

Invariant de places

- On a un *invariant de place* linéaire s'il existe une pondération sur le marquage des places telle que :

$$q_1 m_1 + q_2 m_2 + \dots + q_n m_n = \text{constante} \quad \forall M \in A(\mathcal{R}, M_0)$$

telle que $\forall i \in [1, \dots, n], q_i \in \mathbb{N}$

- L'ensemble des places telles que leur pondération est non nulle est une *composante conservative*
- un réseau est dit *conservatif* si l'ensemble des places du réseau forme une composante conservative.

Propriété

Soit F un vecteur de pondération des places. F est associé à un invariant de place ssi $F^t \cdot C = 0$.

Preuve : L'équation fondamentale donne : $M = M_0 + C \cdot \bar{s}$

D'après la définition de la composante conservative :

$$F^t \cdot M = \text{cte} = F^t \cdot M_0 + F^t \cdot C \cdot \bar{s} \quad \forall \bar{s}.$$

On en déduit que $F^t \cdot C \cdot \bar{s} = 0, \forall \bar{s}$. □

Propriété

Si F_1 et F_2 sont associés à des invariants de places, alors pour tout $(n_1, n_2) \in \mathbb{N}$, $n_1 F_1 + n_2 F_2$ est associé à un invariant de places.

Propriété

Toutes les places d'une composante conservative sont bornées et de plus $M(p_i) \leq \frac{F^t \cdot M_0}{q_i}$ où q_i est le poids associé à la place p_i .

Preuve : la définition d'une composante conservative donne :

$$q_i m_i + \sum_{j \neq i} q_j m_j = \sum q_j m_j,$$

On sait aussi que $\sum_{j \neq i} q_j m_j \geq 0$

On en déduit $q_i m_i \leq \sum q_j m_j$, et donc $m_i \leq \frac{\sum q_j m_j}{q_i}$ □

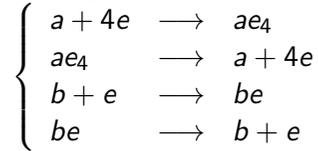
Généralement, il y a une infinité de P-invariants. On cherche donc les invariants minimaux :

- les invariants minimum sont linéairement indépendants les uns des autres,
- le PGCD de leurs éléments est égal à 1

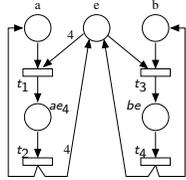
À quoi servent les invariants de places ?

Ils correspondent à des règles de préservation de quantité de matière.

Exemple. Soit le système d'équations chimiques suivant :



1 Le RdP est :

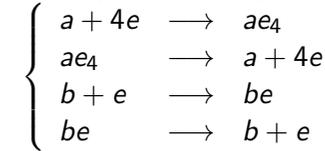


2 La matrice d'incidence :

$$C = \begin{matrix} & a & b & e & ae_4 \\ \begin{matrix} a \\ b \\ e \\ ae_4 \\ be \end{matrix} & \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ -4 & 4 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} & \end{matrix}$$

Les colonnes sont dans l'ordre t_1, t_2, t_3, t_4 .

Exemple. Soit le système d'équations chimiques suivant :



3 Les P-invariants sont donnés par l'équations $(\alpha, \beta, \gamma, \delta, \epsilon) \cdot C = 0$:

$$\begin{cases} -\alpha - 4\gamma + \delta = 0 \\ \alpha + 4\gamma - \delta = 0 \\ -\beta - \gamma + \epsilon = 0 \\ \beta + \gamma - \epsilon = 0 \end{cases} \iff \begin{cases} \alpha + 4\gamma = \delta \\ \beta + \gamma = \epsilon \end{cases}$$

- Si seuls 2 éléments sont non nuls (10 choix).
 - α et δ : $\alpha = 1$ et $\delta = 1$ - Trouvé
 - γ et δ : $\gamma = 1$ et $\delta = 4$ - Impossible
 - β et ϵ : $\beta = 1$ et $\epsilon = 1$ - Trouvé
 - γ et ϵ : $\gamma = 1$ et $\epsilon = 1$ - Impossible
- Si seuls 3 éléments sont non nuls (10 choix).
 - α, γ et δ : $\alpha = 1, \gamma = 1$ et $\delta = 5$ - Impossible
 - β, γ et ϵ : $\beta = 1, \gamma = 1$ et $\epsilon = 2$ - Impossible
 - γ, δ et ϵ : $\gamma = 1, \delta = 4$ et $\epsilon = 1$ - Trouvé
- Si un seul élément nul (5 choix possibles).
 - $\alpha = 0$: $\gamma = 1, \delta = 4, \beta = 1, \epsilon = 2$ - Composition
 - $\beta = 0$: $\gamma = 1, \epsilon = 1, \delta = 5, \alpha = 1$ - Composition
 - $\gamma = 0$: $\alpha = \delta = \beta = \epsilon = 1$ - Composition
 - $\delta = 0$: impossible
 - $\epsilon = 0$: impossible
- Si aucun élément n'est nul.
 - $\alpha = \gamma = \beta = 1, \epsilon = 2, \delta = 5$ - Composition

Méthode assez empirique \Rightarrow difficilement automatisable.

Méthode pour la recherche des P-invariants.

On ne modifie pas les solutions d'un système linéaire en effectuant les opérations suivantes sur les lignes :

- échange de 2 lignes,
- multiplication d'une ligne par un entier
- addition d'une ligne à une autre

But : *triangulariser* la matrice (ou une sous matrice carré).

Cette méthode mène toujours à une matrice de la forme :

$$\left(\begin{array}{cccc|cccc} 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & 1 & \dots & 1 & 1 & \dots & 1 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & 1 & \dots & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ \hline 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \end{array} \right)$$

Les lignes de "zéros" représentent les composantes conservatives.

En effet, les lignes nulles de la matrice sont des "compositions de places" telles qu'aucune transition ne peut faire changer.

Reprenons le même exemple. La matrice C s'écrit comme suit :

$$C = \begin{matrix} a \\ b \\ e \\ ae_4 \\ be \end{matrix} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ -4 & 4 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

on cherche à modifier les lignes matrice (en utilisant les opérations précédentes) pour faire apparaître des lignes nulles :

- 1 remplacer la 3ème ligne (e) par $4ae_4 + be + e$, elle devient nulle.

Reprenons le même exemple. La matrice C s'écrit comme suit :

$$C = \begin{matrix} a \\ b \\ e + 4ae_4 + be \\ ae_4 + a \\ be + b \end{matrix} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

on cherche à modifier les lignes matrice (en utilisant les opérations précédentes) pour faire apparaître des lignes nulles :

- 1 remplacer la 3ème ligne (e) par $4ae_4 + be + e$, elle devient nulle.
- 2 remplacer la 4ème ligne (ae_4) par $a + ae_4$, elle devient nulle.
- 3 remplacer la 5ème ligne (be) par $b + be$, elle devient nulle.

Les P-invariants sont donc : $a + ae_4$, $b + be$ et $e + 4ae_4 + be$

Invariants de transitions

- Une *séquence répétitive* est une séquence de transitions qui permet de revenir à l'état de départ. Elle est dite *minimale* si aucun de ses préfixes stricts n'est une séquence répétitive.
- L'ensemble des transitions qui apparaissent dans une séquence répétitive forme une *composante répétitive*.
- Le réseau de Petri est dit répétitif s'il existe une séquence répétitive qui contient toutes les transitions du réseau de Petri.

Équation pour le calcul des composantes répétitives

Soit S une séquence de franchissement et $T(S)$ l'ensemble des transitions apparaissant dans S . $T(S)$ est une composante répétitive ssi $C \cdot \bar{S} = 0$.

Preuve. L'équation fondamentale donne $M' = M + C \cdot \bar{v}$. Si on revient à l'état initial c'est que $C \cdot \bar{v} = 0$ et donc que \bar{v} est solution de $C \cdot \bar{v} = 0$.

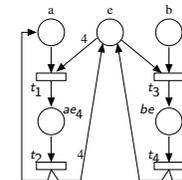
- un invariant : ens de réactions chimiques permettant de maintenir le système dans un état stationnaire. Si toutes ces réactions ont lieu, l'état du système n'est pas modifié.
- l'ensemble des invariants : ensemble des activités du réseau métabolique à un état stationnaire.

Exemple 1.

Les réactions :



Le réseau de Petri :



La matrice d'incidence :

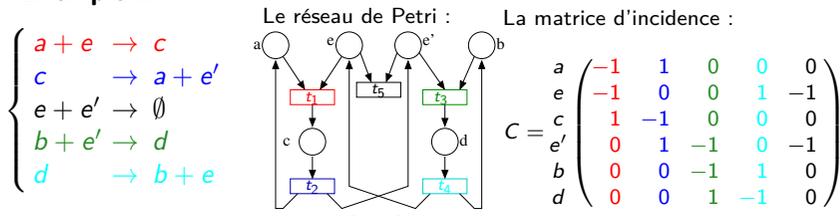
$$C = \begin{matrix} a \\ b \\ e \\ ae_4 \\ be \end{matrix} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ -4 & 4 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Les invariants de transitions sont les solutions de $C \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ t \end{pmatrix} = 0$.

Ce système s'écrit $\begin{cases} x = y \\ z = t \\ -4x + 4y - z + t = 0 \end{cases}$ qui est équivalent à $\begin{cases} x = y \\ z = t \end{cases}$

Il y a donc 2 t-invariants : $(1, 1, 0, 0)^t$ et $(0, 0, 1, 1)^t$

Exemple 2.

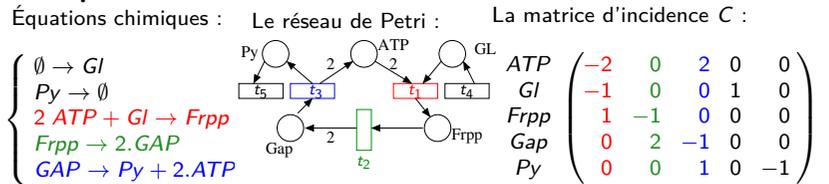


Recherche des T-invariants : $C \cdot \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ \delta \\ \varepsilon \end{pmatrix} = 0$

$$\begin{cases} \alpha = \beta \\ \varepsilon + \alpha = \delta \\ \alpha = \beta \\ \beta = \gamma + \varepsilon \\ \gamma = \delta \end{cases}$$

- Si α est nul, tous les autres sont nuls aussi. Ce n'est pas un T-invariant. Sinon
- $\alpha = 1, \beta = 1, \gamma = 1, \delta = 1, \varepsilon = 0 \Rightarrow 1^{er}$ invariant trouvé : (t_1, t_2, t_3, t_4)
 - $\alpha = 1, \beta = 1, \gamma = 0, \delta = 0, \varepsilon = 1$. Impossible.
 - $\alpha = 1, \beta = 1, \gamma = 2, \delta = 2, \varepsilon = ?$. Impossible.

Exemple 3. Recherche des P-invariants et des T-invariants

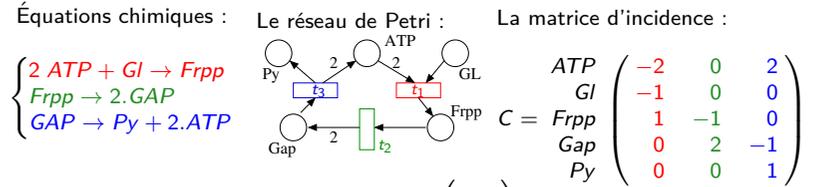


1 Recherche des T-invariants. $C \cdot \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ \delta \\ \varepsilon \end{pmatrix} = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} \alpha = \gamma \\ \alpha = \delta \\ \alpha = \beta \\ \gamma = 2 \times \beta \\ \gamma = \varepsilon \end{cases}$

Pas d'invariants car

- si $\alpha = 0$, tous les autres sont nuls, et
- si $\alpha \neq 0$, on arrive à une incohérence.

Exemple 3. Recherche des P-invariants et des T-invariants

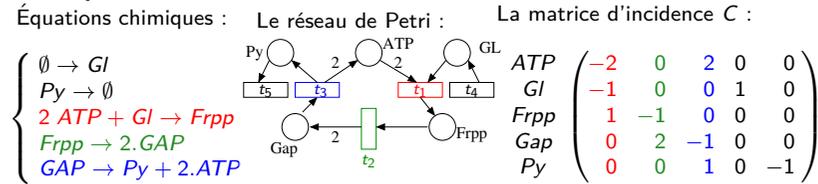


1 Recherche des T-invariants : $C \cdot \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} \gamma = \alpha \\ \alpha = 0 \\ \alpha = \beta \\ \gamma = 2 \times \beta \\ \gamma = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \alpha = 0 \\ \beta = 0 \\ \gamma = 0 \end{cases} \Rightarrow$ Pas d'invariants

Absence de T-invariant évidente : - consommation de Gl
- synthèse de Py

Existe-t-il un fonctionnement stationnaire de la voie métabolique si on ne compte ni la consommation de Gl ni la production de Py. Pour cela on rajoute deux réactions.

Exemple 3. Recherche des P-invariants et des T-invariants



2 Recherche des P-invariants : $(a, b, c, d, e) \times C = 0$

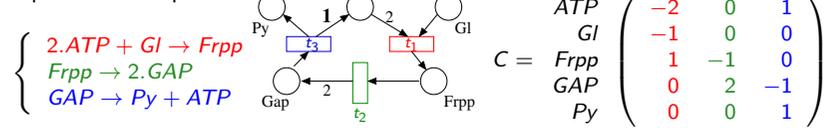
$$\begin{matrix} ATP \\ Gl \\ Frpp \\ GAP \\ Py \end{matrix} \begin{pmatrix} -2 & 0 & 2 \\ -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{matrix} ATP \\ Gl \\ Frpp + Gl \\ GAP + 2Frpp + 2Gl \\ Py + GAP + 2Frpp + 2Gl \end{matrix} \begin{pmatrix} -2 & 0 & 2 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Il y a un autre P-invariant : la ligne correspondant à $(GAP + 2Frpp)$ est le vecteur $(2, 0, -1)$ on peut remplacer ATP par $(ATP + (GAP+2Frpp) + (GAP+2Frpp+2Gl))$ Le système devient :

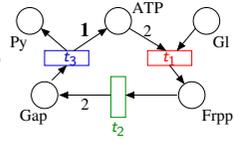
$$\begin{matrix} Gl \\ Frpp + Gl \\ GAP + 2Frpp + 2Gl \\ Py + GAP + 2Frpp + 2Gl \\ ATP + (GAP + 2Frpp) + (GAP + 2Frpp + 2Gl) \end{matrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Exemple 4 : recherche des P-invariants et des T-invariants :

Équations chimiques :



Le réseau de Petri :



$$C = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

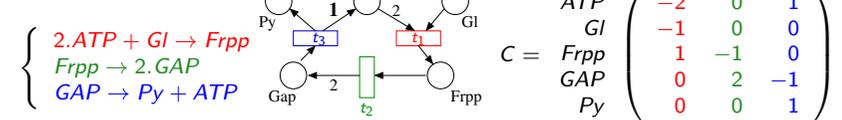
1 Recherche des T-invariants : $C \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = 0 \Leftrightarrow$

$$\begin{cases} -2\alpha + \gamma = 0 \\ -\alpha = 0 \\ \alpha - \beta = 0 \\ 2\beta - \gamma = 0 \\ \gamma = 0 \end{cases} \Rightarrow \alpha = \beta = \gamma = 0$$

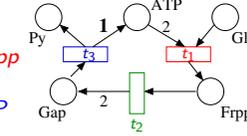
Il n'existe pas de vecteur y non nul tel que $C.y = 0$. Il n'y a donc pas d'invariant de transitions.

Exemple 4 : recherche des P-invariants et des T-invariants :

Équations chimiques :



Le réseau de Petri :



$$C = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

2 Recherche des P-invariants : $(a, b, c, d, e)C = 0$

$$\begin{pmatrix} -2 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{matrix} ATP + Frpp \\ Gl + Frpp \\ Gap + 2(Gl + Frpp) \\ Frpp + (ATP + Frpp) + Gap \\ Py \end{matrix} \begin{pmatrix} t_1 & t_2 & t_3 \\ -1 & -1 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{matrix} ATP + Frpp \\ Gl + Frpp \\ Gap + 2(Gl + Frpp) \\ Frpp + (ATP + Frpp) + Gap \\ Py + (2 \times (Frpp + Gl) + Gap) \end{matrix} \begin{pmatrix} t_1 & t_2 & t_3 \\ -1 & -1 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Il y a donc 2 P-invariants.

Chaque T-invariant peut être vu comme un module qui permet lorsqu'il fonctionne "à la bonne vitesse", de maintenir l'état du système.

- Les T-invariants triviaux (réactions réversibles) permettent de maintenir le système dans un état stationnaire mais ne contribuent pas à la voie métabolique ; ils ne sont pas très intéressants.
- Par contre les autres T-invariants contribuent à la voie métabolique. On va donc se focaliser surtout sur les autres.

Les transitions qui ne sont impliquées dans aucun T-invariant *non-trivial* sont des candidats pour une réduction du réseau.

Pour être plus précis, la suppression de ces transitions ne change pas les fonctionnements stationnaires, puisque ces transitions n'apparaissent pas dans les T-invariants non triviaux. Ainsi étudier les comportements stationnaires du système réduit (après suppression de ces transitions) revient au même qu'étudier le comportement du système initial.

Exercice : Supprimez les transitions correspondant à ces candidats dans le RdP de la synthèse de l'amidon dans la pomme de terre et recalculer les T-invariants.