

Sujet de Stage Master 2 - 2018

Encadrement Romain Yvinec¹

¹ Equipe BIOS - PRC INRA Tours

Etude d'un modèle de coagulation-fragmentation avec compétition de structures

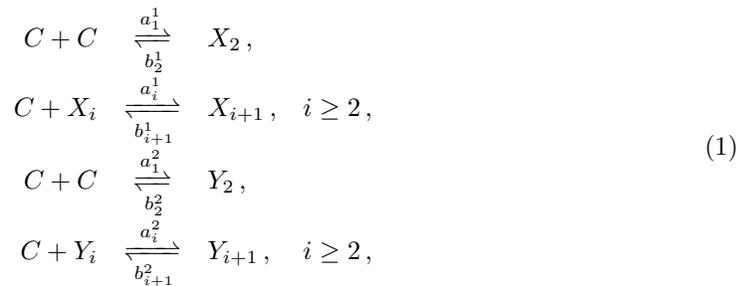
Le but de ce stage sera d'étudier un modèle de coagulation-fragmentation faisant intervenir deux structures différentes de polymères, en compétition pour le même pool de monomères.

Ce modèle est motivé par des observations biologiques. Dans des expériences de polymérisation spontanée de protéines PRION, on met en évidence l'apparition de structure spatiale distinctes, avec une hétérogénéité d'une expérience à l'autre, qui pourrait expliquer (en partie) la variabilité des cinétiques d'apparition de polymères (temps de nucléation, vitesse maximale de polymérisation).

Les objectifs du stage seront d'étudier mathématiquement ce modèle en caractérisant les états stationnaires, ainsi que le type de comportement transitoire possible.

On cherchera à caractériser la structure la plus stable en fonction des paramètres du modèle. On se demandera en particulier quel rôle peut avoir une phase de nucléation aléatoire dans l'émergence d'une structure moins stable au dépend d'une autre plus stable. On étudiera une version aléatoire (processus de Markov) et une version déterministe (système d'équations différentielles ordinaires). On utilisera la simulation numérique comme guide dans l'analyse mathématique, ainsi que des modèles simplifiés, permettant des calculs analytiques, avec des comportements "suffisamment proche" du modèle original.

Le modèle utilisé sera un version du modèle de Becker-Döring pour deux structures, et peut se représenter par l'ensemble de réactions biochimiques suivantes:



où X_i and Y_i représentent les agrégats de taille i de structures différentes, C représente le monomère (taille 1), a_i^1, a_i^2 sont les taux d'agrégation pour les structures X et Y respectivement, et b_i^1, b_i^2 sont les taux de fragmentation pour les structures X et Y respectivement.

La représentation mathématique de ces réactions amènent à considérer soit une chaîne de Markov dans un espace d'état finit (version aléatoire, nombre fini de particules) ou un système infini d'équations différentielles ordinaires (version déterministe, concentration de particules).

Nous regarderons plusieurs choix naturels de coefficients

- Coefficients constant en taille: a_1, b_1, a_2, b_2 , avec $a_1 \simeq a_2$ et $b_1 \simeq b_2$ mais $a_1/b_1 > a_2/b_2$. La structure X est donc plus stable que Y
- Coefficients constant par morceaux (type heaviside), avec une barrière de nucléation ($a_i < b_i$ pour $i < i_0$ et $a_i > b_i$ pour $i \geq i_0$).
- Coefficients linéaire en taille, avec ou sans barrière de nucléation.
- Et enfin le cas de coefficients plus "physique" voir par exemple [3].

Nous adresserons alors les questions suivantes:

- Calculer les états d'équilibre, prouver la convergence en temps long.
- Peut-on avoir émergence d'une structure pendant une période transitoire, qui ne soit (pas ou très peu) présente à l'équilibre ?
- Une structure moins stable thermodynamiquement peut-elle émerger dans un modèle aléatoire? A quelle condition, et quelle serait sa durée d'existence moyenne?
- Lors d'expérience d'ensemencement répétées (on rajoute des monomères après avoir atteint un équilibre), une structure moins stable thermodynamiquement peut-elle émerger au dépend de la structure plus stable?

Ce travail se basera sur des travaux réalisés sur un système déterministe très proche ([5]), sur des travaux sur le système déterministe avec une structure [1, 3, 4] et sur le modèle aléatoire avec une structure ([2, 6, 7]).

REFERENCES

- [1] J. M. Ball, J. Carr, and O. Penrose. The Becker-Döring Cluster Equations: Basic Properties and Asymptotic Behaviour of Solutions. *Commun. Math. Phys.*, 104(4):657–692, 1986.
- [2] Erwan Hingant and Romain Yvinec. Deterministic and Stochastic Becker-Döring equations: Past and Recent Mathematical Developments. *arXiv:1609.00697 [math-ph]*, September 2016. arXiv: 1609.00697.
- [3] B Niethammer. On the Evolution of Large Clusters in the Becker-Döring Model. pages 115–155, 2003.
- [4] Oliver Penrose. Metastable States for the Becker-Döring Cluster Equations. *Commun. Math. Phys.*, 124:515–541, 1989.
- [5] Jonathan A. D. Wattis. A Becker-Döring model of competitive nucleation. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 32(49):8755, 1999.
- [6] Romain Yvinec, Samuel Bernard, Erwan Hingant, and Laurent Pujo-Menjouet. First passage times in homogeneous nucleation: Dependence on the total number of particles. *The Journal of Chemical Physics*, 144(034106), 2016.
- [7] Romain Yvinec, Maria R. D'Orsogna, and Tom Chou. First passage times in homogeneous nucleation and self-assembly. *The Journal of Chemical Physics*, 137(24):244107, December 2012.