

Reacciones químicas,

polinomios

y sus ceros reales

Josué TONELLI CUETO

Inria Paris & IMJ-PRG



**Sociedad de  
Investigadores  
Españoles en  
Francia**

Société de  
Chercheurs  
Espagnols en  
France

JORNADA SIEF  
Paris, 27/nov/2021

# FIELDS ARRANGED BY PURITY

→  
MORE PURE

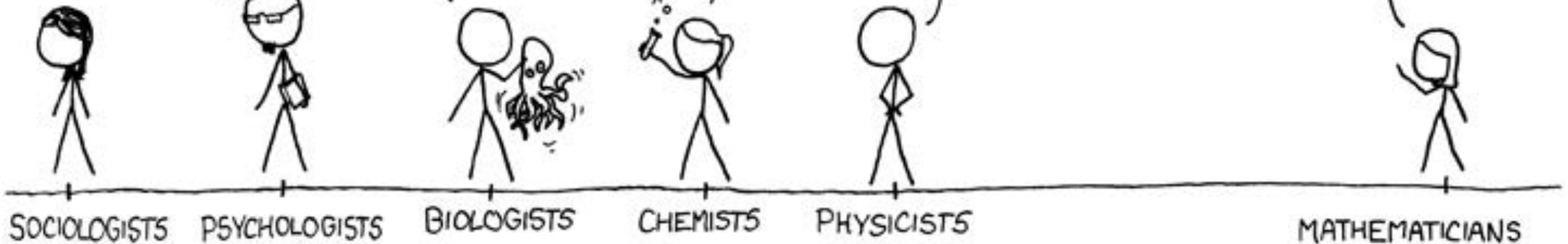
SOCIOLOGY IS  
JUST APPLIED  
PSYCHOLOGY

PSYCHOLOGY IS  
JUST APPLIED  
BIOLOGY.

BIOLOGY IS  
JUST APPLIED  
CHEMISTRY

WHICH IS JUST  
APPLIED PHYSICS.  
IT'S NICE TO  
BE ON TOP.

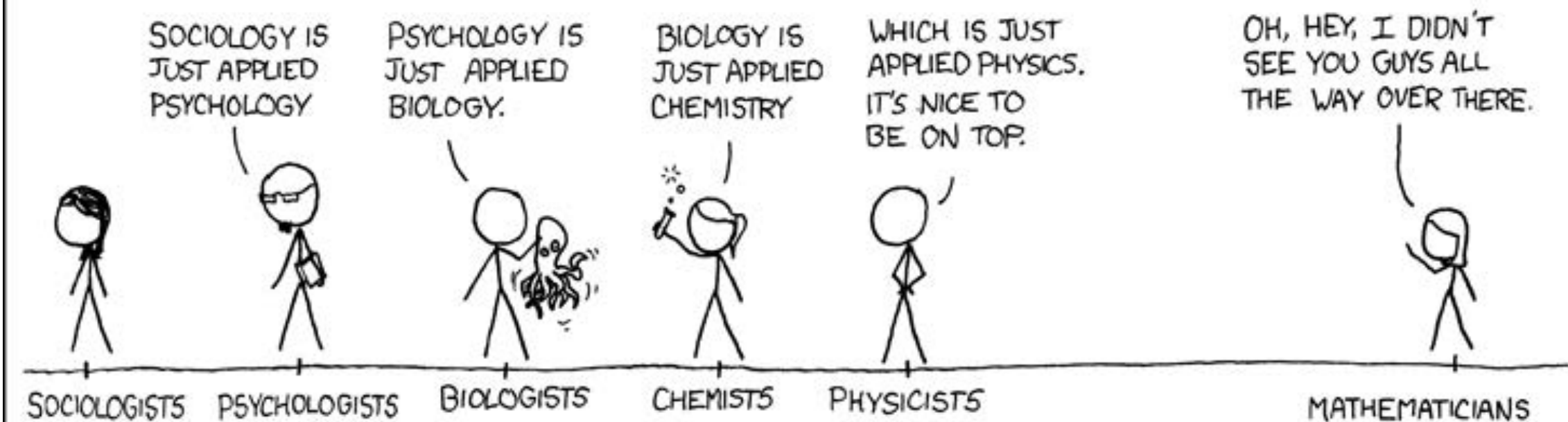
OH, HEY, I DIDN'T  
SEE YOU GUYS ALL  
THE WAY OVER THERE.



source: xkcd

# FIELDS ARRANGED BY PURITY

→  
MORE PURE

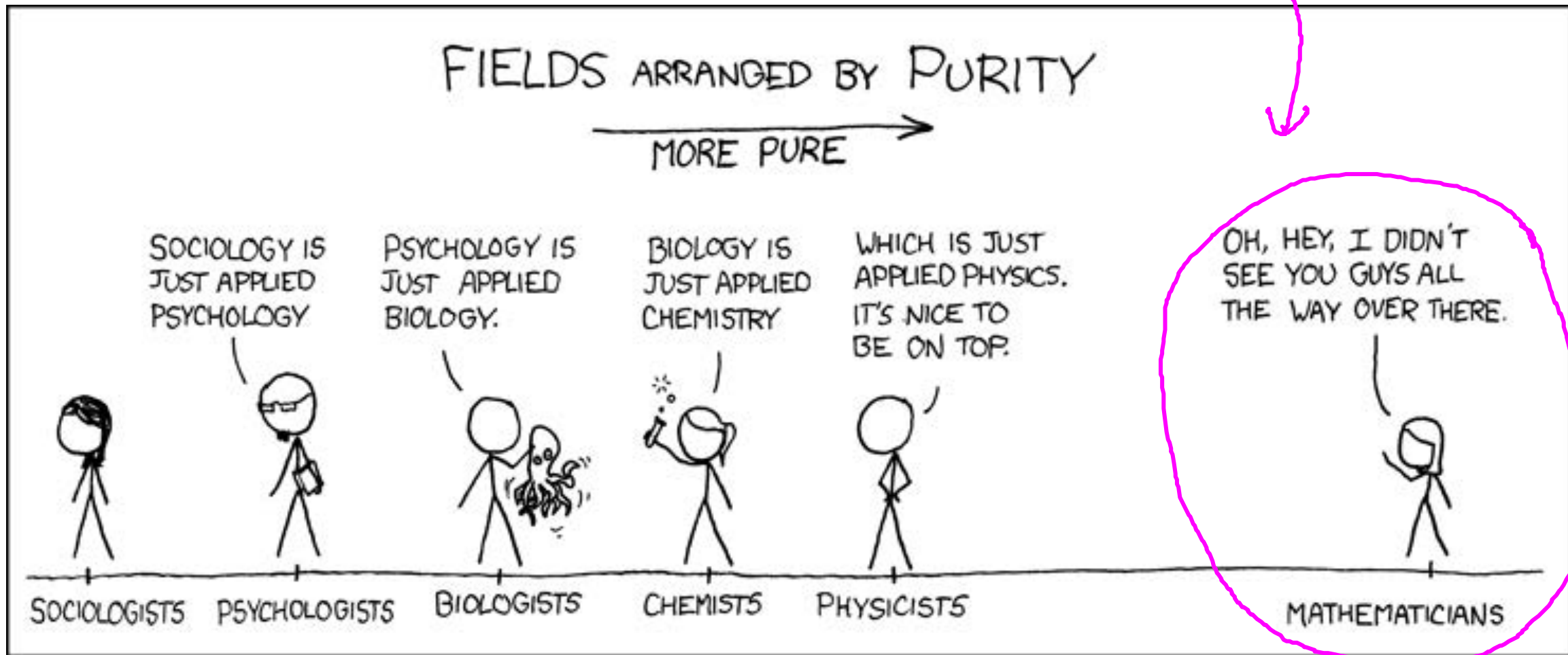


KEEP HOME MESSAGE:

¡Motivar las matemáticas a no matemáticas puede ser difícil!

source: xkcd

¡En sus mundos de yupi!

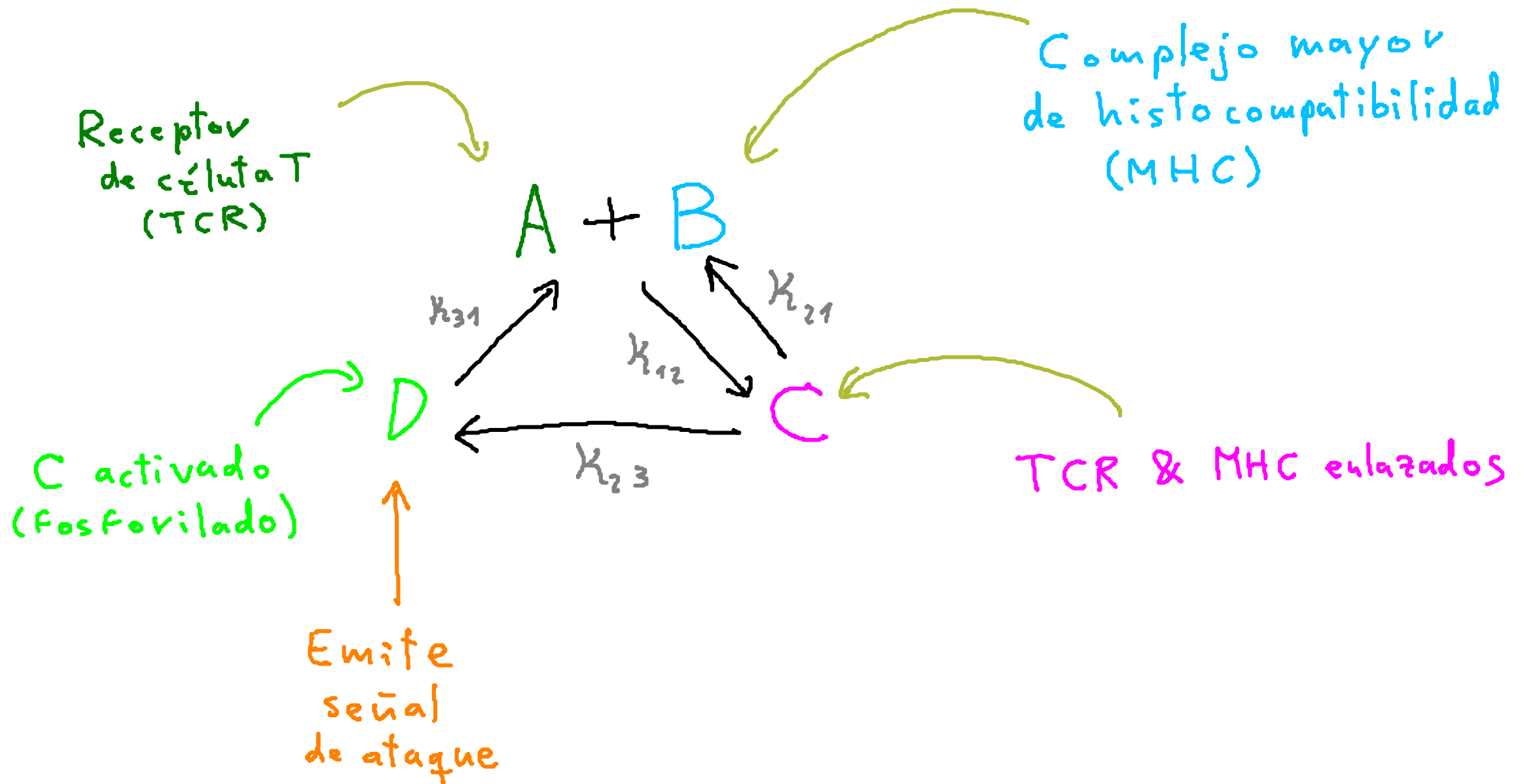


KEEP HOME MESSAGE:

¡Motivar las matemáticas a no matemáticos puede ser difícil!

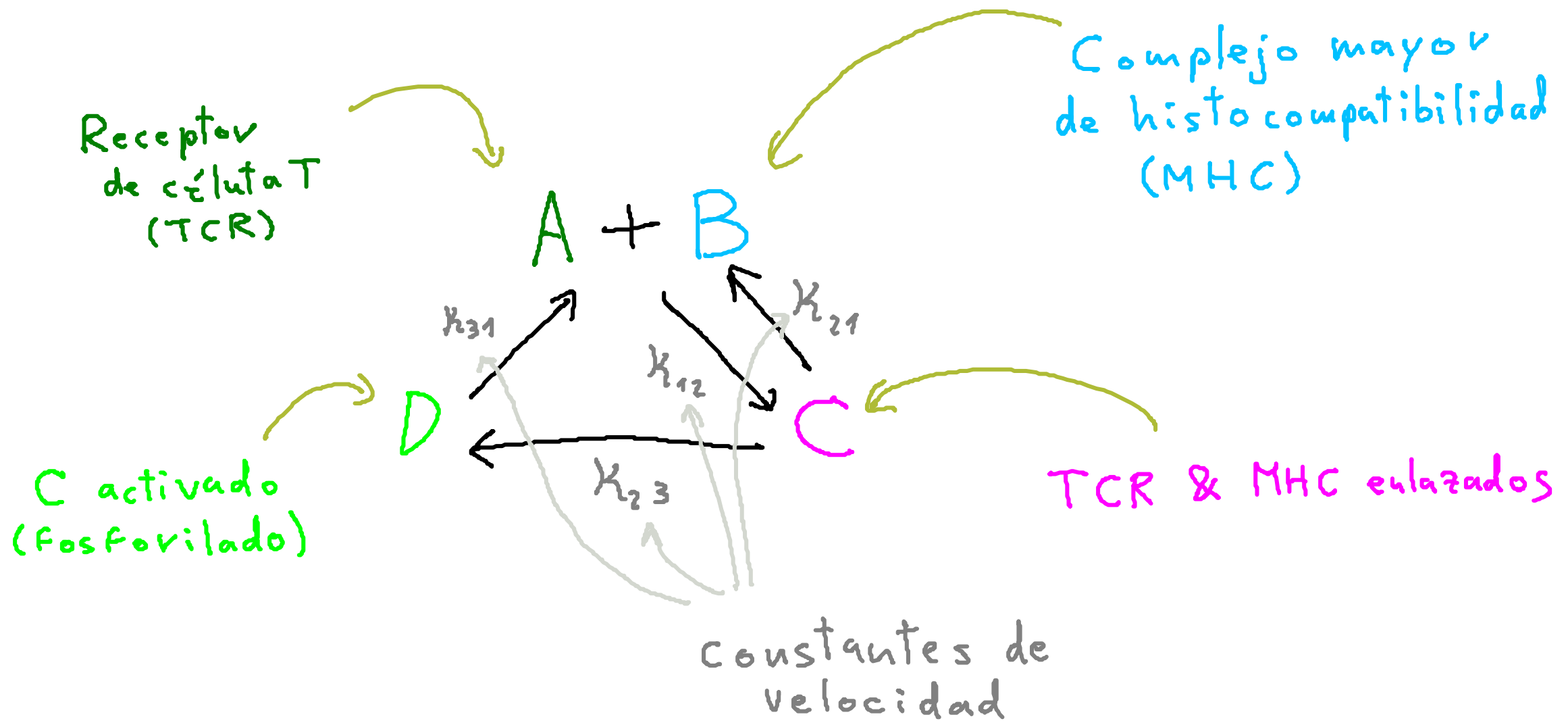
source: xkcd

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T



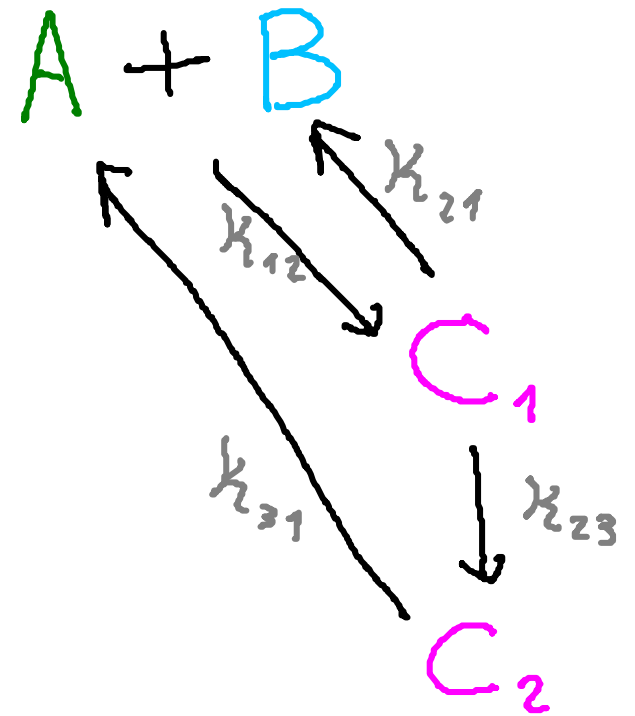
Red de McKeithan  
(Caso simple)

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T



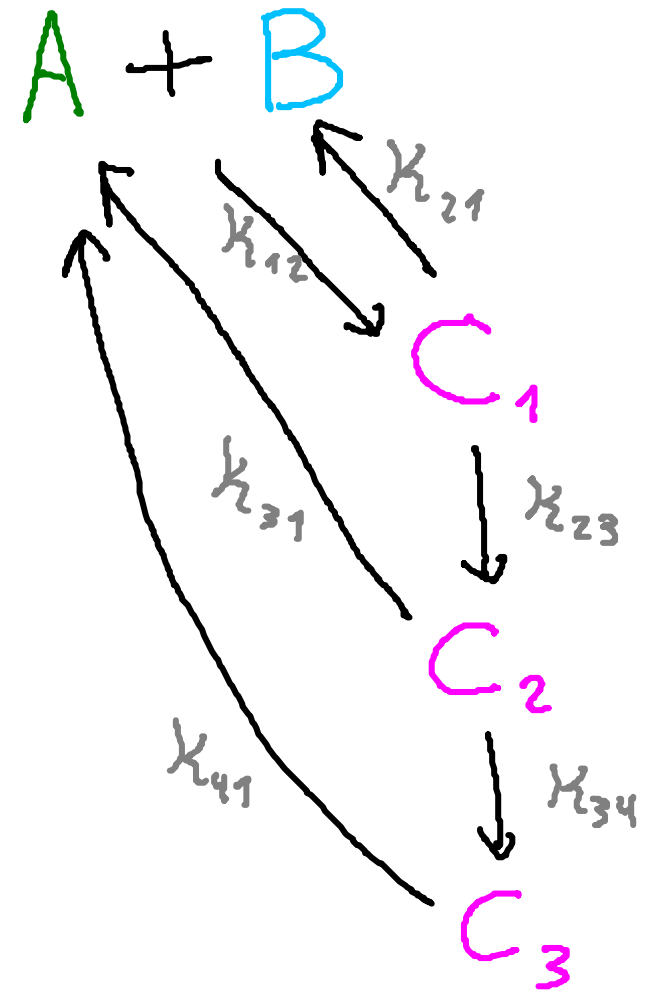
Red de McKeithan  
(Caso simple)

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T



Red de McKeithan

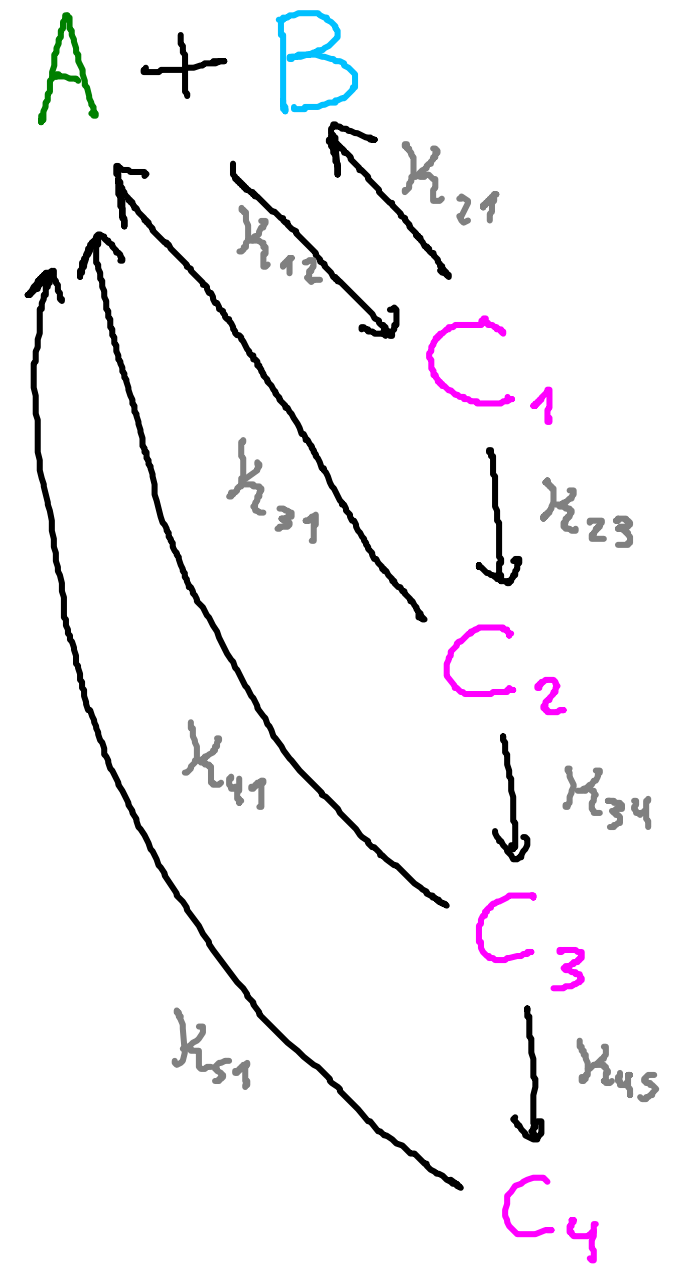
# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T



Red de McKeithan



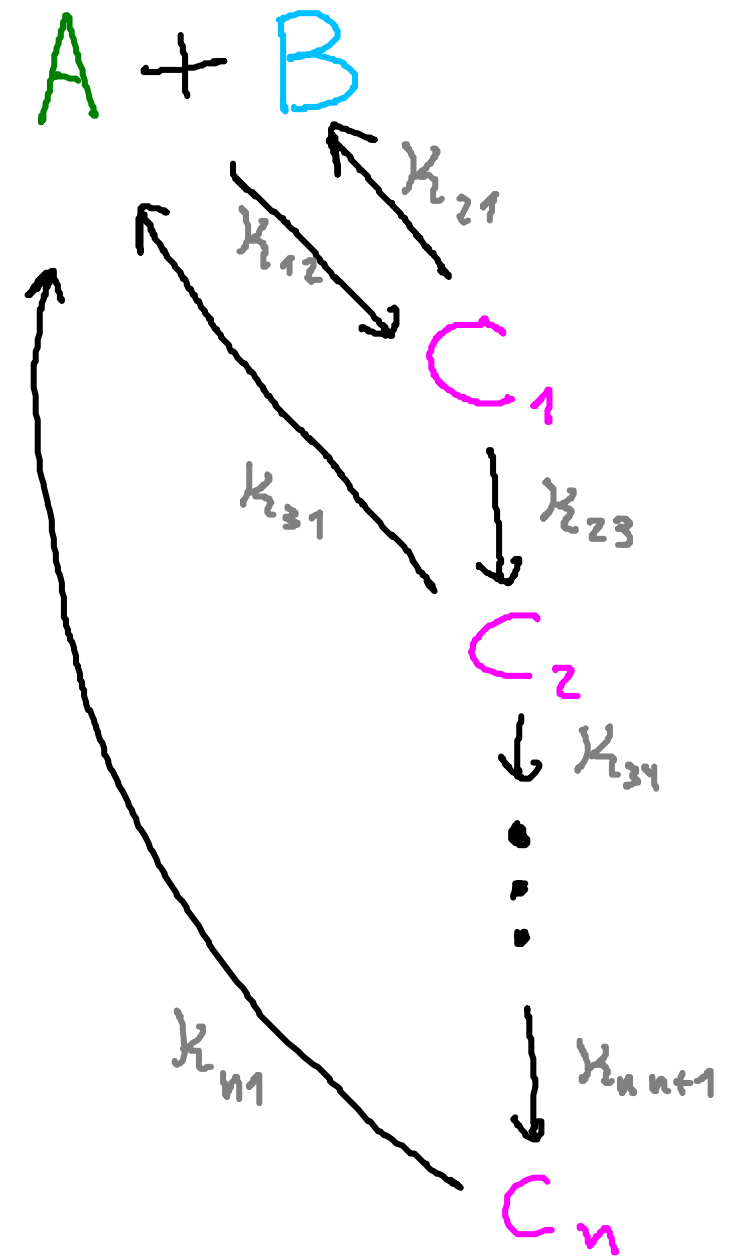
# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T



Red de McKeithan

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T

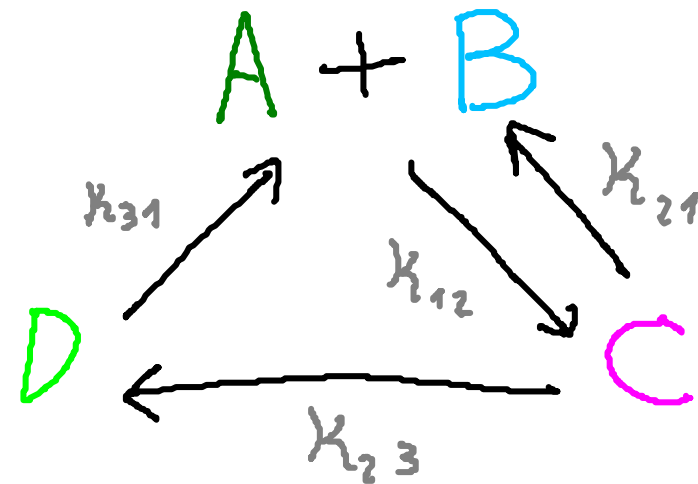
Tras  $n$  pasos,  
el modelo general



Red de McKeithan

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T

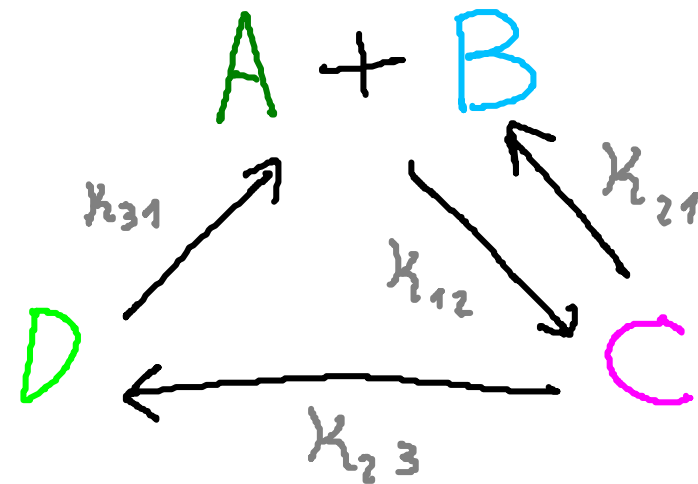
Volvamos al  
caso simple



# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T

¿Cómo evolucionan  
las concentraciones  
con el tiempo?

Dinámicas  
de acción  
de masa

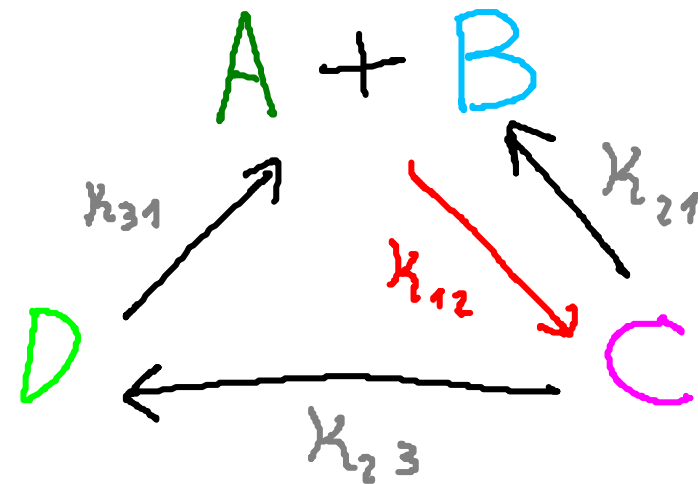


$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d[A]}{dt} = \\ \frac{d[B]}{dt} = \\ \frac{d[C]}{dt} = \\ \frac{d[D]}{dt} = \end{array} \right.$$

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T

¿Cómo evolucionan  
las concentraciones  
con el tiempo?

Dinámicas  
de acción  
de masa

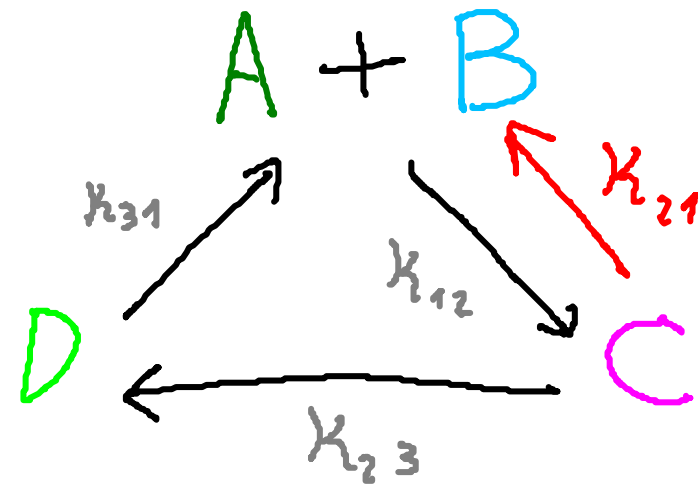


$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d[A]}{dt} = -k_{12} [A][B] \\ \frac{d[B]}{dt} = -k_{12} [A][B] \\ \frac{d[C]}{dt} = k_{12} [A][B] \\ \frac{d[D]}{dt} = \end{array} \right.$$

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T

¿Cómo evolucionan  
las concentraciones  
con el tiempo?

Dinámicas  
de acción  
de masa

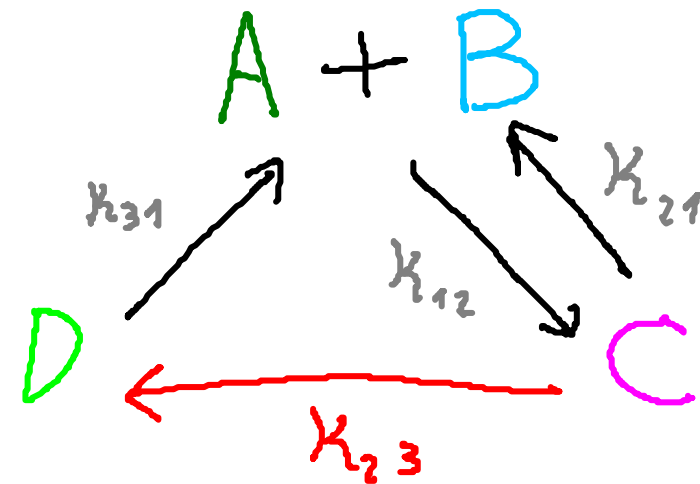


$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d[A]}{dt} = -k_{12} [A][B] + k_{21} [C] \\ \frac{d[B]}{dt} = -k_{12} [A][B] + k_{21} [C] \\ \frac{d[C]}{dt} = k_{12} [A][B] - k_{21} [C] \\ \frac{d[D]}{dt} = \end{array} \right.$$

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T

¿Cómo evolucionan  
las concentraciones  
con el tiempo?

Dinámicas  
de acción  
de masa

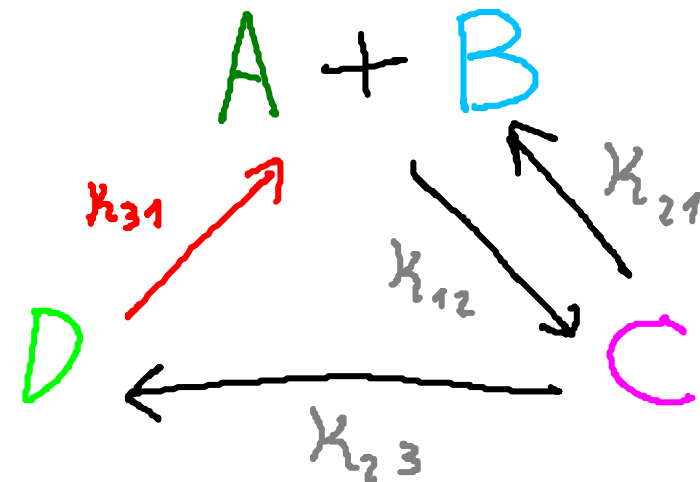


$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d[A]}{dt} = -k_{12} [A][B] + k_{21} [C] \\ \frac{d[B]}{dt} = -k_{12} [A][B] + k_{21} [C] \\ \frac{d[C]}{dt} = k_{12} [A][B] - k_{21} [C] - k_{23} [C] \\ \frac{d[D]}{dt} = k_{23} [C] \end{array} \right.$$

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T

¿Cómo evolucionan  
las concentraciones  
con el tiempo?

Dinámicas  
de acción  
de masa



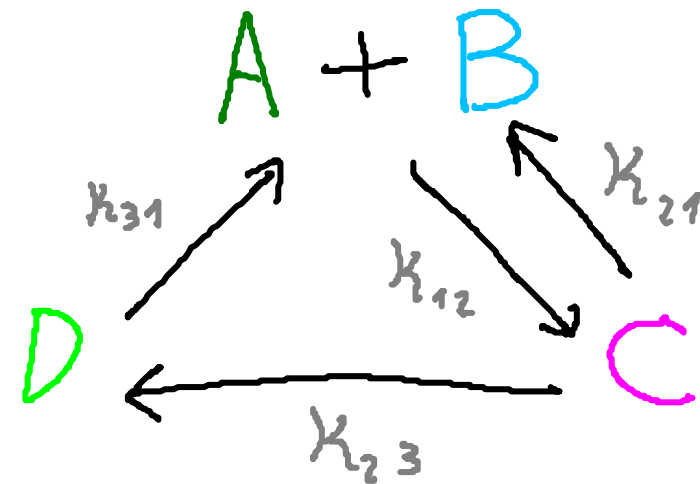
$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d[A]}{dt} = -k_{12} [A][B] + k_{21} [C] + k_{31} [D] \\ \frac{d[B]}{dt} = -k_{12} [A][B] + k_{21} [C] + k_{31} [D] \\ \frac{d[C]}{dt} = k_{12} [A][B] - k_{21} [C] - k_{23} [C] \\ \frac{d[D]}{dt} = k_{23} [C] - k_{31} [D] \end{array} \right.$$



# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T

¿Cómo evolucionan  
las concentraciones  
con el tiempo?

Dinámicas  
de acción  
de masa

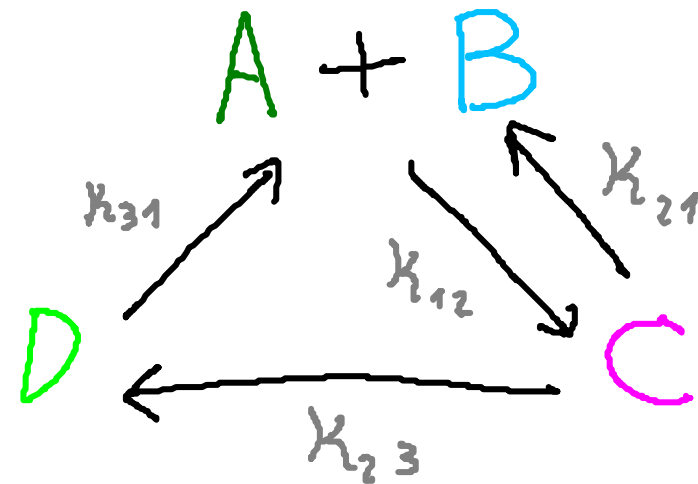


$$\begin{cases} \frac{d[A]}{dt} = -k_{12} [A][B] + k_{21} [C] + k_{31} [D] \\ \frac{d[B]}{dt} = -k_{12} [A][B] + k_{21} [C] + k_{31} [D] \\ \frac{d[C]}{dt} = k_{12} [A][B] - k_{21} [C] - k_{23} [C] \\ \frac{d[D]}{dt} = k_{23} [C] - k_{31} [D] \end{cases}$$

polinomios!

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T

¿Para qué valores de las constantes de velocidad tenemos estados estables?



$$0 = -k_{12} [A][B] + k_{21} [C] + k_{31} [D]$$

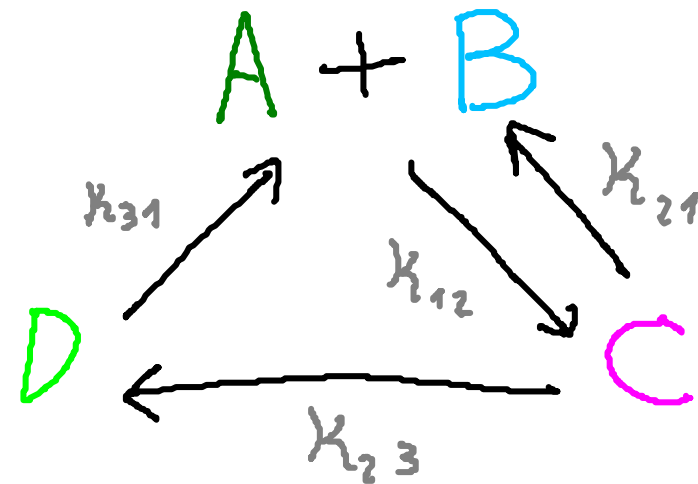
$$0 = -k_{12} [A][B] + k_{21} [C] + k_{31} [D]$$

$$0 = k_{12} [A][B] - k_{21} [C] - k_{23} [C]$$

$$0 = k_{23} [C] - k_{31} [D]$$

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T

¿Para qué valores de las constantes de velocidad tenemos estados estables?



$$0 = -k_{12} [A][B] + k_{21} [C] + k_{31} [D]$$

$$0 = -k_{12} [A][B] + k_{21} [C] + k_{31} [D]$$

$$0 = k_{12} [A][B] - k_{21} [C] - k_{23} [C]$$

$$0 = k_{23} [C] - k_{31} [D]$$

estados estables



ceros positivos de un sistema de polinomios

# MAS ALLÁ...

Redes de  
reacciones bioquímicas



Ecuaciones  
Diferenciales  
Ordinarias  
con polinomios

Estados  
estables



Ceros positivos  
de sistemas  
de polinomios

Encontrar las constantes  
de velocidad con  
estados estables



Encontrar los  
coeficientes para  
los que el sistema  
tiene ceros positivos



ALICIA DICKENSTEIN

## Una pregunta relacionada...

Dada una red de reacciones bioquímicas, ¿cuántos estados estables puede haber a lo sumo para una elección de constantes de velocidad?



Dado un sistema de polinomios con unos pocos monomios, ¿cuántos ceros positivos puede tener a lo sumo?

## Una pregunta relacionada...

Dada una red de reacciones bioquímicas,  
¿cuántos estados estables puede haber a  
lo sumo para una elección de constantes de velocidad?



Dado un sistema de polinomios con unos  
pocos monomios, ¿cuántos ceros positivos

puede tener a lo sumo?

→ oligonomio = oligo (poco) + monomio

pero en inglés: fewnomial → poconomio  
(del ruso)

... y su versión probabilística...

También en  $n$  variables

THM. (Bürgisser, Ergür, TC)

Sea

$$\begin{cases} 0 = a_{1,1}x^{\alpha_1}y^{\beta_1} + \dots + a_{1,t}x^{\alpha_t}y^{\beta_t} \\ 0 = a_{2,1}x^{\alpha_1}y^{\beta_1} + \dots + a_{2,t}x^{\alpha_t}y^{\beta_t} \end{cases}$$

Con  $a_{ij}$  variables normales independientes de media 0 y varianza 1, el número de ceros reales positivos es a lo sumo

$$\frac{t(t-1)}{4}$$

en promedio.

El azar  
nos facilita  
la vida



Eskeeririk asko  
zure arretagatik!