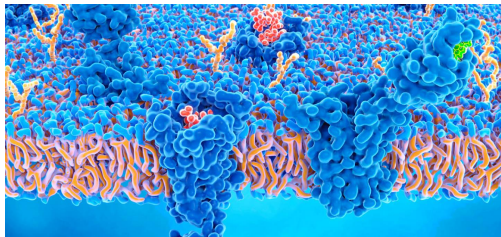


Application des bases de Gröbner à la biophysique

Pierre Larivé & Tristan Roy

16 octobre 2024



Contexte

On considère N protéines membranaires identiques, disposées dans un plan et repérées par leurs coordonnées complexes.

On peut associer une énergie à la déformation de la membrane causée par les protéines.

Energie au niveau de la i^{e} protéine, située en $z_i \in \mathbb{C}$: proportionnelle à

$$|f_i(z_1, \dots, z_N)|^2$$

où

$$f_i(z_1, \dots, z_N) = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{(z_i - z_j)^2}.$$

Objectif

But : trouver une disposition des protéines stable, i.e. qui correspond à un minimum d'énergie.
Minimum d'énergie : énergie nulle.

$$\begin{cases} f_1(z_1, \dots, z_N) = 0 \\ \vdots \\ f_N(z_1, \dots, z_N) = 0 \end{cases} \quad (M_N)$$

Objectif

But : trouver une disposition des protéines stable, i.e. qui correspond à un minimum d'énergie.
Minimum d'énergie : énergie nulle.

$$\begin{cases} f_1(z_1, \dots, z_N) = 0 \\ \vdots \\ f_N(z_1, \dots, z_N) = 0 \end{cases} \quad (M_N)$$

Théorème

Le système (M_N) n'a pas de solution pour $N \leq 12$, sauf :

- $N = 5$ (nombre fini de solutions)
- $N = 8$ (infinité de solutions)

Reformulation et simplifications

$$f_i(z_1, \dots, z_N) = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{(z_i - z_j)^2}.$$

Invariances :

- $z_i \leftarrow z_i + c$ où $c \in \mathbb{C}$: on peut supposer $z_N = 0$
- $z_i \leftarrow \lambda z_i$ où $\lambda \in \mathbb{C}^*$: on peut supposer $z_{N-1} = 1$.

On note P_i le numérateur de f_i :

$$P_i(z_1, \dots, z_N) = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \prod_{\substack{k \neq i \\ k \neq j}} (z_i - z_k)^2$$

Reformulation et simplifications

Le système à résoudre est donc :

$$\left\{ \begin{array}{l} u \prod_{i=1}^{N-1} \prod_{j=i+1}^N (z_i - z_j) = 1 \\ P_1(z_1, \dots, z_N) = 0 \\ \vdots \\ P_N(z_1, \dots, z_N) = 0 \\ z_{N-1} = 1 \\ z_N = 0 \end{array} \right. \quad (M'_N)$$

Cas N = 5

Base de Gröbner obtenue :

$$\begin{aligned} & u + 70z_2z_3^{10} - 350z_2z_3^9 + 1012z_2z_3^8 - 1948z_2z_3^7 + 2820z_2z_3^6 - 3112z_2z_3^5 + 2962z_2z_3^4 - \\ & 2310z_2z_3^3 + 1358z_2z_3^2 - 502z_2z_3 + 130z_2 + \frac{884}{11}z_3^{11} - 477z_3^{10} + \frac{17081}{11}z_3^9 - \frac{37303}{11}z_3^8 + \frac{60652}{11}z_3^7 - \\ & \frac{76221}{11}z_3^6 + \frac{79033}{11}z_3^5 - \frac{69049}{11}z_3^4 + \frac{48882}{11}z_3^3 - \frac{25467}{11}z_3^2 + \frac{9069}{11}z_3 - \frac{1872}{11} \\ & z_1 + z_2 + \frac{50}{11}z_3^{11} - 25z_3^{10} + \frac{853}{11}z_3^9 - \frac{1776}{11}z_3^8 + \frac{2778}{11}z_3^7 - \frac{3360}{11}z_3^6 + \frac{3416}{11}z_3^5 - \frac{2909}{11}z_3^4 + \frac{1975}{11}z_3^3 - \\ & \frac{962}{11}z_3^2 + 30z_3 - \frac{71}{11} \\ & z_2^2 + \frac{50}{11}z_2z_3^{11} - 25z_2z_3^{10} + \frac{853}{11}z_2z_3^9 - \frac{1776}{11}z_2z_3^8 + \frac{2778}{11}z_2z_3^7 - \frac{3360}{11}z_2z_3^6 + \frac{3416}{11}z_2z_3^5 - \frac{2909}{11}z_2z_3^4 + \\ & \frac{1975}{11}z_2z_3^3 - \frac{962}{11}z_2z_3^2 + 30z_2z_3 - \frac{71}{11}z_2 - \frac{25}{11}z_3^{11} + \frac{126}{11}z_3^{10} - \frac{369}{11}z_3^9 + \frac{720}{11}z_3^8 - \frac{1062}{11}z_3^7 + \frac{1204}{11}z_3^6 - \\ & \frac{1183}{11}z_3^5 + \frac{962}{11}z_3^4 - \frac{611}{11}z_3^3 + \frac{258}{11}z_3^2 - \frac{80}{11}z_3 + 1 \\ & z_3^{12} - 6z_3^{11} + 20z_3^{10} - 45z_3^9 + 76z_3^8 - 100z_3^7 + 109z_3^6 - 100z_3^5 + 76z_3^4 - 45z_3^3 + 20z_3^2 - 6z_3 + 1 \end{aligned}$$

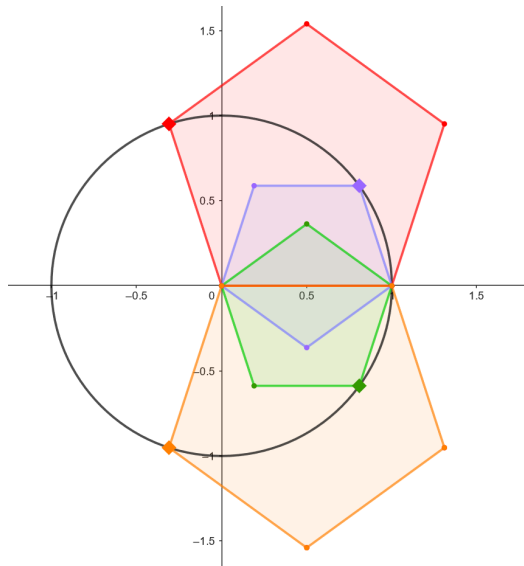


Figure – Solutions pour $N = 5$

Première reformulation : exploitation de la symétrie

$$P_i(z_1, \dots, z_N) = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \prod_{\substack{k \neq i \\ k \neq j}} (z_i - z_k)^2$$

Observations :

- P_1 est symétrique en $z_2, \dots, z_N$;
- $P_1(z_2, z_1, z_3, \dots, z_N) = P_2(z_1, \dots, z_N)$.

Première reformulation : exploitation de la symétrie

$$P_i(z_1, \dots, z_N) = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \prod_{\substack{k \neq i \\ k \neq j}} (z_i - z_k)^2$$

Observations :

- P_1 est symétrique en $z_2, \dots, z_N$;
- $P_1(z_2, z_1, z_3, \dots, z_N) = P_2(z_1, \dots, z_N)$.

Proposition

Le polynôme $H_1 = \sum_{i=1}^N P_i$ est symétrique.

Première reformulation : exploitation de la symétrie

On pose, pour $1 \leq i_1 < i_2 \leq N$, $P_{i_1, i_2} = \frac{P_{i_1} - P_{i_2}}{z_{i_1} - z_{i_2}}$.

Proposition

- Pour tout $1 \leq i_1 < i_2 \leq N$, P_{i_1, i_2} est un polynôme.
- $H_2 = \sum_{1 \leq i_1 < i_2 \leq N} P_{i_1, i_2}$ est symétrique.

Première reformulation : exploitation de la symétrie

On pose, pour $1 \leq i_1 < i_2 \leq N$, $P_{i_1, i_2} = \frac{P_{i_1} - P_{i_2}}{z_{i_1} - z_{i_2}}$.

Proposition

- Pour tout $1 \leq i_1 < i_2 \leq N$, P_{i_1, i_2} est un polynôme.
- $H_2 = \sum_{1 \leq i_1 < i_2 \leq N} P_{i_1, i_2}$ est symétrique.

On construit ainsi par récurrence sur $k \in \{2, \dots, N\}$:

- Pour $1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq N$, $P_{i_1, \dots, i_k} = \frac{P_{i_1, \dots, i_{k-1}} - P_{i_1, \dots, i_{k-2}, i_k}}{z_{i_{k-1}} - z_{i_k}}$
- $H_k = \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq N} P_{i_1, \dots, i_k}$

Première reformulation : exploitation de la symétrie

On résout le nouveau système :

$$\left\{ \begin{array}{l} H_1(z_1, \dots, z_{N-2}, 1, 0) = 0 \\ \vdots \\ H_N(z_1, \dots, z_{N-2}, 1, 0) = 0 \\ P_{N-1}(z_1, \dots, z_{N-2}, 1, 0) = 0 \\ P_N(z_1, \dots, z_{N-2}, 1, 0) = 0 \end{array} \right.$$

Deuxième reformulation

On note $e_1, \dots, e_N$ les polynômes symétriques élémentaires en $(z_1, \dots, z_N)$.

Théorème

Soit $z_1, \dots, z_N \in \mathbb{C}$. On pose $f(x) = \prod_{i=1}^N (x - z_i) = x^N - e_1 x^{N-1} + e_2 x^{N-2} - \dots + (-1)^N e_N$.

$(z_1, \dots, z_N)$ est solution de (M_N) si et seulement si f est sans facteurs carrés et divise $3(f'')^2 - 4f'f'''$.

Deuxième reformulation

On note $e_1, \dots, e_N$ les polynômes symétriques élémentaires en $(z_1, \dots, z_N)$.

Théorème

Soit $z_1, \dots, z_N \in \mathbb{C}$. On pose $f(x) = \prod_{i=1}^N (x - z_i) = x^N - e_1 x^{N-1} + e_2 x^{N-2} - \dots + (-1)^N e_N$.

$(z_1, \dots, z_N)$ est solution de (M_N) si et seulement si f est sans facteurs carrés et divise $3(f'')^2 - 4f'f'''$.

Lemme

Soient $y_1, \dots, y_N \in \mathbb{C}^*$. On note $e_1, \dots, e_N$ les polynômes symétriques élémentaires en

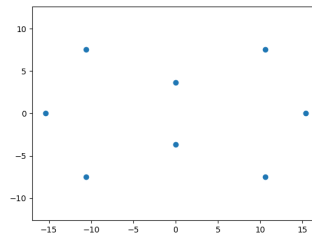
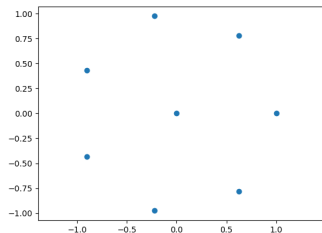
$$y_1, \dots, y_N. \text{ Alors } \sum_{j=1}^N \frac{1}{y_j^2} = \frac{e_{N-1}^2 - 2e_N e_{N-2}}{e_N^2}.$$

Résultat pour $N = 8$

Les solutions de (M_8) sont les racines du polynôme

$$t^8 + \frac{28}{5}at^6 + 14a^2t^4 + 28a^3t^2 - t - 7a^4,$$

a variant dans $\mathbb{C}$.



Merci pour votre attention !

