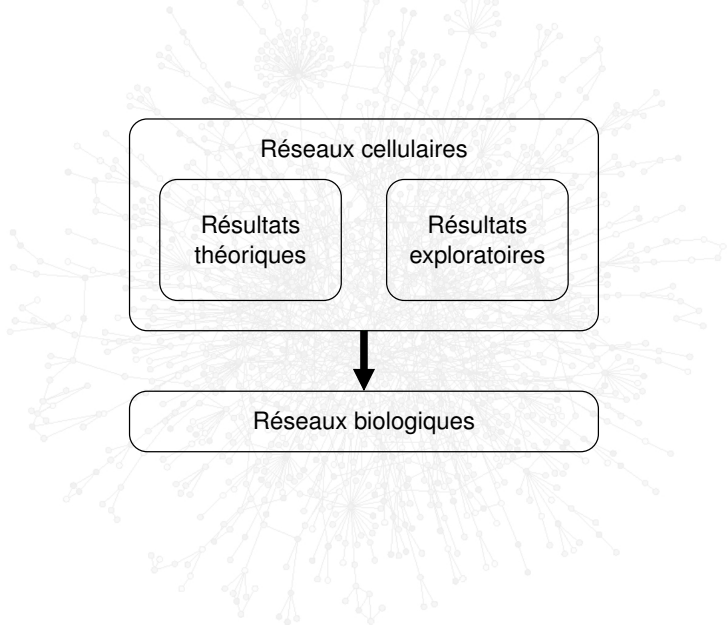


Plan de la présentation

- 1 Introduction
- 2 Préliminaires
- 3 Réseaux physiques
- 4 Réseaux biologiques
- 5 Conclusion

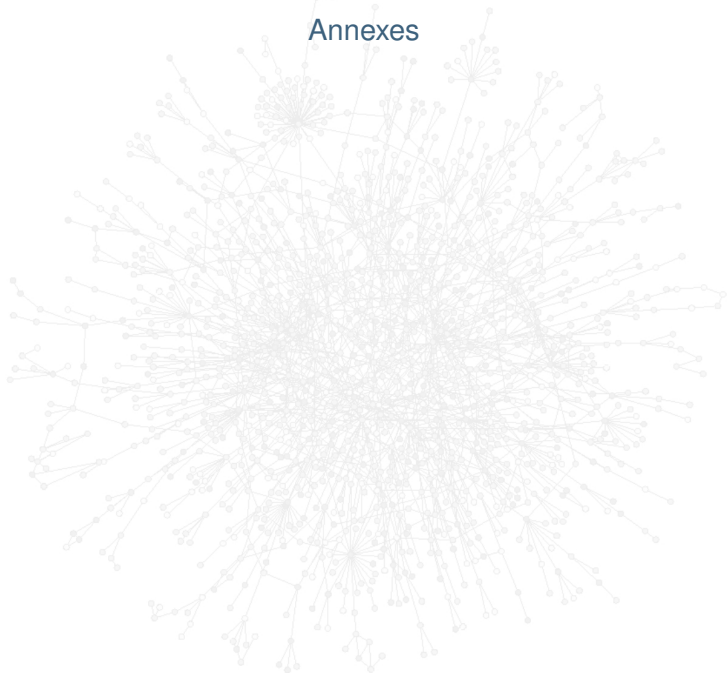


Bilan du travail réalisé



Perspectives

- Perte de linéarité : potentiels de couples Vs. potentiels de triplets
- Lien entre le modèle stochastique et le modèle déterministe
- Observabilité des transitions de phase en fonction des modes d'itérations
- Améliorations du réseau de Mendoza
- Complexité de l'algorithme d'étude de la robustesse face aux perturbations d'état
- Donner un sens aux cycles limites



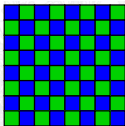
Transitions de phase et modes d'itération

Cheminement de la preuve

Définition

Un bloc B d'un réseau R est creux si :

$$\forall i, j \in S, i \neq j, w_{ij} = 0$$



- Soit un réseau R divisé en 2 blocs creux R_1 et R_2 .
- Première étape : montrer que l'énergie parallèle d'une configuration peut s'exprimer comme la somme des énergies séquentielles des deux configurations locales aux blocs creux R_1 et R_2 .
- Deuxième étape : montrer que la fonction de partition parallèle est égale au produit des fonctions de partition séquentielles locales aux blocs creux R_1 et R_2 .
- Ce résultat reste vrai si l'on subdivise les blocs en blocs de plus en plus petits, jusqu'à atteindre le mode d'itération séquentiel.

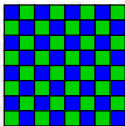
Transitions de phase et modes d'itération

Cheminement de la preuve

Définition

Un bloc B d'un réseau R est creux si :

$$\forall i, j \in S, i \neq j, w_{ij} = 0$$



- Soit un réseau R divisé en 2 blocs creux R_1 et R_2 .
- Première étape : montrer que l'énergie parallèle d'une configuration peut s'exprimer comme la somme des énergies séquentielles des deux configurations locales aux blocs creux R_1 et R_2 .
- Deuxième étape : montrer que la fonction de partition parallèle est égale au produit des fonctions de partition séquentielles locales aux blocs creux R_1 et R_2 .
- Ce résultat reste vrai si l'on subdivise les blocs en blocs de plus en plus petits, jusqu'à atteindre le mode d'itération séquentiel.

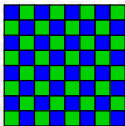
Transitions de phase et modes d'itération

Cheminement de la preuve

Définition

Un bloc B d'un réseau R est creux si :

$$\forall i, j \in S, i \neq j, w_{ij} = 0$$



- Soit un réseau R divisé en 2 blocs creux R_1 et R_2 .
- Première étape : montrer que l'énergie parallèle d'une configuration peut s'exprimer comme la somme des énergies séquentielles des deux configurations locales aux blocs creux R_1 et R_2 .
- Deuxième étape : montrer que la fonction de partition parallèle est égale au produit des fonctions de partition séquentielles locales aux blocs creux R_1 et R_2 .
- Ce résultat reste vrai si l'on subdivise les blocs en blocs de plus en plus petits, jusqu'à atteindre le mode d'itération séquentiel.

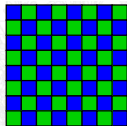
Transitions de phase et modes d'itération

Cheminement de la preuve

Définition

Un bloc B d'un réseau R est creux si :

$$\forall i, j \in S, i \neq j, w_{ij} = 0$$



- Soit un réseau R divisé en 2 blocs creux R_1 et R_2 .
- Première étape : montrer que l'énergie parallèle d'une configuration peut s'exprimer comme la somme des énergies séquentielles des deux configurations locales aux blocs creux R_1 et R_2 .
- Deuxième étape : montrer que la fonction de partition parallèle est égale au produit des fonctions de partition séquentielles locales aux blocs creux R_1 et R_2 .
- Ce résultat reste vrai si l'on subdivise les blocs en blocs de plus en plus petits, jusqu'à atteindre le mode d'itération séquentiel.

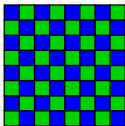
Transitions de phase et modes d'itération

Cheminement de la preuve

Définition

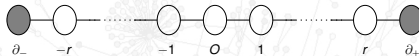
Un bloc B d'un réseau R est creux si :

$$\forall i, j \in S, i \neq j, w_{ij} = 0$$



- Soit un réseau R divisé en 2 blocs creux R_1 et R_2 .
- Première étape : montrer que l'énergie parallèle d'une configuration peut s'exprimer comme la somme des énergies séquentielles des deux configurations locales aux blocs creux R_1 et R_2 .
- Deuxième étape : montrer que la fonction de partition parallèle est égale au produit des fonctions de partition séquentielles locales aux blocs creux R_1 et R_2 .
- Ce résultat reste vrai si l'on subdivise les blocs en blocs de plus en plus petits, jusqu'à atteindre le mode d'itération séquentiel.

Absence de transition de phase en 1D



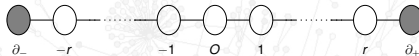
Théorème

Le comportement asymptotique d'un réseau d'automates booléens à seuil symétrique soumis à l'influence de conditions de bord n'admet pas de transition de phase.

Idee :

- Réduire le problème à une matrice de taille 2×2 par le voisinage de l'automate entre 0 et 1 (la projectivité et de conditionnement).
- Proposer une condition sur le déterminant de la matrice de transfert.
- Prouver, dans les conditions de bord, que les mesures invariantes sont égales à 0 ou 1 .

Absence de transition de phase en 1D



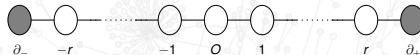
Théorème

Le comportement asymptotique d'un réseau d'automates booléen à seuil symétrique soumis à l'influence de conditions de bord n'admet pas de transition de phase.

Idée :

- Réduire la markovienne à une matrice de transfert réduite au simple voisinage de l'automate central contenant les coefficients des équations de projectivité et de conditionnement.
- Proposer une condition possible de transition de phase : nullité du déterminant de la matrice de transfert.
- Prouver, dans les conditions de nullité et de non-nullité du déterminant, que les mesures invariantes sont égales que les conditions de bord soient fixées à 0 ou à 1.

Absence de transition de phase en 1D



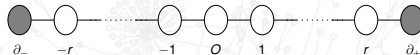
Théorème

Le comportement asymptotique d'un réseau d'automates booléens à seuil symétrique soumis à l'influence de conditions de bord n'admet pas de transition de phase.

Idée :

- Réduire la markovienne à une matrice de transfert réduite au simple voisinage de l'automate central contenant les coefficients des équations de projectivité et de conditionnement.
- Proposer une condition possible de transition de phase : nullité du déterminant de la matrice de transfert.
- Prouver, dans les conditions de nullité et de non-nullité du déterminant, que les mesures invariantes sont égales que les conditions de bord soient fixées à 0 ou à 1.

Absence de transition de phase en 1D



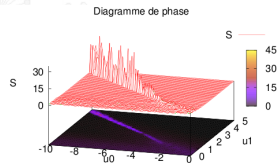
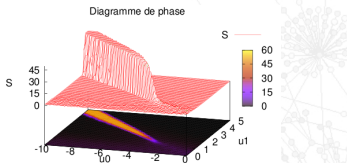
Théorème

Le comportement asymptotique d'un réseau d'automates booléen à seuil symétrique soumis à l'influence de conditions de bord n'admet pas de transition de phase.

Idée :

- Réduire la markovienne à une matrice de transfert réduite au simple voisinage de l'automate central contenant les coefficients des équations de projectivité et de conditionnement.
- Proposer une condition possible de transition de phase : nullité du déterminant de la matrice de transfert.
- Prouver, dans les conditions de nullité et de non-nullité du déterminant, que les mesures invariantes sont égales que les conditions de bord soient fixées à 0 ou à 1.

Conditions de bord extrémales en attractif



Conditions de bord extrémales

| | | | |
|------------|----------------------------|------------|----------------------------|
| P_0^0 | $0,00 \pm 3 \cdot 10^{-5}$ | P_1^0 | $0,00 \pm 2 \cdot 10^{-5}$ |
| P_0^1 | $0,02 \pm 5 \cdot 10^{-4}$ | P_1^1 | $0,63 \pm 2 \cdot 10^{-3}$ |
| P_0^{01} | $0,31 \pm 2 \cdot 10^{-3}$ | P_1^{01} | $0,00 \pm 1 \cdot 10^{-4}$ |
| P_0^{10} | $0,31 \pm 2 \cdot 10^{-3}$ | P_1^{10} | $0,00 \pm 2 \cdot 10^{-4}$ |

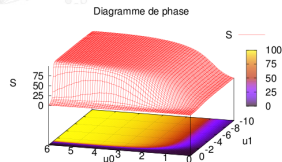
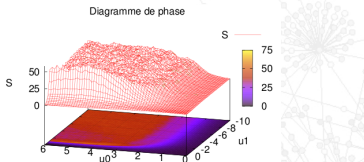
Conditions de bord en quinconce

| | | | |
|---------------|----------------------------|---------------|----------------------------|
| P_{01}^0 | $0,00 \pm 3 \cdot 10^{-5}$ | P_{10}^0 | $0,00 \pm 2 \cdot 10^{-5}$ |
| P_{01}^1 | $0,57 \pm 2 \cdot 10^{-3}$ | P_{10}^1 | $0,55 \pm 2 \cdot 10^{-3}$ |
| P_{01}^{01} | $0,02 \pm 6 \cdot 10^{-4}$ | P_{10}^{01} | $0,03 \pm 7 \cdot 10^{-4}$ |
| P_{01}^{10} | $0,03 \pm 6 \cdot 10^{-4}$ | P_{10}^{10} | $0,03 \pm 7 \cdot 10^{-4}$ |

$$\begin{aligned}
 P_q &= 1 - [\min(P_{01}^0, P_{10}^0) + \min(P_{01}^1, P_{10}^1) + \min(P_{01}^{01}, P_{10}^{01}) + \min(P_{01}^{10}, P_{10}^{10})] \\
 &= 1 - (0,00 + 0,55 + 0,02 + 0,03) \\
 &= 0,40
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 P_e &= 1 - [\min(P_0^0, P_1^0) + \min(P_0^1, P_1^1) + \min(P_0^{01}, P_1^{01}) + \min(P_0^{10}, P_1^{10})] \\
 &= 1 - (0,00 + 0,02 + 0,00 + 0,00) \\
 &= 0,98
 \end{aligned}$$

Conditions de bord en quinconce en répulsif



Conditions de bord extrêmes

| | | | |
|------------|----------------------------|------------|----------------------------|
| P_0^0 | $0,00 \pm 5 \cdot 10^{-6}$ | P_1^0 | $0,00 \pm 6 \cdot 10^{-6}$ |
| P_0^1 | $0,00 \pm 0,00$ | P_1^1 | $0,00 \pm 0,00$ |
| P_0^{01} | $0,24 \pm 2 \cdot 10^{-4}$ | P_1^{01} | $0,23 \pm 2 \cdot 10^{-4}$ |
| P_0^{10} | $0,49 \pm 2 \cdot 10^{-4}$ | P_1^{10} | $0,53 \pm 2 \cdot 10^{-4}$ |

Conditions de bord en quinconce

| | | | |
|---------------|----------------------------|---------------|----------------------------|
| P_{01}^0 | $0,00 \pm 8 \cdot 10^{-6}$ | P_{10}^0 | $0,00 \pm 3 \cdot 10^{-6}$ |
| P_{01}^1 | $0,00 \pm 0,00$ | P_{10}^1 | $0,00 \pm 0,00$ |
| P_{01}^{01} | $0,80 \pm 2 \cdot 10^{-4}$ | P_{10}^{01} | $0,00 \pm 7 \cdot 10^{-7}$ |
| P_{01}^{10} | $0,00 \pm 0,00$ | P_{10}^{10} | $0,76 \pm 2 \cdot 10^{-4}$ |

$$\begin{aligned}
 P_e &= 1 - [\min(P_0^0, P_1^0) + \min(P_0^1, P_1^1) + \min(P_0^{01}, P_1^{01}) + \min(P_0^{10}, P_1^{10})] \\
 &= 1 - (0,00 + 0,00 + 0,23 + 0,49) \\
 &= 0,28
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 P_q &= 1 - [\min(P_{01}^0, P_{10}^0) + \min(P_{01}^1, P_{10}^1) + \min(P_{01}^{01}, P_{10}^{01}) + \min(P_{01}^{10}, P_{10}^{10})] \\
 &= 1 - (0,00 + 0,00 + 0,00 + 0,00) \\
 &= 1
 \end{aligned}$$