

Sur une équation de Fokker-Planck modélisant des particules piégées dans un double puits de potentiel.

Simona MANCINI

Fédération D. Poisson, Université d'Orléans, MAPMO

simona.mancini@univ-orleans.fr

Résumé (*Impérativement en français s'il vous plaît*)

Représenant l'article de Wilson et Cowan, [8], en neurosciences computationnelles les problèmes de bi-stabilité visuelle sont étudiés plus récemment en décrivant l'évolution temporelle du potentiel d'action de deux ou plusieurs populations de neurones par des systèmes d'équations différentielles stochastiques, voir par exemple [6] ou [7] :

$$(1) \quad \begin{cases} \dot{x} = f(x, y) + \beta d\xi_x, \\ \dot{y} = g(x, y) + \beta d\xi_y, \end{cases}$$

où $f(x, y)$ (resp. $g(x, y)$) est une fonction non-linéaire décrivant l'activité du potentiel d'action de la population x (resp. y) soumise à un stimuli extérieur et en interaction avec l'activité de la population y (resp. x), et où $d\xi_x$ et $d\xi_y$ sont deux bruits blancs indépendants d'écart type β introduits pour justifier une approximation de type champs moyen par rapport au grand nombre de neurones impliqués dans le modèle. Les solutions de ces systèmes d'équations sont, pour certains valeurs des paramètres en jeux, des fonctions bi-modales. Cependant, la non-linéarité dans f et g est telle qu'il n'est pas possible d'expliquer ces solutions. Il est bien sur possible d'étudier et d'obtenir des informations sur la solution de (1), en étudiant directement le système (1), ou par la méthode de moments (voir [6]), mais le système d'équations ainsi dérivé n'est pas fermé. Une autre approche consiste à utiliser une analogie de cette modélisation avec des particules piégées dans un double puits de potentiel et d'approcher le potentiel sous-jacent par un polynôme d'ordre trois. Mais cette approche est valable que localement, voir [7] et [5]. Pour contourner ces problèmes, il est possible d'étudier l'équation aux dérivées partielles associée à (1).

Dans un premier temps, voir [3], nous considérons l'équation de Fokker-Planck (ou de Kolmogorov progressive) associé à (1) :

$$(2) \quad \partial_t p + \nabla \cdot \left(F p - \frac{\beta^2}{2} \nabla p \right) = 0 \quad \text{dans } (0, +\infty) \times \Omega,$$

où $p = p(t, x, y)$ est une fonction de distribution représentant la probabilité qui au temps $t \geq 0$ deux potentiels d'actions soient en $(x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$, et où $F = F(x, y) = (f(x, y), g(x, y))$ est le terme de dérive. Le domaine Ω étant borné, nous complétons (2) par des conditions aux bords de flux nul (ou de Robin):

$$F p - \frac{\beta^2}{2} \nabla p = 0, \quad \text{sur } \partial\Omega$$

et nous y associons une donnée initiale

$$p(0, x, y) = p_0(x, y) \geq 0$$

et normalisée à 1 sur Ω .

Comme le prédit le système (1) la solution de (2) doit être bi-modale, i.e. doit avoir deux pics de densité. En figure 1, nous montrons comment la masse se concentre autour de deux minima du potentiel. A gauche les paramètres et le terme de dérive sont symétriques, à droite un de paramètres est modifié pour favoriser un minimum,

i.e. le potentiel d'un des deux minima est plus profond, nous parlons alors de cas asymétrique.

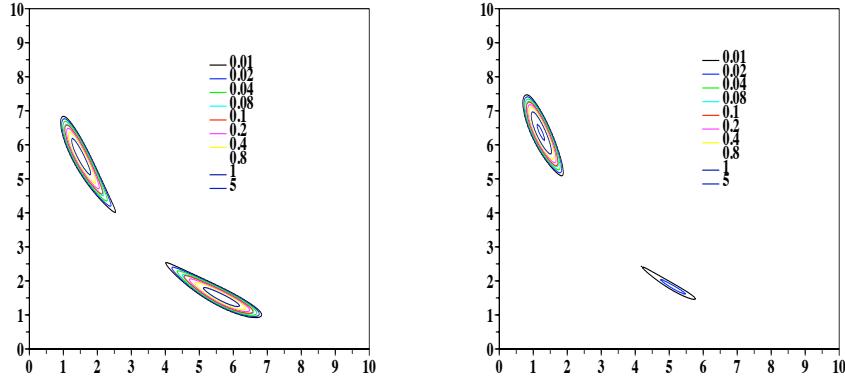


FIGURE 1. Lignes de contour de la solution. Gauche : cas symétrique. Droite : cas asymétrique.

La définition de f et g a comme conséquence que le terme de dérive F n'est pas le gradient d'un potentiel (ne satisfait pas la condition de Schwartz), i.e. il n'existe pas de potentiel V tel que $F = -\nabla V$. Il en suit que l'état d'équilibre du problème (i.e. la solution du problème stationnaire associé) n'admet pas de solution explicite. Néanmoins, en utilisant le théorème de Krein-Rutman et la théorie de l'entropie relative généralisée, dans [3] nous montrons le caractère bien posé de (2) et du problème stationnaire associé, ainsi que la convergence en norme L^2 de la solution du problème d'évolution vers l'état d'équilibre. En figure 2, nous montrons la convergence en temps de la solution du problème de Fokker-Planck vers l'état d'équilibre : après une première période la convergence est exponentielle.

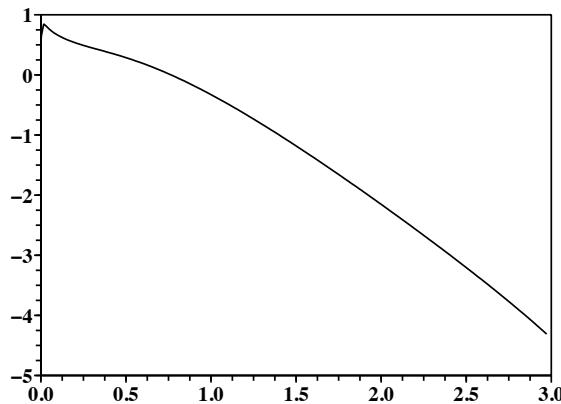


FIGURE 2. Convergence en norme L^2 vers l'état d'équilibre en échelle logarithmique.

Enfin, nous soulignons aussi, numériquement, le caractère lent-rapide de l'évolution temporelle de la solution ainsi que sa convergence exponentielle vers l'état d'équilibre. En figure 3, nous montrons comment une des marginales de p évolue en temps. La donnée initiale est une gaussienne centrée près du point d'équilibre instable (maximum du potentiel). La solution diffuse rapidement, et les pics de densité croissent de plus en plus lentement. A gauche, nous présentons le cas symétrique, la différence dans les deux pics de densité est due au fait que nous intégrons la solution de figure 1 le-long d'un axe. A droite nous traçons le cas asymétrique, étant un des puits plus profond, la masse se concentre autour d'un minima et la convergence est plus rapide.

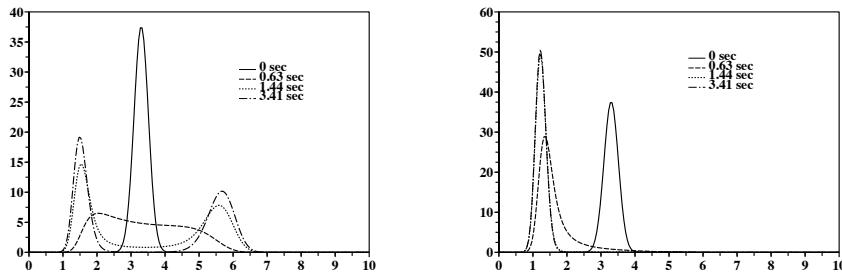


FIGURE 3. Evolution d'une des marginales de p en fonction du temps. Gauche : cas symétrique. Droite : cas asymétrique.

Au niveau des applications, nous sommes intéressés par l'évaluation de certaines quantités macroscopiques, mesurables expérimentalement, comme la performance ou le temps de réaction. Ces quantités sont définies à partir de la densité de l'état d'équilibre sur des sous-domaines de Ω , ou à partir du potentiel V associé au terme de dérive. Nous rappelons que ni l'écriture explicite de l'état d'équilibre ni le potentiel V sont connus (à cause de la définition de F), mais nous pouvons calculer la densité de la solution du problème d'évolution (2) sur des sous-domaines de Ω à tout temps. Donc, pour obtenir des informations sur la performance et le temps de réaction, il faut calculer la solution du problème d'évolution jusqu'à quand celle-ci approche suffisamment bien l'état d'équilibre. Ce dernier point mène au problème majeur du modèle : pour évaluer numériquement un temps de réaction ou une performance, il faut attendre un temps exponentiellement long pour que la solution approche l'état d'équilibre. Nous allons présenter deux méthodes qui permettent de réduire les temps de calcul : une réduction du problème à un modèle unidimensionnel, basée sur le caractère lent-rapide de (1) ; une approche de type WKB menant à un système d'équations de type Hamilton-Jacobi.

Il est possible de réduire les temps de calcul en réduisant la complexité du système dynamique (1). En effet, en s'appuyant sur le caractère lent-rapide de (1), nous réduisons le problème à une seule équation différentielle stochastique définie sur la variété lente sur laquelle les particules évoluent, voir [1] et [4]. Nous rappelons ici brièvement la méthode. Soit $\varepsilon \ll 1$ un petit paramètre responsable de la différence d'échelle temporelle entre le deux variables x et y , voir [4]. Avec un changement d'échelle en temps, la partie déterministe dans (1) lit :

$$\begin{cases} \varepsilon \dot{x} = f(x, y), \\ \dot{y} = g(x, y), \end{cases}$$

où nous avons mis en évidence que la variable x est la variable rapide et la variable y celle lente. Considérant $\varepsilon = 0$, il existe $x^*(y)$ tel que $f(x^*(y), y) = 0$, ainsi y doit satisfaire :

$$\dot{y} = g(x^*(y), y).$$

Réintroduisant aussi la partie stochastique, nous obtenons l'équation différentielle stochastique :

$$(3) \quad \dot{y} = g(x^*(y), y) + \beta d\xi,$$

à laquelle nous associons l'équation de Fokker-Planck unidimensionnelle :

$$(4) \quad \partial_t q + \partial_y \left(g(x^*(y), y)q - \frac{\beta^2}{2} \partial_y q \right) = 0,$$

où $q = q(t, y)$ est une fonction distribution représentant la probabilité qu'au temps $t \geq 0$ une particule soit en y . La convergence exponentielle de la solution de (4) vers l'état d'équilibre persiste, voir figure 4, ce qui n'est pas étonnant puisque la solution vie sur la variété lente.

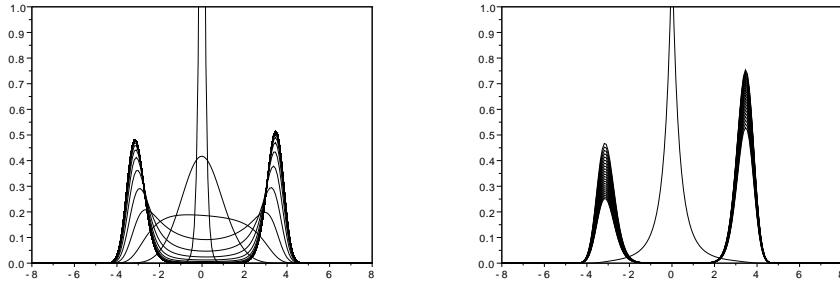


FIGURE 4. Evolution en temps de la solution du modèle unidimensionnel. Gauche : temps initiaux. Droite : temps longs.

Le schéma numérique associé à (4) est implicite en temps, donc nous n'avons plus de contraintes de stabilité sur le pas de discréétisation en temps et les calculs sont très rapides.

De plus, l'état d'équilibre s'écrit explicitement comme :

$$(5) \quad q_s(y) = \exp(-2G(y)/\beta^2),$$

où $G(y)$ est le potentiel associé à $g(x^*(y), y)$ et défini par:

$$G(y) = \int g(x^*(z), z) dz.$$

Il est donc possible de calculer les quantités macroscopiques cherchées. Comme le montre la figure 5, les résultats numériques du modèle initiale et du modèle réduit sont en bon accord. Nous comparons les solutions au temps $t = 4sec.$ du modèle de Fokker-Planck bidimensionnel (ligne noire) et du modèle unidimensionnel (ligne bleue), avec l'état d'équilibre (ligne rouge). A gauche, pour le cas symétrique, à droite pour le cas asymétrique. Cette approximation est aussi appliquée à l'étude d'un modèle dans lequel les particules sont piégées dans un triple puits de potentiel, voir [5].

La deuxième approche que nous considérons ici est l'approximation de la fonction de distribution $p = p(t, x, y)$ satisfaisant à l'équation de Fokker-Planck par une exponentielle, voir [2]. Dans cette partie nous faisons abstraction du problème

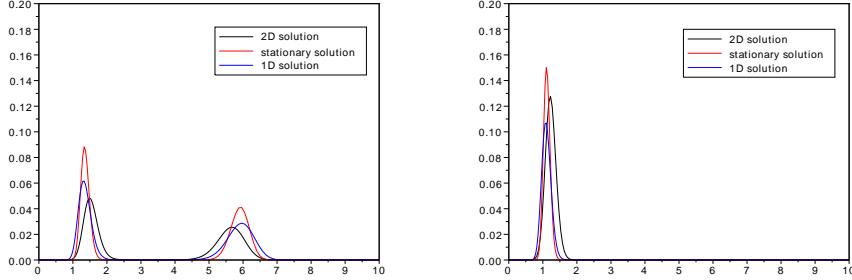


FIGURE 5. Comparaisons des solutions des équations (2), (4) et de l'état stationnaire (5). Gauche : cas symétrique. Droite : cas asymétrique.

biologique du départ et dans un premier approche nous considérons un problème unidimensionnel, i.e. $p \in (0, +\infty) \times \mathbb{R}$, avec terme de dérive $F = F(x)$ défini comme moins la dérivée du potentiel :

$$(6) \quad V(x) = (1 - x^2)^2 + a \left(x - \frac{x^3}{3} \right),$$

où a est le paramètre d'asymétrie. Si $a \neq 0$, le potentiel V correspond à un double puits avec un puits plus profond que l'autre. Si $a = 0$, le potentiel V correspond à un double puits avec minima en $x = \pm 1$ et un maxima en $x = 0$. Il est connu que l'état d'équilibre associé à l'équation de Fokker-Planck correspond à une fonction bi-modale, i.e. avec deux pics de densité au voisinage des minima du potentiel V , qui lit :

$$(7) \quad p_s(x) = \exp(-2V(x)/\beta^2).$$

Remplaçons dans un premier temps p par :

$$(8) \quad p(t, x) = C \exp\left(\frac{-2\phi(t, x)}{\beta^2}\right),$$

où C est une constante de normalisation. La fonction $\phi = \phi(t, x)$ doit alors satisfaire l'équation de type Hamilton-Jacobi :

$$(9) \quad \partial_t \phi - \frac{\beta^2}{2} \partial_x F + F \partial_x \phi + |\partial_x \phi|^2 - \frac{\beta^2}{2} \partial_{xx} \phi = 0, \quad \text{dans } (0, +\infty) \times \mathbb{R},$$

et pour $\beta \rightarrow 0$, ϕ doit satisfaire à l'équation d'Hamilton-Jacobi :

$$(10) \quad \partial_t \phi + F \partial_x \phi + |\partial_x \phi|^2 = 0, \quad \text{dans } (0, +\infty) \times \mathbb{R},$$

complété d'une donnée initiale $\phi_0(x)$.

Si la donnée initiale est $\phi_0(x) = V(x)$, il est facile de voir que $\phi(x) = V(x)$ est solution de (10). Supposons alors que la donnée initiale soit $\phi_0(x) = W(x)$ avec :

$$(11) \quad W(x) = \begin{cases} V(x) & x \notin [-1, 1] \\ 0 & x \in [-1, 1] \end{cases}.$$

La fonction W est encore une solution de l'équation stationnaire associée à l'équation de Hamilton-Jacobi (10). Donc la solution de (10) est $\phi(x) = W(x)$. Mais $W(x) = 0$ pour tout $x \in [-1, 1]$, et il ne peut pas y avoir concentration de masse autour des minima du potentiel V comme il faudrait du point de vue physique. Il faut alors

modifier (8) et prendre en compte le terme suivant dans le développement, i.e. il faut définir un développement WKB plus sophistiqué :

$$(12) \quad p(t, x, y) = C \exp\left(\frac{-2\phi(t, x) - \beta^2\psi(t, x)}{\beta^2}\right).$$

Le changement de fonction (12) nous mène au système d'équations in $(0, +\infty) \times \mathbb{R}$:

$$(13) \quad \begin{cases} \partial_t\phi + F\partial_x\phi + |\partial_x\phi|^2 = 0, \\ \partial_t\psi + (F + 2\partial_x\phi)\partial_x\psi = \partial_x(F + \partial_x\phi), \end{cases}$$

Il est possible de montrer en utilisant la méthode des caractéristiques que l'équation pour ψ permet de transporter la masse vers les minima du potentiel V . Enfin, en utilisant la méthode de programmation dynamique, il est possible de montrer que cette approche marche aussi pour des données initiales $\phi_0(x)$ positives et qui s'annulent sur une intervalle strictement contenu dans $[-1, 1]$, du type:

$$\phi_0(x) = (x^2 - \delta^2)_+,$$

avec $0 < \delta < 1$. Cependant, la même analyse ne peut se faire pour des données initiales du type $\phi_0(x) = x^2$.

Numériquement, la comparaison entre la solution de l'équation de Fokker-Planck, la solution du système de Hamilton-Jacobi et l'état d'équilibre montre bien les comportements attendus.

En figure 6, nous montrons la comparaison entre la solution du système (13) au temps $t = 1\text{sec}$. (ligne bleue), calculée partant de la donnée initiale

$$f_0 = C \exp(-2W(x)/\beta^2),$$

avec W défini par (11) (ligne noire), et l'état d'équilibre (7) (ligne rouge). A gauche pour le potentiel symétrique ($a = 0$) et à droite pour le potentiel asymétrique ($a = 0.5$).

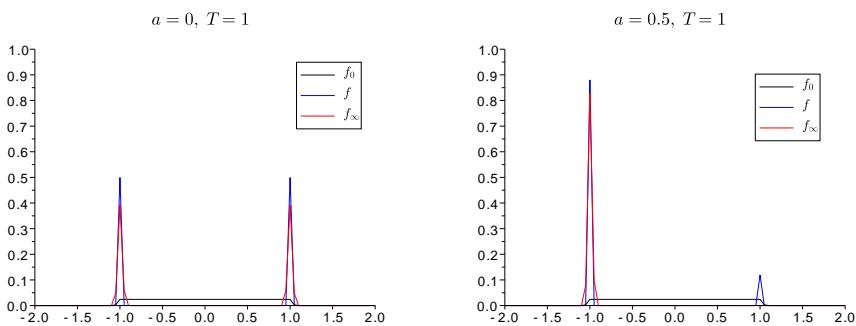


FIGURE 6. La solution du système (13) (bleue) , comparée à l'état d'équilibre (7) (rouge). La donnée initiale est tracé en noir.
Gauche : cas symétrique. Droite : cas asymétrique.

En figure 7, nous montrons la comparaison entre la solution calculée par l'approche Hamilton-Jacobi (ligne bleue) et celle calculée par l'équation de Fokker-Planck (ligne noire), au même temps $t = 5\text{sec}$. A gauche, le cas symétrique et à droite le cas asymétrique. Nous remarquons en particulier, que la solution calculée par la résolution de (13) converge plus rapidement à l'état d'équilibre que celle calculée par la résolution de (4). Enfin, voir figure 8, le plus l'écart type β approche zéro, le mieux la solution du système Hamilton-Jacobi approche celle de l'équation de

Fokker-Planck.

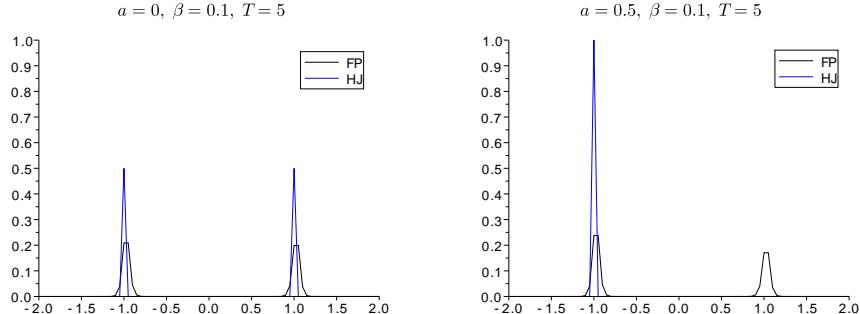


FIGURE 7. La solution du système (13) (bleue) , comparée à celle de l'équation (4) (noir). Gauche : cas symétrique. Droite : cas asymétrique.

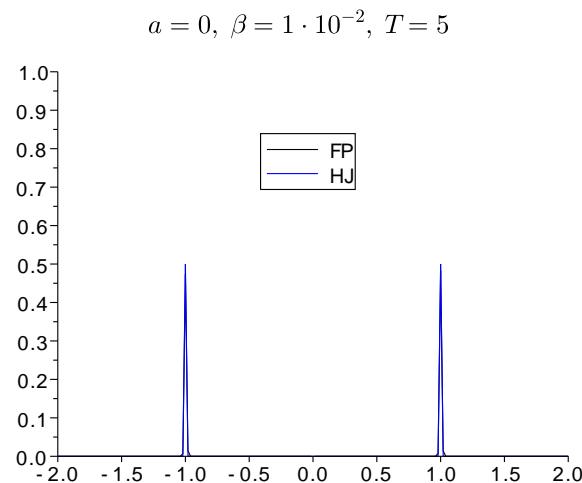


FIGURE 8. La solution du système (13) (bleue) , comparée à celle de l'équation (4) (noir) pour $\beta = 0.001$.

La généralisation de cette approche au cadre multi-dimensionnel et ou aux termes de dérive F non associés à un potentiel V est en cours. Les résultats présentés font partie des collaborations avec G. Barles (Tours), J. A. Carrillo (Londre), G. Deco (Barcelone), S. Cordier (Orléans) et I. Ishii (Waseda).

REFERENCES

- [1] N. Berglund and B. Gentz, Noise-induced phenomena in slow-fast dynamical systems: a sample-paths approach. In: Probability and its applications. Springer, New York, (2005).
- [2] G. Barles, I. Ishii and S. Mancini, A second order Hamilton-Jacobi approach to a double well Fokker-Planck equation, (in progress).

- [3] *J. A. Carrillo, S. Cordier and S. Mancini*, A decision-making Fokker-Planck model in computational neuroscience, *J. Math. Biol.*, 63, pp. 801-830, (2011).
- [4] *J. A. Carrillo, S. Cordier and S. Mancini*, One dimensional Fokker-Planck reduced dynamics of decision making models in Computational Neuroscience, *Commun. Math. Sci.*, 11(2), pp. 523-540, (2013).
- [5] *J. A. Carrillo, S. Cordier, G. Deco and S. Mancini*, General One-Dimensional Fokker-Planck Reduction of Rate-equations models for two-choice decision making (sousmis).
- [6] *G. Deco and D. Martí*, Deterministic Analysis of Stochastic Bifurcations in Multi-stable Neurodynamical Systems, *Biol. Cybern.*, 96(5), pp. 487-496, (2007).
- [7] *A. Roxin and A. Ledberg*, Neurobiological models of two-choice decision making can be reduced to a one-dimensional nonlinear diffusion equation, *PLoS Comp. Bio.*, 4, pp. 43-100, (2008).
- [8] *H. R. Wilson and J. D. Cowan*, Excitatory and inhibitory interactions in localized populations of model neurons, *Biophys. J.*, 12(1), pp. 1-24, (1972).