

# 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  
París, 27/nov/2021

## FIELDS ARRANGED BY PURITY

MORE PURE →

SOCIOLOGY IS  
JUST APPLIED  
PSYCHOLOGY



SOCIOLOGISTS

PSYCHOLOGY IS  
JUST APPLIED  
BIOLOGY.



PSYCHOLOGISTS

BIOLOGY IS  
JUST APPLIED  
CHEMISTRY



BIOLOGISTS

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



PHYSICISTS

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



MATHEMATICIANS

source: xkcd

## FIELDS ARRANGED BY PURITY

MORE PURE →

SOCIOLOGY IS  
JUST APPLIED  
PSYCHOLOGY



SOCIOLOGISTS

PSYCHOLOGY IS  
JUST APPLIED  
BIOLOGY.



PSYCHOLOGISTS

BIOLOGY IS  
JUST APPLIED  
CHEMISTRY



BIOLOGISTS

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



CHEMISTS



PHYSICISTS

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



MATHEMATICIANS

KEEP HOME MESSAGE:

¡Motivar las matemáticas a no matemátiques  
puede ser difícil!

source: xkcd

¡En sus mundos  
de yupi!

## FIELDS ARRANGED BY PURITY

MORE PURE →

SOCIOLOGY IS  
JUST APPLIED  
PSYCHOLOGY



SOCIOLOGISTS

PSYCHOLOGY IS  
JUST APPLIED  
BIOLOGY.



PSYCHOLOGISTS

BIOLOGY IS  
JUST APPLIED  
CHEMISTRY



BIOLOGISTS

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



CHEMISTS



PHYSICISTS

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



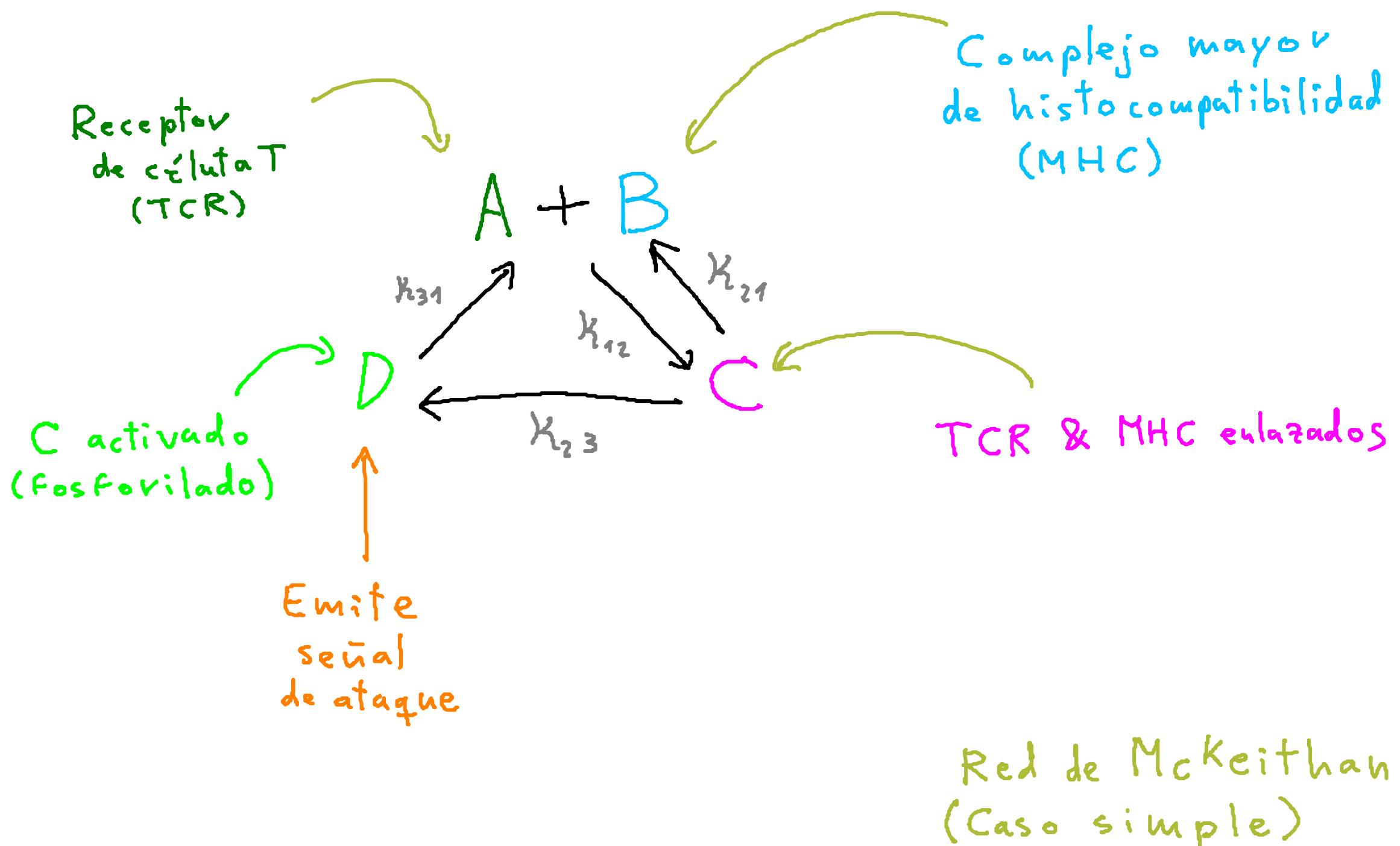
MATHEMATICIANS

KEEP HOME MESSAGE:

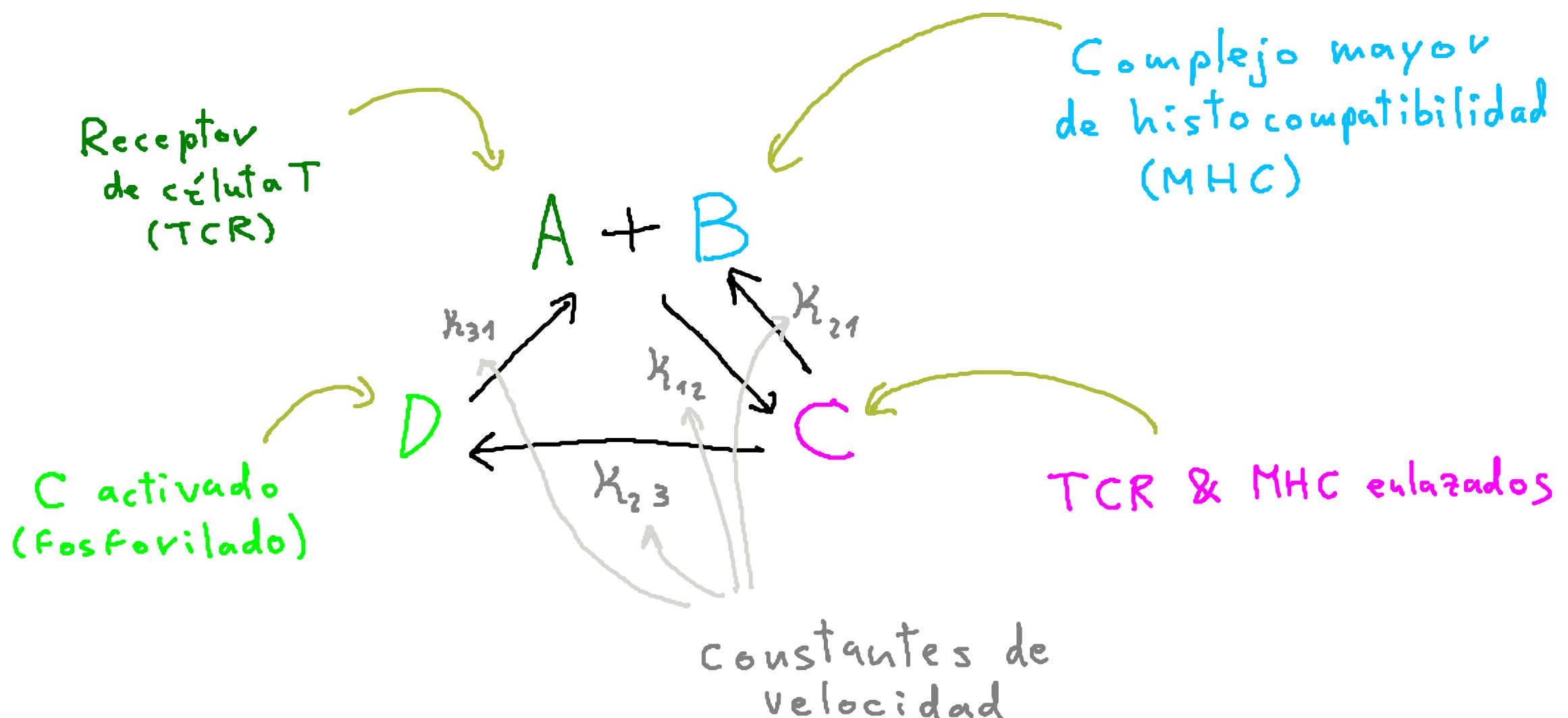
¡Motivar las matemáticas a no matemátiques  
puede ser difícil!

source: xkcd

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T

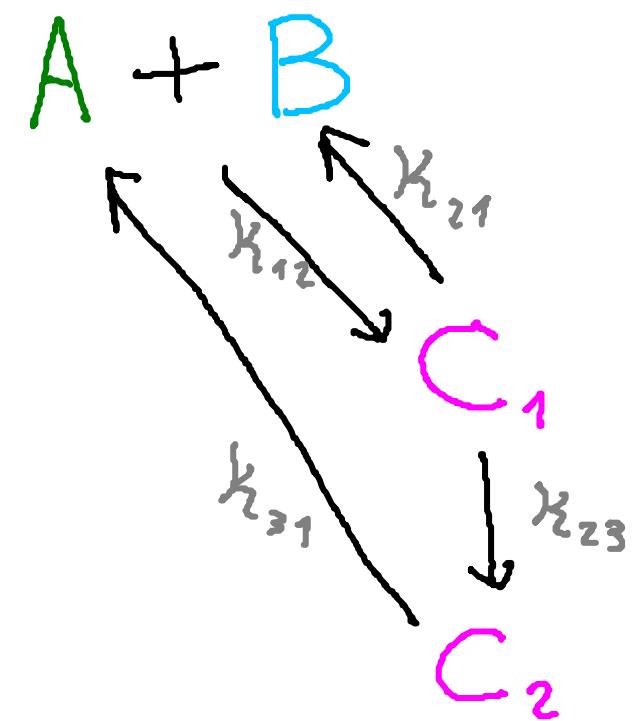


# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T



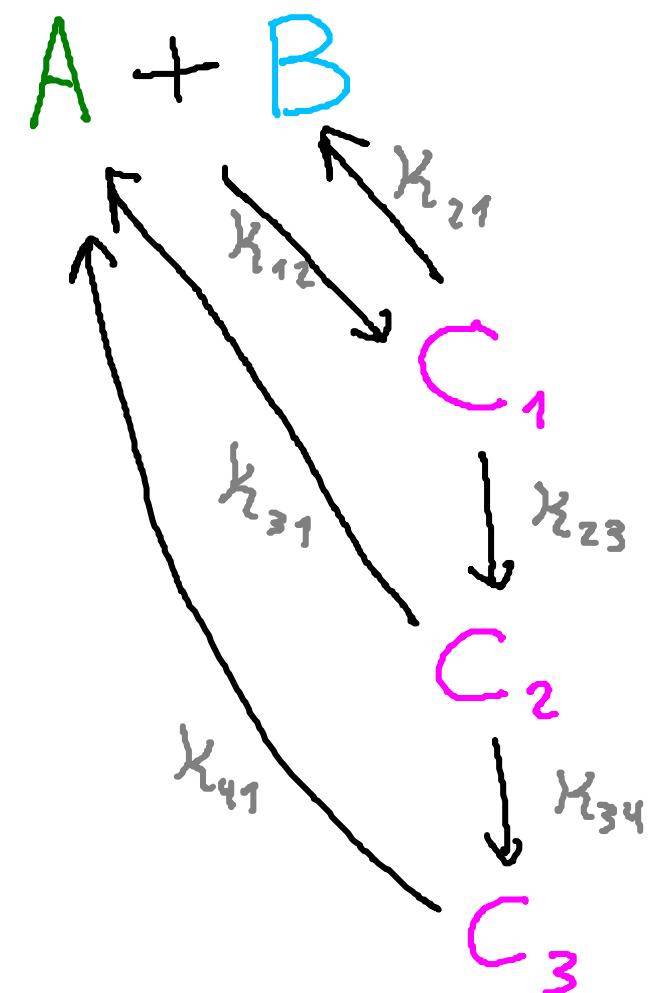
Red de McKeithan  
(Caso simple)

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T



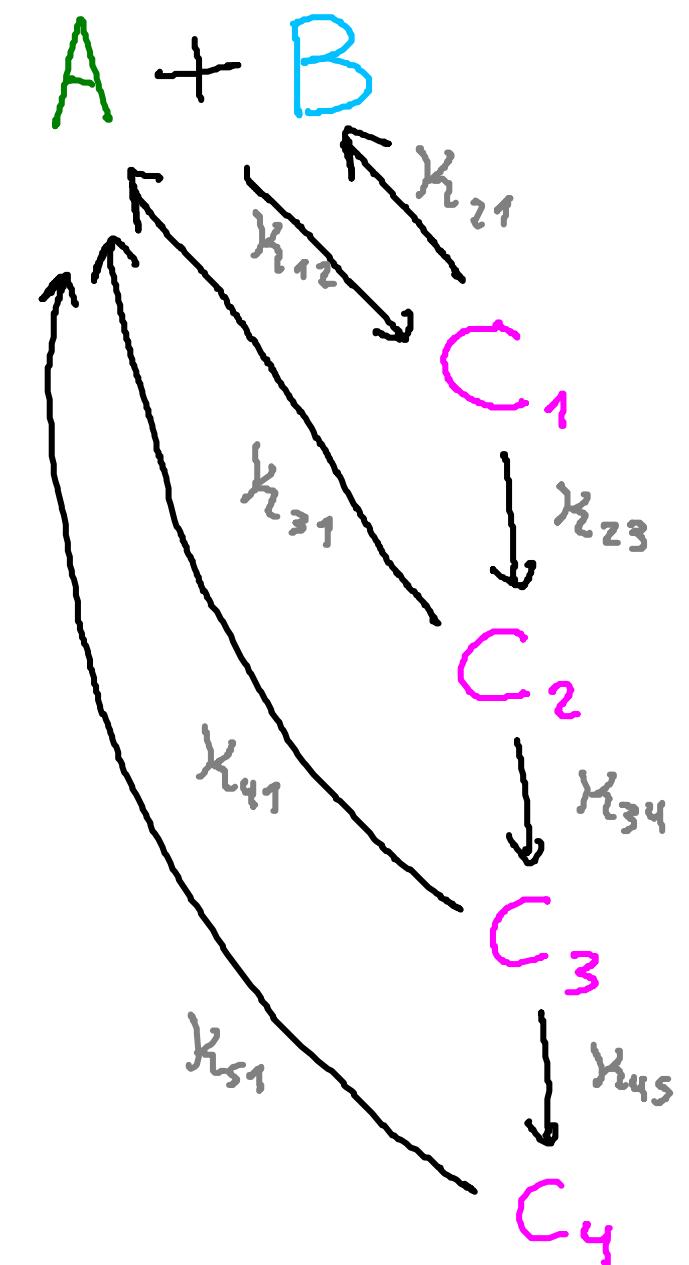
Red de McKeithan

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T



Red de McKeithan

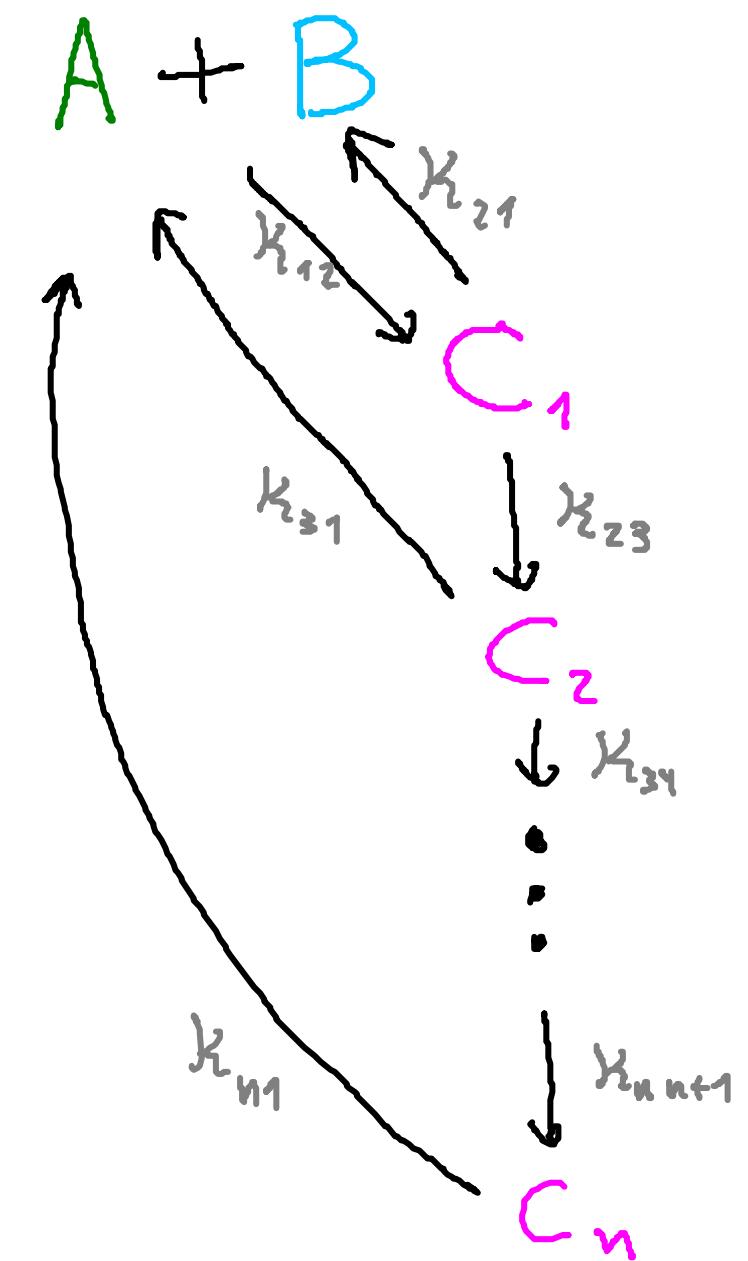
# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T



Red de McKeithan

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T

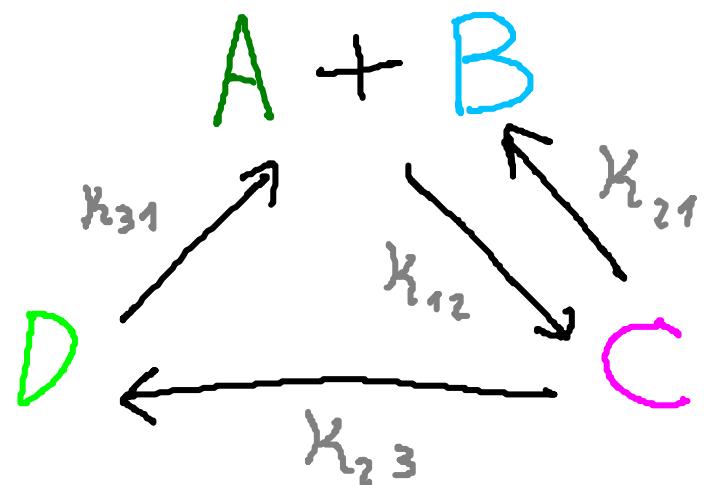
Tras n pasos,  
el modelo general



Red de McKeithan

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T

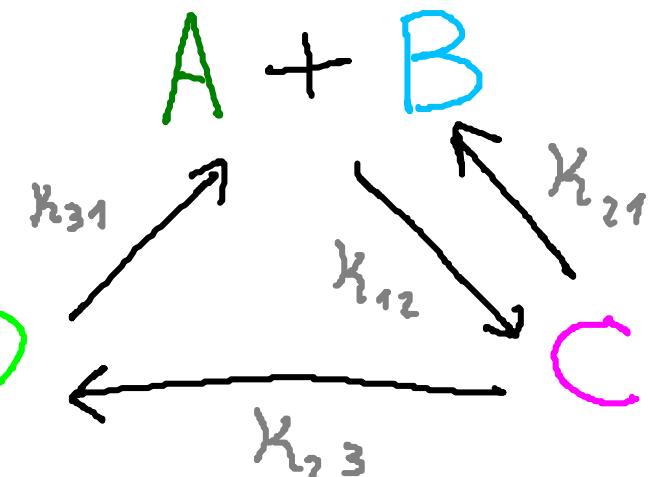
Volvamos al  
caso simple



# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T

¿Cómo evolucionan las concentraciones con el tiempo?

Dinámicas de acción de masa

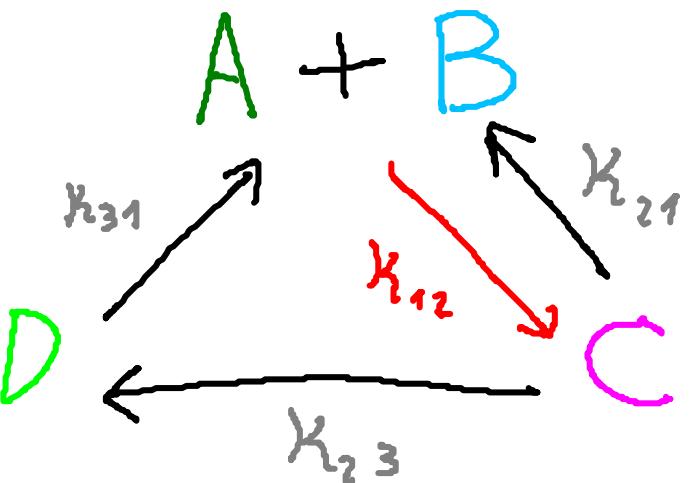


$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d[A]}{dt} = \\ \frac{d[B]}{dt} = \\ \frac{d[C]}{dt} = \\ \frac{d[D]}{dt} = \end{array} \right.$$

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T

¿Cómo evolucionan las concentraciones con el tiempo?

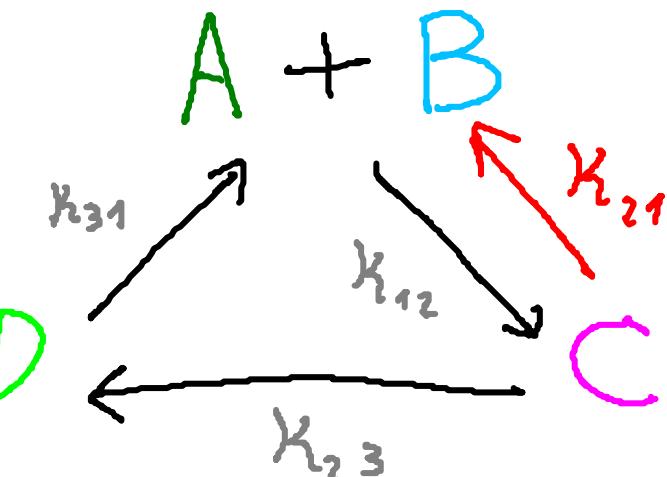
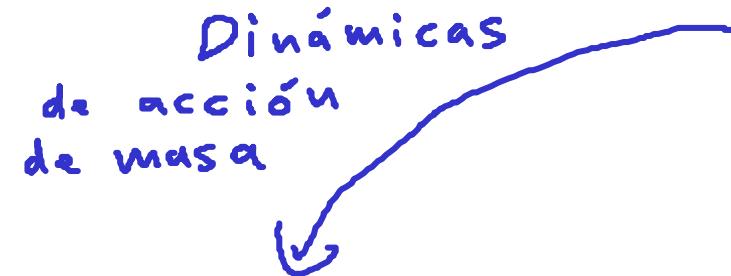
Dinámicas de acción de masa



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

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T

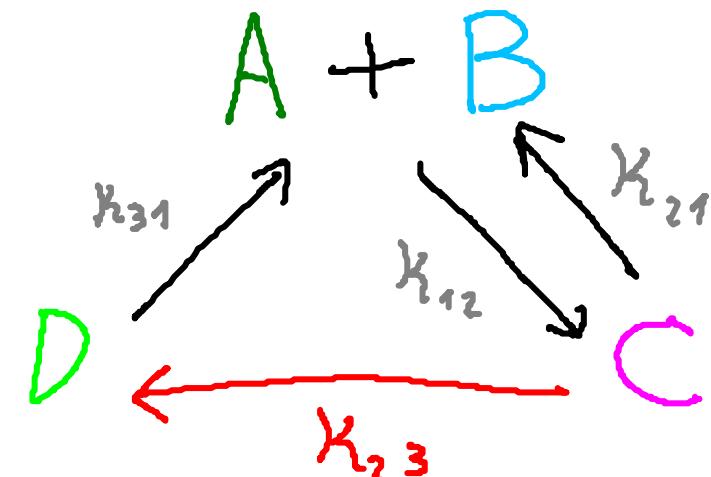
¿Cómo evolucionan las concentraciones con el tiempo?



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

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T

¿Cómo evolucionan las concentraciones con el tiempo?

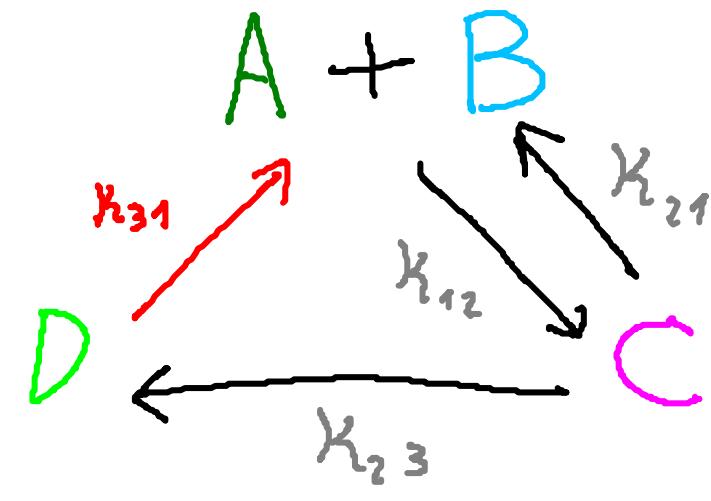


$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d[A]}{dt} = -k_{12}[A][B] + k_{21}[C] \\ \frac{d[B]}{dt} = -k_{12}[A][B] + k_{21}[C] \\ \frac{d[C]}{dt} = k_{12}[A][B] - k_{21}[C] - k_{23}[C] \\ \frac{d[D]}{dt} = k_{23}[C] \end{array} \right.$$

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T

¿Cómo evolucionan las concentraciones con el tiempo?

Dinámicas de acción de masa

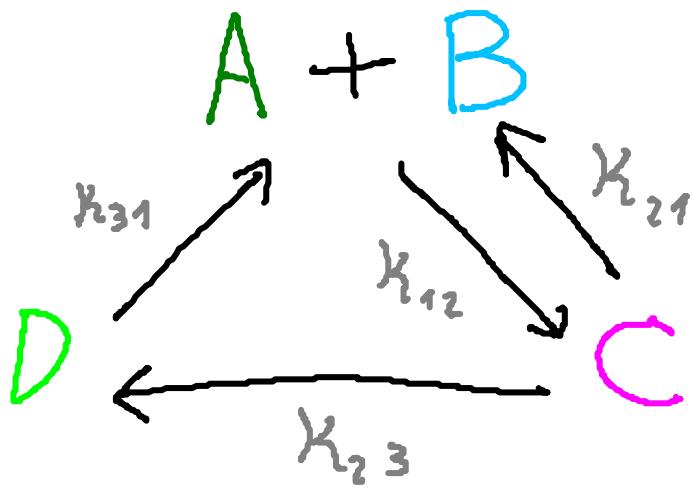


$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d[A]}{dt} = -k_{12}[A][B] + k_{21}[C] + k_{31}[D] \\ \frac{d[B]}{dt} = -k_{12}[A][B] + k_{21}[C] + k_{31}[D] \\ \frac{d[C]}{dt} = k_{12}[A][B] - k_{21}[C] - k_{23}[C] \\ \frac{d[D]}{dt} = k_{23}[C] - k_{31}[D] \end{array} \right.$$

# UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T

¿Cómo evolucionan las concentraciones con el tiempo?

Dinámicas de acción de masa

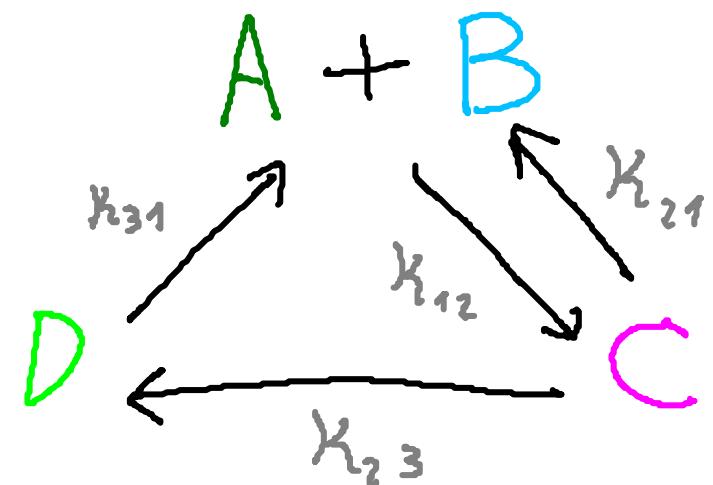


$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d[A]}{dt} = -k_{12}[A][B] + k_{21}[C] + k_{31}[D] \\ \frac{d[B]}{dt} = -k_{12}[A][B] + k_{21}[C] + k_{31}[D] \\ \frac{d[C]}{dt} = k_{12}[A][B] - k_{21}[C] - k_{23}[C] \\ \frac{d[D]}{dt} = k_{23}[C] - k_{31}[D] \end{array} \right.$$

polinomios!

# + $k_{31}[D]$ UNA REACCIÓN QUÍMICA PARA LA ACTIVACIÓN DE CÉLULAS T

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



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

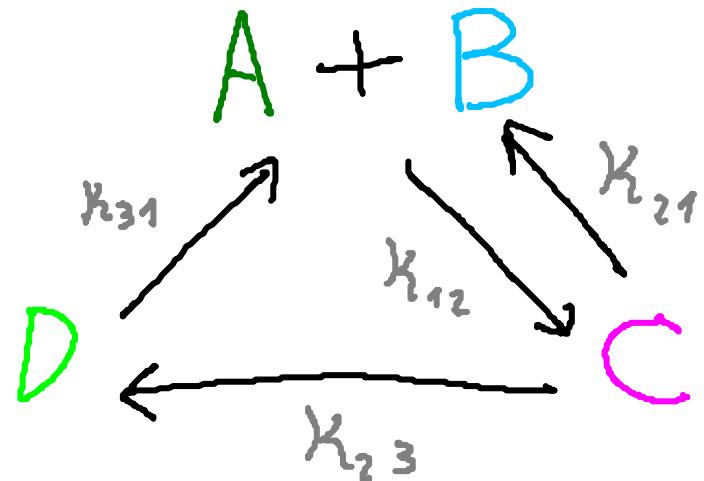
$$\dot{O} = -k_{12}[A][B] + k_{21}[C] + k_{31}[D]$$

$$\dot{O} = k_{12}[A][B] - k_{21}[C] - k_{23}[C]$$

$$\dot{O} = k_{23}[C] - k_{31}[D]$$

# 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

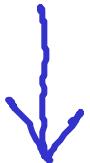


ALICIA

DICKENSTEIN

Una pregunta relacionada...

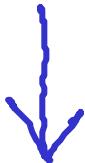
Dada una red de reacciones bioquímicas,  
¿cuántos estados estables puede haber a  
lo sumo para una elección de constantes de velocidad?



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...

THM. (Bürgisser, Ergür, TC)



Sea

$$\left\{ \begin{array}{l} O = a_{1,1}x^{\alpha_1}y^{\beta_1} + \dots + a_{1,t}x^{\alpha_t}y^{\beta_t} \\ O = a_{2,1}x^{\alpha_1}y^{\beta_1} + \dots + a_{2,t}x^{\alpha_t}y^{\beta_t} \end{array} \right.$$

El azar nos facilita a lo sumo

con  $a_{i,j}$  variables normales independientes de media 0 y varianza 1,

el número de ceros reales positivos es

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

en promedio.

Eskerrik asko  
zur e arretagatik!