

Une illustration des possibilités du calcul formel en automatique*

François OLLIVIER**

L'automatique et la modélisation sont des domaines privilégiés quant aux possibilités offertes par le calcul formel. En effet, les propriétés des modèles peuvent souvent se traduire en termes algébriques simples, ce qui permet alors de les tester en utilisant des méthodes désormais classiques, comme le calcul de bases standard ou d'ensembles caractéristiques.

On ne prétend pas donner ici un panorama d'ensemble de l'état de l'art en la matière, mais seulement une illustration des acquis et des développements possibles. Les références données à des travaux d'automaticiens ne seront donc que partielles, et doivent beaucoup aux contacts fructueux que j'ai eu avec les membres du Laboratoire des Signaux et Systèmes à Supélec, parmi lesquels je tiens à remercier particulièrement Michel Fliess et Eric Walter, qui ont tout deux participé activement au développement du calcul formel en automatique.

Parti de besoins simples, comme la nécessité de manipuler efficacement des objets algébriques: matrices ou développements en série, des besoins spécifiques on rapidement nécessité l'écriture de programmes adaptés, par exemple pour la manipulation de séries non-commutatives. Une tendance récente, liée à un emploi croissant de l'algèbre différentielle, devrait conférer un intérêt accru à cette théorie déjà ancienne, mais encore peu exploitée, et absente des principaux systèmes de calcul formel.

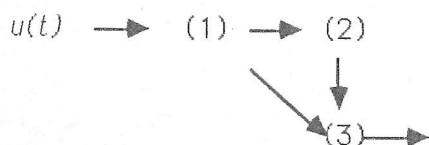
La modélisation consiste à décrire l'évolution d'un processus par une loi mathématique. Celui-ci peut revêtir des aspects divers: le mouvement d'un robot, mais aussi une réaction chimique, ou la prise d'un médicament. Deux approches peuvent être envisagées selon le but poursuivi. Si l'on s'intéresse au contrôle, il suffit de déterminer un modèle ayant une bonne concordance avec les courbes expérimentales.

En revanche, pour mieux appréhender la réalité physique, on construira un modèle intégrant les présupposés d'une théorie. On souhaite alors savoir, avant le stade expérimental, quelles informations pourrons en être tirées. L'exemple qui suit se place dans cette problématique.

LE PROBLÈME DE L'IDENTIFIABILITÉ

Un exemple : l'effet de premier passage d'un médicament

On étudie le passage d'un médicament dans l'organisme, et son élimination, supposés décrits par le schéma ci-dessous.



Un médicament, absorbé à la vitesse $u(t)$ parvient dans le système digestif (1) et passe dans la circulation générale (2), où il se dégrade en un métabolite (3), qui est éliminé par voie urinaire. Mais le médicament peut aussi être dégradé en métabolite par les enzymes hépatiques avant d'atteindre la circulation générale. Ce phénomène est connu sous le nom d'effet de premier passage.

On en rend compte par les équations suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \begin{pmatrix} -\theta_1 - \theta_2 & 0 & 0 \\ \theta_1 & -\theta_3 & 0 \\ \theta_2 & \theta_3 & -\theta_4 \end{pmatrix} x + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} u(t) \\ y &= \begin{pmatrix} 0 & \theta_6 & 0 \\ 0 & 0 & \theta_7 \end{pmatrix} y \quad x(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

*Avec le soutien du PCR Mathématiques et Informatique

**Laboratoire d'Informatique de LIX (Equipe Algèbre et Géométrie Algorithmiques, Calcul Formel, SDI CNRS n° 6176 et Centre de Mathématiques, Unité de Recherche Associée au CNRS n°D0169)
Ecole Polytechnique
F-91128 Palaiseau Cedex

On a choisi des vitesses de réaction linéaires en fonctions des quantités de médicament dans le système digestif (x_1), dans la circulation générale (x_2), et de métabolite (x_3).

Les constantes de vitesse $\theta_1, \dots, \theta_7$, correspondent respectivement à chacune des réactions indiquées sur le schéma, et les mesures effectuées, y_1 et y_2 aux concentrations en médicament et métabolite supposées proportionnelles à (x_2) et (x_3). Enfin, les conditions initiales, nulles, signifient qu'aucune trace de médicament ou de métabolite n'est présente au début de l'expérience. La donnée d'un tel système définit une structure, ou un modèle paramétré $M(\theta)$.

Motivations et définition du problème

La mesure directe des paramètres du système n'est pas envisageable. On peut toutefois souhaiter déterminer leurs valeurs afin de mieux comprendre l'action du médicament et du métabolite qui ont chacun des propriétés spécifiques.

Soit $M(\theta)$ le modèle «correspondant au processus réel», on pourra déterminer θ si c'est le seul modèle pour lequel on ait le même comportement entrée-sortie, c'est-à-dire les mêmes valeurs expérimentales. Notant par $C(\theta)$ le comportement entrée-sortie, il faut vérifier que $C(\theta) = C(\theta'') \Rightarrow \theta = \theta''$.

Sous cette forme, on désespère de pouvoir mettre en œuvre une méthode effective. Mais on peut néanmoins tourner la difficulté en remplaçant la fonction C , par une fonction plus aisée à manipuler et en un sens équivalente, parfois appelée résumé exhaustif.

Dans le cas de structures linéaires stationnaires, avec conditions initiales nulles, de la forme :

$$\begin{aligned} dx/dt &= A(\theta)x + B(\theta)u(t) \\ y &= C(\theta)x \quad x(0) = 0, \end{aligned}$$

on définit la matrice de transfert comme étant la matrice $C(A - \lambda I)^{-1}B$. Utilisant la transformée de Laplace, on se convainc aisément que l'égalité des comportements entrée-sortie est équivalente à celle des matrices de transfert.

Le calcul de cette matrice est une tâche aisée en s'aidant de n'importe quel système de calcul formel. Ayant mis les fractions présentes sous forme canonique, on obtient un vecteur de coefficients $\rho(\theta)$. Il ne reste plus qu'à tester que $\rho(\theta) = \rho(\theta') \Rightarrow \theta = \theta'$.

Il suffit donc de résoudre un système algébrique, qui peut être simplifié, en supposant que le «modèle réel» $M(\theta)$ est générique. On parle alors d'identifiabilité structurelle. En termes algébriques, on va tester que l'application polynomiale admet un inverse rationnel à gauche, ou que les extensions de corps $R(\rho)$ et $R(\theta)$ sont égales.

Le problème résolu

Revenons à l'exemple précédent. Les coefficients obtenus par le calcul de la matrice de transfert sont :

$$\begin{aligned} &\theta_1 \theta_6, \quad \theta_2 \theta_7, \quad \theta_7 \theta_3 (\theta_1 + \theta_2), \\ &\theta_1 + \theta_2 + \theta_7, \quad \theta_3 (\theta_1 + \theta_2), \\ &\theta_1 + \theta_2 + \theta_3 + \theta_4, \\ &\theta_3 (\theta_1 + \theta_2) + \theta_4 (\theta_1 + \theta_2 + \theta_3), \quad \theta_4 \theta_3 (\theta_1 + \theta_2) \end{aligned}$$

Calculant la base standard de l'idéal $(\rho(\theta') - \rho(\theta))$ dans l'anneau $R(\theta)[\theta']$ -ou même par un calcul à la main !- on s'assure que l'extension engendrée par ces polynômes est :

$$R(\theta_2, \theta_4, \theta_7, \theta_1 + \theta_2 + \theta_3, \theta_3 (\theta_1 + \theta_2), \theta_1 \theta_6).$$

Sous cette forme, on constate que les valeurs de θ_2 , θ_4 et θ_7 pourront toujours être déterminées de manière unique. En revanche, les autres paramètres pourront aussi prendre les valeurs :

$$\theta_1' = \theta_3 - \theta_2, \quad \theta_3' = \theta_1 + \theta_2, \quad \theta_6' = \theta_1 \theta_6 (\theta_3 - \theta_2).$$

Une discussion s'impose alors, car les valeurs des paramètres sont nécessairement réelles positives.

Si $\theta_3 < \theta_2$, il n'y a donc qu'une unique solution acceptable.

Plutôt que d'envisager une résolution complètement automatique du problème, dans le cas où un nombre fini de solutions distinctes sont algébriquement possibles, il faut laisser aux spé-

cialistes le soin de trancher, éventuellement pour des raisons difficiles à formaliser, comme l'ordre de grandeur du résultat attendu : il est ici probable que θ_6 et θ_7 , bien que distincts en général, sont du même ordre.

Il est possible d'obtenir automatiquement une description des différentes solutions à partir de la base standard calculée, ce qui permet de savoir si elles sont en nombre fini ou infini, de majorer leur nombre etc... et de faciliter une résolution numérique finale, au vu de laquelle le praticien pourra conclure, grâce à son expérience.

ALLER PLUS LOIN AVEC L'ALGÈBRE DIFFÉRENTIELLE

Un besoin de généralité

On vient d'illustrer une technique applicable à certaines structures linéaires. D'autres existent, reposant ou non sur le calcul d'un "résumé". Mais si dans de nombreux cas on peut valablement se contenter d'une approximation linéaire, cela n'est pas toujours possible. On peut aussi souhaiter travailler sur des structure non polynomiales du type :

$$\begin{aligned} x'' &= -\theta_1 \sin x + \theta_2 u(t), \\ y &= \cos x, \quad x(0) = x'(0) = 0 \end{aligned}$$

L'algèbre différentielle apparaît comme l'outil théorique idéal pour formaliser ce type de problèmes... et les résoudre ! De fait, les fondateurs de la théorie ont largement utilisé des méthodes de démonstration effectives, qu'on peut aisément traduire en des programmes de calcul formel.

Un avant goût d'algèbre différentielle

Cette théorie a des racines relativement anciennes, puisqu'on peut la faire remonter aux travaux de Riquier, puis de Janet ([J] 1920). Elle a ensuite été développée et formalisée par Ritt ([R1] 1932 et [R2] 1950), et par ses élèves dont Kolchin ([Ko]). Spencer a développé une approche distincte avec la théorie formelle des systèmes d'équa-

tions aux dérivées partielles, prolongée par les travaux de Pommaret. En dépit d'un certain nombre de difficultés propres, qui en rendent l'abord difficile, l'algèbre différentielle peut être considérée comme une généralisation de l'algèbre commutative classique, considérant des anneaux munis d'une ou plusieurs dérivations commutant entre elles. La théorie des D-modules, non commutative, aborde plutôt le point de vue dual, et il n'y a pas d'équivalence entre les deux approches sauf dans le cas linéaire. La méthode de résolution des systèmes repose sur une technique de calcul d'ensembles caractéristiques, souvent connue de la communauté du Calcul Formel sous le nom de méthode de Wu, ce dernier l'ayant popularisée dans le cas algébrique pour la démonstration automatique des théorèmes de géométrie.

Un exemple d'application

Mieux vaut choisir un exemple élémentaire, comme celui donné ci-dessus : les calculs deviennent vite démoniaques ! Il faut d'abord se ramener à un problème algébrique différentiel, et pour cela faire disparaître les fonctions sinus et cosinus. C'est possible, car ces fonctions sont elles-mêmes solutions d'équations différentielles simples. On peut donc utiliser le système équivalent suivant :

$$\begin{aligned}x_1'' &= \theta_1 x_2 + \theta_2 u(t), & x_2' &= x_1' x_3, & x_3' &= -x_1' x_2, \\y &= x_3, \\x_1(0) &= x_1'(0) = x_2(0) = 0, & x_3(0) &= 1.\end{aligned}$$

De manière grossière, on peut décrire un ensemble caractéristique comme un système triangulaire, permettant de résoudre successivement une équation après l'autre. Un tel ensemble n'est pas unique et dépend de l'ordre qu'on se donne sur les variables et leurs dérivées.

Faute d'avoir achevé l'implantation de mon programme, j'ai calculé à la main un ensemble caractéristique pour un ordre tel que $y < x_3 < x_2 < x_1$:

$$\begin{aligned}(y'')^2 - ((4\theta_1 + \theta_1\theta_2 u)y' \\ - \theta_2 u y' + \theta_2 u') y'' + \dots = 0, \\x_3 - y = 0, \\(\theta_1\theta_2 u y' + \theta_2 u') x_2 + y'' - 2\theta_1 (y')^2 \\ + \theta_2^2 u^2 y = 0, \\(\theta_1\theta_2 u y' + \theta_2 u') x_1 - \theta_1 y'' + 2\theta_1^2 (y')^2 \\ - \theta_1\theta_2^2 u^2 y' - \theta_1\theta_2^2 u^2 y - \theta_2^2 u u' = 0.\end{aligned}$$

Le premier polynôme, assez volumineux, ne dépend que de y . On n'en a donné que quelques termes, qui vont nous suffire. En effet, ce polynôme donne une condition qui doit être satisfaite par le comportement entrée-sortie. Il permet donc de vérifier qu'un modèle décrit bien la réalité. Réciproquement, l'expérience permet de connaître ce polynôme à un facteur près. En le rendant unitaire, comme c'est le cas ici, les coefficients des monômes en u , y , et leurs dérivées forment donc un résumé exhaustif $\rho(\theta)$, or θ_1 et θ_2 y apparaissent directement : la structure est donc identifiable, ce qui était ici presque immédiat. Le reste du calcul donne d'autres informations utiles, permettant de retrouver le vecteur d'état x à partir de la mesure.

Problèmes et perspectives

La simplicité apparente de cet exemple masque quelques difficultés. D'une part, il semble qu'on ne sache pas calculer un ensemble caractéristique sans quelques hypothèses techniques, aisément satisfaites en automatique et qu'on n'a pas détaillées. Mais surtout, la conclusion finale suppose que la fonction $x(t)$ définie par les conditions initiales est une solution générique du système. Donnons un exemple pour éclairer cette notion abstraite.

La structure

$$\begin{aligned}x'' - (\theta_1 + \theta_2) x' + \theta_1\theta_2 x &= 0, \\y &= x, & x(0) &= 1, & x'(0) &= \theta_1.\end{aligned}$$

contient un vice caché. En effet, la seule variable d'état étant directement mesurée, on s'attend à ce qu'elle soit identifiable. C'est la conclusion à laquelle on parviendrait en appliquant sans précaution la méthode évoquée

ci-dessus, sans oublier les conditions initiales, qui donnent la valeur de θ_1 . Mais x est aussi solution du polynôme plus simple $x' - \theta_1 x$ dans lequel θ_2 n'intervient pas, ce qui montre que ce paramètre n'est pas identifiable.

La conclusion correcte est donc que cette structure n'est pas identifiable, mais surtout qu'il faut lui substituer une nouvelle structure plus pertinente, et identifiable. Ceci donne un aperçu des difficultés théoriques qui peuvent surgir : il n'est pas évident de résoudre ce type de problèmes dans un cas plus complexe.

On conçoit aussi qu'il faille éliminer au maximum les calculs inutiles, et opter pour des stratégies optimales si l'on veut aboutir en un temps raisonnable, ou simplement, si le problème est un peu ardu, parvenir au résultat dans les limites de la mémoire disponible. L'amélioration des algorithmes passe par l'évaluation de leur complexité, qui n'en est encore qu'à ses balbutiements dans le cas différentiel et ne pourra se fonder que sur des avancées théoriques notables.

On peut envisager l'utilisation de ces techniques pour tester d'autres propriétés structurelles comme la discernabilité, la commandabilité ou l'observabilité, ainsi que l'extension à des structures aux dérivées partielles. Resterait à développer des méthodes pour secourir l'utilisateur malchanceux, dont la structure ne satisfait pas les propriétés espérées, et qui souhaite la modifier en respectant des contraintes impératives : par exemple, éviter des mesures physiquement irréalisables.

CONCLUSION

Les possibilités du calcul formel en automatique sont vastes et encore peu exploitées. Dans ce domaine par nature pluridisciplinaire, des problèmes concrets d'origines variées peuvent motiver un effort théorique profond, aux applications très larges.

Ces travaux n'atteindront pleinement leur but que s'ils débouchent sur des méthodes utilisables par les non-spécialistes au prix d'un investissement acceptable. Cette ambition constitue à mon sens un des attraits en même

temps qu'une des difficultés de fond du Calcul Formel. Un "logiciel d'aide à la modélisation", suffisamment efficace et convivial, serait un outil utile à de nombreux chercheurs.

BIBLIOGRAPHIE

[D] S. DIOP

Elimination in Control Theory

à paraître dans Mathematics of control, Signals and Systems

[F] M. FLIESS

Automatique et corps différentiels

Forum Math., 1, 227—238, 1989

[Ja] M. JANET

Systèmes d'équations aux dérivées partielles

J. de Math., 6ème série, tome III, 1920

[Ko2] E. R. KOLCHIN

Differential Algebra and Algebraic Groups

Academic Press, New-York, 1973

[P] J.-F. POMMARET

Problèmes formels en théorie du contrôle aux dérivées partielles

C.R.A.S. Paris, 308, I, 1989

[Ri1] J.F. RITT

Differential Equations from the Algebraic Standpoint

Amer. Math. Soc. Colloq. Publ., vol. 14, A.M.S., New-York, 1932

[Ri2] J.F. RITT

Differential algebra

Amer. Math. Soc. Colloq. Publ., vol. 33, A.M.S., New-York, 1950

[W] E. WALTER

Identifiability of State Space Models

Lect. notes in Biomath. n°46, Springer 1982