Applications des mathématiques en biologie

L'objectif principal de ce module est de donner aux étudiants un aperçu des applications de la théorie du contrôle optimal aux modèles biologiques.

Ouvrage de référence :

Suzanne Lenhart & John T. Workman, Optimal Control Applied to Biological Models, Chapman & Hall/CRC, London, 2007.

Contrôle Optimal pour des systèmes décrits par des équations différentielles ordinaires

1.1. Problèmes de contrôle optimal de base

On se donne deux réels $t_0, t_1 \in \mathbb{R}$ avec $t_0 < t_1$, une fonction $f : [t_0, t_1] \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$

On considère l'équation différentielle ordinaire suivante :

Pour une fct $u : [t_0, t_1] \longrightarrow \mathbb{R}$ donnée satisfaisant certaines propriétés qui seront précisées ultérieurement, trouver $y : [t_0, t_1] \longrightarrow \mathbb{R}$ telle que

$$(1.1) \quad \begin{cases} y'(t) = f(t, y(t), u(t)) \quad , t \in [t_0, t_1] \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$$

Le système (1.1) est appelé système de contrôle,

$y(t)$ s'appelle l'état du système (1.1),

et $u(t)$ s'appelle le contrôle du système (1.1).

Soient U_{ad} un ensemble des fonctions admissibles pour le contrôle u et $D \subset \mathbb{R}$ un ensemble cible pour $y(t_1)$, c.c.d. $y(t_1) \in D$.

Soit J une fonction dépendante de $y(\cdot)$ et $u(\cdot)$ appelée fonction coût qui sera de la forme

$$(1.2) \quad J(y, u) = \int_{t_0}^{t_1} g(t, y(t), u(t))\, dt + \varphi(y(t_1)).$$

avec $$J : [t_0, t_1] \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$$

et $$\varphi : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$$

des fonctions données.

Le problème de contrôle optimal consiste à trouver parmi toutes les paires de fonctions $(y(\cdot), u(\cdot))$ satisfaisant le système (1.1) avec $u \in \mathcal{U}_{ad}$ et $y(t_1) \in D$ celles qui minimisent (ou maximisent) la fonction J donnée par (1.2). Un tel $u(t)$ est appelé contrôle optimal.

On peut écrire ce problème sous la forme

$$(1.3) \quad \min (\text{ou } \max) \left\{ \int_{t_0}^{t_1} g(t, y(t), u(t))\, dt + \varphi(y(t_1)) : \; y' = f(t, y, u),\ y(t_0) = y_0,\ u \in \mathcal{U}_{ad},\ y(t_1) \in D \right\}$$

C'est un problème d'optimisation avec contraintes

$$\underset{(y,u) \in CTR}{\text{opt}}\ J(y, u)$$

où $\text{opt} = \min$ ou $\max$

et $$CTR = \left\{ (y, u) : y' = f(t, y, u),\ y(t_0) = y_0,\ u \in \mathcal{U}_{ad},\ y(t_1) \in D \right\}.$$

1.1.1. Terminologie

(i) Si φ la fonction constante nulle, on dit que le système est à observation distribuée.

(ii) Si φ n'est pas la fonction nulle, on dit que le système est à observation finale.

(iii) Si $D = \mathbb{R}$, on dit que le système est sans contrainte sur l'état final.

(iv) Si $D \subsetneq \mathbb{R}$, on dit que le système est avec contrainte sur l'état final.

1.1.2. Remarque

- Dans ce chapitre, on suppose que le contrôle $u(.)$ est continue par morceaux et que les fonctions f et g sont continûment différentiables par rapport à leurs arguments. Alors le problème de Cauchy

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t), u(t)) \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$$

admet une solution unique ~~absolument~~ au sens de Carathéodory, c'est à dire ~~continue~~ pa absolument continue sur $[t_0, t_1]$

- et dans ce cas le problème de contrôle optimal décrit ci-dessus est équivalent à

~~brin~~ $\text{opt}\{J(u),\ u \in U_{ad}\}$.

1.9. Conditions nécessaires d'optimalité

Notre objectif dans ce paragraphe est d'établir les conditions nécessaires qu'un contrôle optimal et l'état correspondant doivent satisfaire. Supposons qu'un contrôle optimal existe, et soient u^* un tel contrôle et y^* l'état correspondant.

Alors

$$J(u) \leq J(u^*)$$

pour tout u, si on a un problème de maximisation.

Soit h une fonction continue par morceaux croissante et soit $\varepsilon \in \mathbb{R}$ une constante.

Alors

$$u^\varepsilon(t) = u^*(t) + \varepsilon h(t)$$

est un autre contrôle continue par morceaux.

Soit y^ε l'état correspondant à u^ε,

alors

$$\frac{d}{dt} y^\varepsilon(t) = f(t, y^\varepsilon(t), u^\varepsilon(t))$$

quand u^ε est continue. Puisque toutes les trajectoires démarrent de la même position, on prend $y^\varepsilon(t_0) = y_0$

Remarquons que $u^\varepsilon(t) \longrightarrow u^*(t)$ quand $\varepsilon \to 0$.

En plus pour tout t

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon} u^{\varepsilon}(t)\Big|_{\varepsilon=0} = h(t)$$

A cause des hypothèses faites sur f, on a

$$y^{\varepsilon}(t) \longrightarrow y^{*}(t) \quad \text{qd } \varepsilon \longrightarrow 0$$

pour chaque t fixé et la dérivée $\frac{\partial}{\partial \varepsilon} y^{\varepsilon}(t)\Big|_{\varepsilon=0}$ existe pour chaque t.

La fonction coût en u^{ε} est

$$J(u^{\varepsilon}) = \int_{t_0}^{t_1} g(t, y^{\varepsilon}(t), u^{\varepsilon}(t))\, dt$$

On introduit maintenant la fonction adjointe λ.

Soit $\lambda(\cdot)$ une fct dérivable par morceaux sur $[t_0, t_1]$ à déterminer.

D'après le théorème fondamental du calcul différentiel, on a

$$\int_{t_0}^{t_1} \frac{d}{dt}\left[\lambda(t) y^{\varepsilon}(t)\right] dt = \lambda(t_1) y^{\varepsilon}(t_1) - \lambda(t_0) y^{\varepsilon}(t_0)$$

ce qui implique

$$\int_{t_0}^{t_1} \frac{d}{dt}\left[\lambda(t) y^{\varepsilon}(t)\right] dt + \lambda(t_0) y_0 - \lambda(t_1) y^{\varepsilon}(t_1) = 0$$

Ajoutant cette expression à $J(u^{\varepsilon})$, on trouve

$$J(u^\varepsilon)=\int_{t_0}^{t_1}\Big[g(t,y^\varepsilon(t),u^\varepsilon(t))+\lambda'(t)y^\varepsilon(t)$$
$$+\lambda(t)f(t,y^\varepsilon(t),u^\varepsilon(t))\Big]dt+\lambda(t_0)y_0-\lambda(t_1)y^\varepsilon(t_1).$$

Puisque le maximum de J par rapport à u se produit en u^*, alors

$$0=\frac{d}{d\varepsilon}J(u^\varepsilon)\Big|_{\varepsilon=0}=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{J(u^\varepsilon)-J(u^*)}{\varepsilon}$$

Du théorème de convergence dominée de Lebesgue, on obtient

$$0=\int_{t_0}^{t_1}\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\Big[g(t,y^\varepsilon(t),u^\varepsilon(t))+\lambda'(t)y^\varepsilon(t)+$$
$$\lambda(t)f(t,y^\varepsilon(t),u^\varepsilon(t))\Big]dt\Big|_{\varepsilon=0}$$

$$-\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\lambda(t_1)y^\varepsilon(t_1)$$

ou

$$\int_{t_0}^{t_1}\Big[g_y\frac{\partial y^\varepsilon}{\partial\varepsilon}+g_u\frac{\partial u^\varepsilon}{\partial\varepsilon}+\lambda'(t)\frac{\partial y^\varepsilon}{\partial\varepsilon}+\lambda(t)\Big(f_y\frac{\partial y^\varepsilon}{\partial\varepsilon}+$$
$$f_u\frac{\partial u^\varepsilon}{\partial\varepsilon}\Big)\Big]\Big|_{\varepsilon=0}dt-\lambda(t_1)\frac{\partial y^\varepsilon}{\partial\varepsilon}(t_1)=0 \quad (1.4)$$

avec $g_y=\frac{\partial g}{\partial y}$, $g_u=\frac{\partial g}{\partial u}$, $f_y=\frac{\partial f}{\partial y}$, $f_u=\frac{\partial f}{\partial u}$ et les arguments de g_y, g_u, f_y et f_u sont $(t,y^*(t),u^*(t))$

Arrangeant les termes dans (1.4) on obtient

$$(1.5) \int_{t_0}^{t_1} \left[\left(g_y + \lambda(t) f_y + \lambda'(t) \right) \frac{\partial y^\varepsilon}{\partial \varepsilon}(t) \Big|_{\varepsilon=0} + \left(g_u + \lambda(t) f_u \right) h(t) \right] dt$$

On choisit la fct adjointe $\lambda(t)$ de telle façon que le coefficient de $\frac{\partial y^\varepsilon}{\partial \varepsilon}(t) \Big|_{t=0}$ soit nulle.

Alors $\lambda(.)$ satisfait

$$\lambda'(t) = -\left[g_y(t, y^*(t), u^*(t)) + \lambda(t) f_y(t, y^*(t), u^*(t)) \right]$$

(équation adjointe)

et la condition au limite

$$\lambda(t_1) = 0 \qquad \text{(condition de transversalité)}.$$

Maintenant (1.5) se réduit à

$$\int_{t_0}^{t_1} \left[g_u(t, y^*(t), u^*(t)) + \lambda(t) f_u(t, y^*(t), u^*(t)) \right] h(t) \, dt = 0$$

et ceci est vérifiée pour toute fonction continue par morceaux $h(.)$ et donc pour

$$h(t) = g_u(t, y^*(t), u^*(t)) + \lambda(t) f_u(t, y^*(t), u^*(t))$$

et pour ce cas

$$\int_{t_0}^{t_1} \left[g_u(t, y^*(t), u^*(t)) + \lambda(t) f_u(t, y^*(t), u^*(t)) \right]^2 dt = 0$$

qui implique la condition d'optimalité.

$$g_u(t, y^*(t), u^*(t)) + \lambda(t) f_u(t, y^*(t), u^*(t)) = 0$$

pour tout $t_0 \leq t \leq t_1$

Ces équations forment les conditions nécessaires qu'une paire optimale $(y^*(t), u^*(t))$ doit satisfaire.

On peut obtenir ces conditions necessairs à partir du Hamiltonien H défini comme suit

$$H(t, y, u, \lambda) = g(t, y, u) + \lambda(t) f(t, y, u)$$

On optimise H par rapport à u en u^*, et les conditions necessaires tracées ci-dessous peuvent être exprimées en termes du Hamiltonien:

$$\frac{\partial H}{\partial u} = 0 \text{ en } u^* \Rightarrow g_u + \lambda f_u = 0$$

$$\lambda' = -\frac{\partial H}{\partial y} \Rightarrow \lambda' = -(g_y + \lambda f_y)$$

$$\lambda(t_1) = 0.$$

et la dynamique de l'equation d'etat est décrite par

$$y' = f(t, y, u) = \frac{\partial H}{\partial \lambda}$$

$$y(t_0) = y_0$$

1.2. Principe du maximum de Pontryagin

Les conditions nécessaires ci-dessus peuvent être ~~à une version~~ ~~élargies à~~ élargies à une version du principe du maximum du Pontryagin.

1.2.1. Théorème

Si $(y^*(t), u^*(t))$ est une paire optimale pour le problème (1.3), alors il existe une fonction adjointe dérivable par morceaux $\lambda(t)$ telle que

$$H(t, y^*(t), u(t), \lambda(t)) \leq H(t, y^*(t), u^*(t), \lambda(t))$$

(dans le cas d'une maximisation) pour tout contrôles u au temps, où H est le hamiltonien donné par

$$H(t, y(t), u(t), \lambda(t)) = g(t, y(t), u(t)) + \lambda(t) f(t, y(t), u(t))$$

et

$$\begin{cases} \lambda'(t) = -\dfrac{\partial H(t, y^*(t), u^*(t), \lambda(t))}{\partial y} \\ \lambda(t_1) = 0 \end{cases}$$

1.2.2. Théorème

Supposons que $f(\cdot,\cdot,\cdot)$ et $g(\cdot,\cdot,\cdot)$ sont continûment différentiables par rapport à leurs arguments et concaves par rapport à u.

Supposons que (u^*, y^*) est une paire optimale pour le problème (1.3); et que $\lambda(t)$ est une fonction dérivable par morceaux avec $\lambda(t) \geq 0$ pour tout t. Supposons que pour tout $t_0 \leq t \leq t_1$,

$$\frac{\partial H}{\partial u}(t, y^*(t), u^*(t), \lambda(t)) = 0$$

Alors pour tout contrôles u et pour chaque $t_0 \leq t \leq t_1$, on a dans le cas d'une maximisation

$$H(t, y^*(t), u(t), \lambda(t)) \leq H(t, y^*(t), u^*(t), \lambda(t))$$

<u>Preuve</u>

Soient $t_0 \leq t \leq t_1$ et u un contrôle.

Alors

$$H(t, y^*(t), u^*(t), \lambda(t)) - H(t, y^*(t), u(t), \lambda(t)) =$$

$$[g(t, y^*(t), u^*(t)) + \lambda(t) f(t, y^*(t), u^*(t))] -$$

$$[g(t, y^*(t), u(t)) + \lambda(t) f(t, y^*(t), u(t))] =$$

$$[g(t, y^*(t), u^*(t)) - g(t, y^*(t), u(t))] + \lambda(t) [f(t, y^*(t), u^*(t)) - f(t, y^*(t), u(t))] \geq (u^*(t) - u(t)) \frac{\partial g}{\partial u}(t, y^*(t), u^*(t))$$

$$+ \lambda(t) (u^*(t) - u(t)) \frac{\partial f}{\partial u}(t, y^*(t), u^*(t))$$

$$= (u^*(t) - u(t)) \frac{\partial H}{\partial u}(t, y^*(t), u^*(t), \lambda(t)) = 0.$$

1.1.3. Remarques

(i). Pour un problème de minimisation avec f et g étant convexes, on a

$$H(t, y^*(t), u(t), \lambda(t)) \geq H(t, y^*(t), u^*(t), \lambda(t))$$

(ii) Pour distinguer entre les contrôles qui minimisent et ceux qui maximisent, on vérifie la condition de concavité.

si $\frac{\partial^2 H}{\partial u^2} < 0$ en u^* alors le problème (1.3) est un problème de maximisation, pendant que $\frac{\partial^2 H}{\partial u^2} > 0$ implique que (1.3) est un problème de minimisation.

Ci-dessous, on décrit les étapes à suivre pour résoudre le problème (1.3).

(i) - Déterminer pour le problème (1.3)

(ii) - Ecrire l'équation différentielle adjointe, la condition de transversalité et la condition d'optimalité.

(iii) Eliminer u^* en utilisant la condition d'optimalité $H_u = 0$.

(iv) Résoudre les deux équations différentielles pour y^* et λ avec les deux conditions aux limites en substituant u^* par son expression trouvé dans (iii)

(v) Après avoir trouvé y^* et λ, écrire l'expression de u^*.

1.1.4 Exemples

Exemple 1

$$\min \int_0^1 (u(t))^2 dt$$

sujette à

$$\begin{cases} y'(t) = y(t) + u(t) \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

$$H(t, y(t), u(t), \lambda(t)) = (u(t))^2 + \lambda(t)(y(t) + u(t))$$

Condition d'optimalité $\frac{\partial H}{\partial u} = 0$

c.a.d $2u + \lambda = 0$ et donc $u^* = -\frac{1}{2}\lambda$

L'équation adjointe est donnée par

$$\lambda' = -\frac{\partial H}{\partial y} = -\lambda$$

avec la condition de transversalité

$$\lambda(1) = 0.$$

Donc $\lambda(t) = 0$ et $u^*(t) = 0$

et $y^*(t) = e^t$

Exemple 2

$$\min \int_1^2 \left[t (u(t))^2 + t^2 y(t) \right] dt$$

sujette à $\begin{cases} y'(t) = -u(t) \\ y(1) = 1 \end{cases}$

Le hamiltonien est donné par

$$H(t, y(t), \lambda(t)) = t u^2 + t^2 y - \lambda u$$

Condition d'optimalité $\frac{\partial H}{\partial u} = 0$.

c.a.d $\quad 2tu - \lambda = 0$

d'où $\quad u^* = \frac{1}{2t} \lambda$

L'équation adjointe est donnée par

$$\begin{cases} \lambda' = -\frac{\partial H}{\partial y} = -t^2 \\ \lambda(2) = 0 \end{cases}$$

Alors $\quad \lambda(t) = -\frac{1}{3} t^3 + \frac{8}{3}$

et $\quad u^*(t) = \frac{1}{2t} \left(-\frac{1}{3} t^3 + \frac{8}{3} \right) = -\frac{1}{6} t^2 + \frac{4}{3t}$

$$y^{*\prime} = \frac{1}{6} t^2 - \frac{4}{3t}$$

$$y^*(1) = 1$$

Ceci nous donne $\quad y^*(t) = \frac{1}{18} t^3 - \frac{4}{3} \ln t + \frac{17}{18}$