

# LEDA

## Logistique des Équations Différentielles Algébriques

Jean-Claude Yakoubsohn  
Institut de Mathématiques de Toulouse  
Équipe MIP  
yak@mip.ups-tlse.fr

## Équipe du LGC

Karim Alloula, Jean-Pierre Belaud, Jean-Marc Lelanne

## Équipe MAX du LIX

Marc Giusti, François Ollivier, Joris Van der Hoeven

## Équipe MIP de l'IMT

Guillaume Chèze, Jean-Claude Yakoubsohn, Fabien Monfreda

## Équipe calcul Formel du LIFL

François Boulier, François Lemaire, Alexandre Sedoglavic

# Qu'est-ce qu'une EDA ou DAE

$$F(x, x') = 0$$

1- EDO

$$x' = F(x)$$

2- EDO sous contraintes

$$\begin{aligned} x' &= f(x, y) \\ 0 &= g(x, y) \end{aligned}$$

3- EDA

Soit  $F : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ ,

$$F(x, x') = 0, \quad \text{rang}(D_{x'} F(x, x')) < n.$$

Terminologie.

$$\begin{aligned} x' = y & \quad \text{différentielle} \\ F(x, y) = 0 & \quad \text{algébrique} \end{aligned}$$

# Formulation lagrangienne cartésienne du mouvement du pendule

$$q = (x_1, x_2, x_3), \quad \mathcal{L}(x_1, x_2, x_3, \dot{x}_1, \dot{x}_2, \dot{x}_3) = (x_1'^2 + x_2'^2)/2 - gx_2 - x_3(x_1^2 + x_2^2 - 1)/2 = 0.$$

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}'} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = \begin{pmatrix} x_1'' + x_1 x_3 \\ x_2'' + x_2 x_3 - g \\ x_1^2 + x_2^2 - 1 \end{pmatrix} = 0$$

C'est une équation différentielle du type  $F(X, X') = 0$ .

Une condition suffisante pour  $X'$  soit une fonction continue de  $X$  est que la différentielle de  $F$  par rapport à  $X'$  soit inversible.

Dans le cas  $X = (x_1, x_2)$ ,  $Y = (x_1'', x_2'', x_3)$  on a

$$F(X, Y) = \begin{pmatrix} x_1'' + x_1 x_3 \\ x_2'' + x_2 x_3 - g \\ x_1^2 + x_2^2 - 1 \end{pmatrix}$$

et  $D_Y F(X, Y) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & x_1 \\ 0 & 1 & x_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$  est non inversible.

# Distillation de Rayleigh

On considère un mélange liquide de constituants chimique. Pour les séparer la solution est de chauffer ce mélange dans une casserole.

Pour modéliser ce phénomène on introduit :

$V$	volume vapeur
$U$	énergie interne
$T$	temperature
$x_i, i = 1 : N$	fraction molaire liquide du constituant $i$
$y_i, i = 1 : N$	fraction molaire vapeur du constituant $i$
$h$	enthalpie molaire liquide
$H$	enthalpie vapeur liquide
$K_i$	equilibre quantité liquide-vapeur du constituant $i$
$y_{in}$	fraction molaire de l'air

# inconnues :  $3N+6$

# Distillation de Rayleigh : équations

$$V + U' = 0$$

équilibre global

$$Vy_i + U'x_i + Ux'_i = 0, \quad i = 1 : N$$

équilibre partiel

$$Q - VH - U'h - Uh' = 0$$

équilibre enthalpique

$$y_i - Kix_i = 0, \quad i = 1 : N$$

équilibre liquide-vapeur

$$h - h_m(T, P, x) = 0$$

enthalpie molaire liquide

$$H - H_m(T, P, y) = 0$$

enthalpie molaire vapeur

$$K_j - K_{m,j}(T, P, x, y) = 0, \quad i = 1 : N$$

modèle équilibre liquide-vapeur

$$\sum_{i=1}^N x_i - y_{in} - \sum_{i=1}^N y_i = 0$$

équilibre molaire balance

$$Vy_{in} = 0$$

contrainte

# équations :  $3N+6$

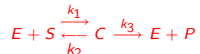
**Données** La pression  $P$  et l'énergie  $Q$  due au chauffage

On obtient une EDO sous contrainte.

Si on prend en compte les réactions chimiques liquide et/ou vapeur on obtient une EDA.

# La réaction enzymatique de base

Un substrat  $S$  se transforme en un produit  $P$  sous l'action d'un enzyme  $E$  en produisant un complexe  $C$  intermédiaire. La réaction  $E + S \rightleftharpoons C \rightarrow E + P$  est réversible.



Les vitesses de réactions vérifient  $k_1, k_2 \gg k_3$ . La modélisation produit l'EDA

$$\dot{E} = k_3 C - F_1$$

$$\dot{S} = -F_1$$

$$\dot{C} = -k_3 C + F_1$$

$$\dot{P} = k_3 C$$

$$0 = k_1 E S - k_2 C$$

Model Reduction of Chemical Reaction Systems using Elimination, F. Boulhier, M. Lefranc, F. Lemaire, P.-E. Morant.

# Exemple. EDA linéaires à coefficients constants

1-

$$N := \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ & 0 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 0 & 1 \\ & & & & 0 \end{pmatrix} \dot{x} = x \quad \text{i.e.,} \quad \begin{pmatrix} \dot{x}_2 = x_1 \\ \dot{x}_3 = x_2 \\ \vdots \\ \dot{x}_n = x_{n-1} \\ 0 = x_n \end{pmatrix}$$

2-Méthode de Kronecker-Weierstrass de  $E\dot{x} = Ax$

Le cas intéressant c'est celui d'une EDA régulière, i.e s'il existe  $\lambda$  tel que  $\det(\lambda E + A) \neq 0$ .

En utilisant la forme de Jordan de  $(\lambda E + A)^{-1}E$ , l'EDA  $E\dot{x} = Ax$  est équivalente successivement à :

$$\begin{aligned} (\lambda E + A)^{-1}E &= (I - \lambda(\lambda E + A)^{-1}E) \\ P \begin{pmatrix} J_0 & \\ & N_0 \end{pmatrix} P^{-1}\dot{x} &= P \begin{pmatrix} I - \lambda J_0 & \\ & I - \lambda N_0 \end{pmatrix} P^{-1}x \\ \begin{pmatrix} I & \\ & N \end{pmatrix} P^{-1}\dot{x} &= \begin{pmatrix} J & \\ & I \end{pmatrix} P^{-1}x \end{aligned}$$

avec  $J = J_0^{-1} - \lambda I$  et  $N = (I - \lambda N_0)^{-1}N_0$ .

Puisque  $N = Q \begin{pmatrix} N_1 & & \\ & \ddots & \\ & & N_{n-p} \end{pmatrix} P^{-1}$  où les  $N_j$  sont des matrices nilpotentes élémentaires, on est ramené au cas ci-dessus.

**Ce qu'il faut retenir : la résolution de l'EDA dépend de l'indice de nilpotence de  $N$  et non pas du rang de  $N$ .**



# Principe général de résolution d'une EDA

Le but est de transformer l'EDA

$$F(x, x') = 0$$

en une EDA dans laquelle  $x'$  est une fonction continue de  $x$ .

On dit qu'on a réduit l'EDA  $F(x, x') = 0$ .

On décrit rapidement trois méthodes de réduction.

- 1- Réduction par différentiation systématique
- 2- Méthode de Jacobi-Pryce
- 3- Méthode de type fonctions emboîtées

# Réduction par différentiation systématique

$$F_k(x, \dot{X}_k) = \begin{pmatrix} F(x, x') \\ \frac{d}{dt} F(x, x') \\ \vdots \\ \frac{d^k}{dt^k} F(x, x') \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad X_k = \begin{pmatrix} x \\ x' \\ \vdots \\ x^{k-1} \end{pmatrix}$$

L'indice de  $F$  est le plus indice  $k$  tel que  $F_k = 0$  permet d'écrire  $x'$  comme fonction continue de  $x$ .

L'identité  $F_k(x, \dot{X}_k) = 0$  implique

$$D_{\dot{X}_k} F_k(x, \dot{X}_k) D_x \dot{X}_k + D_x F_{k+1}(x, \dot{X}_k) = 0$$

Si  $D_{\dot{X}_k} F_k(x, \dot{X}_k)$  est de rang maximum alors  $\dot{X}_k$  est une fonction continue de  $x$ , et en particulier il en est de même pour  $x'$ .

Supposons que il existe une matrice  $R$  telle que

$$R D_{\dot{X}_k} F_k(x, \dot{X}_k) = \begin{pmatrix} I_n & 0 \\ 0 & T \end{pmatrix} \quad \text{"1-full rank"}$$

Donc les  $n$  premières lignes et colonnes de l'équation :  $R \left( D_{\dot{X}_k} F_k(x, \dot{X}_k) D_x \dot{X}_k + D_x F_{k+1}(x, \dot{X}_k) \right) = 0$  fournissent une équation du type  $x' = Ax$ .

La condition "1-full rank" est suffisante pour que  $x'$  soit fonction continue de  $x$ .

Remarques:

1- Complexité du calcul de la décomposition "1-full rank" est celle de la SVD.

2- Nombre d'équations :  $nk$

# Méthode de réduction de Jacobi-Pryce

On note  $f = (f_1, \dots, f_n)$  avec  $f_k := f(x, \dot{x})$  avec  $(x, \dot{x}) := (x_1^{m_1}, \dots, x_n^{m_n})$  et  $x_k^{m_k} := (x_1, \dots, x_k^{(m_k)})$ .

Le problème est de trouver des multi-indices  $c = (c_1, \dots, c_n)$  et  $d = (d_1, \dots, d_n)$  tels que l'on puisse réduire l'ensemble

$$\{(x, \dot{x}) : f(x, \dot{x}) = 0\}$$

à une variété différentiable du type :

$$\{x^d : f_1 = 0, \dots, f_1^{(c_1)} = 0, \dots, f_n = 0, \dots, f_n^{(c_n)} = 0\}$$

pour laquelle  $\dot{x}$  est une fonction continue de  $x$ .

Le critère naturel est de minimiser la dimension de cette variété qui est

$$\mu := \sum_{j=1}^n (d_j + 1) - \sum_{i=1}^n (c_i + 1) = \sum_{i=1}^n (d_i - c_i).$$

Pour ce faire on résoud le problème dual

$$\max_i \sum_{\sigma} a_{i\sigma(i)} \quad \text{où } (a_{ij}) \text{ est la matrice de valuation de } f$$

L'apport de Jacobi fut de donner un algorithme pour résoudre ce problème d'optimisation discrète qui porte le nom d'algorithme hongrois.

Borne de Jacobi :  $\mu$

# Condition pour que $x'$ soit une fonction continue de $x$

On introduit

$$J = \left( \frac{\partial f_i}{\partial x_j^{(d_j - c_i)}} \right)$$

avec la convention  $\frac{\partial f_i}{\partial x_j^{(d_j - c_i)}} = 0$  si  $x_j$  n'apparaît pas dans  $f_i$ .

## Théorème

*Si  $J$  est inversible alors  $x'$  est une fonction continue de  $x$ .*

Une conséquence de la détermination des multi-indices  $c$  et  $d$  est la possibilité de grouper les équations du système réduit sous une forme triangulaire par blocs.

## Application au pendule simple.

Matrice de valuation :  $\begin{pmatrix} 2 & -\infty & 0 \\ -\infty & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -\infty \end{pmatrix}$ . Borne de jacobi :  $\mu = 2$

$c = (0, 0, 2)$  et  $d = (2, 2, 0)$ .

$$f_3 := x_1^2 + x_2^2 - 1$$

$$f_3' / 2 := x_1 x_1' + x_2 x_2'$$

$$f_1 := x_1'' + x_1 x_3$$

$$f_2 := x_2'' + x_2 x_3 - g$$

$$f_3'' / 2 := x_1 x_1'' + x_2 x_2'' + x_1'^2 + x_2'^2$$

$F_1(x_1, x_2)$  ou  $F_1(x_2, x_1)$

$F_2(x_1, x_2, x_1', x_2')$  ou  $F_2(x_1, x_2, x_2', x_1')$

$F_3(x_1, x_2, x_1', x_2', x_1'', x_2'', x_3)$

On remarque que :  $F_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & x_1 \\ 0 & 1 & x_2 \\ x_1 & x_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1'' \\ x_2'' \\ x_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ -g \\ x_1'^2 + x_2'^2 \end{pmatrix}$

Or le déterminant de  $\begin{pmatrix} 1 & 0 & x_1 \\ 0 & 1 & x_2 \\ 2x_1 & 2x_2 & 0 \end{pmatrix}$  est égal à  $-2x_1^2 - 2x_2^2 = -2$ .

# Réduction par élimination. Cas des EDA à coefficients constants.

On considère la décomposition en valeur singulière de  $E = U\Sigma V^T$ . De sorte que l'EDA  $E\dot{x} = Ax$  se réduit à

$$\Sigma \dot{y} = U^T A V y, \quad y = V^T x.$$

Ce qui peut s'écrire

$$\begin{pmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \dot{y} = \begin{pmatrix} A_1 & A_2 \\ B_1 & B_2 \end{pmatrix} y \quad \begin{array}{l} p \text{ lignes} \\ n - p \text{ lignes} \end{array}$$

Si l'EDA est régulière la matrice  $(B_2, B_2)$  est de rang plein. Il existe une matrice de permutation  $P$  telle que  $Py = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$  et  $(D_1, D_2) = P(B_1, B_2)$  avec  $D_2$  inversible. De sorte que l'EDA

$$\begin{pmatrix} E_1 & E_2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{u} \\ \dot{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_1 & C_2 \\ D_1 & D_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad \begin{array}{l} p \text{ lignes} \\ n - p \text{ lignes} \end{array}$$

se réduit à

$$\begin{aligned} v &= -D_2^{-1} D_1 v \\ (E_1 - E_2 D_2^{-1} D_1) u &= (C_1 - C_2 D_2^{-1} D_1) u \end{aligned}$$

On montre que si l'EDA  $E\dot{x} = Ax$  est régulière d'indice  $k$  alors l'EDA  $(E_1 - E_2 D_2^{-1} D_1) u = (C_1 - C_2 D_2^{-1} D_1) u$  est régulière d'indice  $k - 1$ .

# Réduction par élimination. Cas des EDA $E(x)\dot{x} = A(x)$ .

L'EDA du pendule s'écrit

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= x_3 \\ \dot{x}_2 &= x_4 \\ \dot{x}_3 &= -x_1 x_5 \\ \dot{x}_4 &= -x_2 x_5 + g \\ 0 &= x_1^2 + x_2^2 - 1\end{aligned}$$

De  $x_2 = \varphi(x_1)$  on a  $\dot{x}_2 = \varphi'(x_1)\dot{x}_1$ .

On déduit des équations  $x_4 = \varphi'(x_1)x_3$  et  $x_2\dot{x}_3 - x_1\dot{x}_4 = -x_1g$  :

$$\begin{aligned}\varphi'(x_1)\dot{x}_1 &= x_4 \\ (1 + x_1)\dot{x}_4 &= x_1g - \varphi'(x_1)x_4\end{aligned}$$

**Cas  $E(x)\dot{x} = A(x)$**

En écrivant  $A(x) = U(x)\Sigma(x)V^T$  la réduction de  $E(x)\dot{x} = A(x)$  est de la forme

$$(E_1(u, \varphi(u)) + E_2(u, \varphi(u)))\dot{u} = C(u, \varphi(u))$$

avec  $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = Px$  et  $v = \varphi(u)$ .

# Le programme LEDA : la partie algèbre différentielle

## Théorie de l'index et formes normales

François Ollivier : différentes études sur la borne de Jacobi et la notion d'index.

## Kronecker différentiel

Adaptater au cadre différentiel, l'algorithme de Kronecker développé par Grégoire Lecerf pour la résolution des systèmes polynomiaux. En lien avec les travaux du groupe TERA (Turbo evaluation rapid algorithms)



## Conditionnement d'une EDA

Cas des EDA linéaires et non linéaires

Traitement des singularités et des discontinuités

Détermination du point initial pour les EDA

Modélisation des réactions chimiques dans les procédés de distillation

Modélisation en biologie cellulaire

L'interaction entre les gènes est modélisée par des systèmes de réactions chimiques dans lesquelles est pris en compte la vitesse de ces réactions.

Intégration de BLAD dans Mathemagix

Lien avec l'ANR MAGIX

Implantation de FreeMABSys Boulrier, Lemaire, Sedoglavic

outil symbolique-numérique eXMLS du LGC Karim Alloula

BLAD : Bibliothèque Lilloise d'Algèbre Différentiel, Boulrier

MABSys : Modeling and Analysis of Biological Systems, (Asli Ürgüplu)

**P. Kunkel, V.L. Mehrmann**, Differential-algebraic equations : analysis and numerical solution, EMS, 2006.

**R. Riaza**, Differential-Algebraic Systems. Analytical Aspects and Circuit Applications, World Scientific 2008.

**Joseph Ritt**, Differential Algebra. Dover Publ. 1950.

**J. D. Pryce**, A simple Structural Analysis method for DAES, BIT, 2001, Vol. 41, 2, pp. 364-394.

page Web de **François Ollivier**

<http://www.lix.polytechnique.fr/~ollivier/JACOBI/jacobiEngl.htm>

# Quelques logiciels

**DAETS**, (C++), <http://www.cas.mcmaster.ca/~nedialk/daets/> Nediakov

**DAESOLVE**, (Fortran95), <http://www.netlib.org/ode/daesolve/> Rheinboldt

**GENDA**, <http://www.math.tu-berlin.de/numerik/mt/NumMat/Software/GENDA/> Kunkel,Merhmann

**KRONECKER** <http://www.math.uvsq.fr/~lecerf/software/kronecker/index.html> Lecerf  
<http://magma.maths.usyd.edu.au/magma/>

**SUNDIALS**,(C++), <https://computation.llnl.gov/casc/sundials/main.html> Hindmarsh,Ratu

**Test Set for IVP Solvers**,(Fortran77), VODE, BIM,GAMD,MEDFDAE,RADAU,RADAU5,

DASSL,MEBDFI,PSIDE, <http://pitagora.dm.uniba.it/~testset/>



<http://www.lix.polytechnique.fr/~ollivier/LEDA/>