



HAL
open science

Identifiabilité de systèmes d'équations aux dérivées partielles semi-discrétisées et applications à l'identifiabilité paramétrique de modèles en pharmacocinétique et en pollution.

Nathalie Verdière

► **To cite this version:**

Nathalie Verdière. Identifiabilité de systèmes d'équations aux dérivées partielles semi-discrétisées et applications à l'identifiabilité paramétrique de modèles en pharmacocinétique et en pollution.. Mathématiques [math]. Université de Technologie de Compiègne, 2005. Français. NNT: . tel-00011838v2

HAL Id: tel-00011838

<https://theses.hal.science/tel-00011838v2>

Submitted on 28 Mar 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ TECHNOLOGIQUE DE COMPIÈGNE

THÈSE

présentée pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université technologique de Compiègne

Spécialité : Mathématiques Appliquées.

par

Nathalie Verdière

Titre de la thèse :

**Identifiabilité de systèmes d'équations aux dérivées partielles
semi-discrétisées et applications à l'identifiabilité paramétrique de modèles
en pharmacocinétique et en pollution.**

soutenue le 7 décembre 2005 devant le jury composé de

M.	El Badia Abdellatif	Professeur à l'UTC (Compiègne)	Président,
M.	Della Dora Jean	Professeur à LMC-IMAG (Grenoble)	Rapporteur,
M.	Meizel Dominique	Professeur à l'ENSIL (Limoges)	Rapporteur,
M.	Boulier François	Maître de conférence à LIFL (Lille)	Examineur,
Mm.	Denis Vidal Liliane	Maître de conférence à l'UTC (Compiègne)	Directrice de thèse,
Mm.	Joly-Blanchard Ghislaine	Professeur à l'UTC (Compiègne)	Directrice de thèse.

Remerciements

Je tiens à remercier très chaleureusement mes deux directrices de thèse, G. Joly Blanchard et L. Denis-Vidal qui m'ont guidée durant ma thèse et m'ont permis de franchir de nombreux obstacles avec confiance, mes collègues de l'Université Technologique de Compiègne qui m'ont encouragée.

Je remercie également les membres du jury et tout particulièrement J. Della Dora et D. Meizel qui m'ont apporté de précieuses remarques permettant d'améliorer mon mémoire.

Je tiens également à remercier F. Boulier pour avoir consenti à examiner mon travail, ainsi qu'A. El Badia qui a accepté d'être président de mon jury.

Enfin, merci à toute ma famille et à mes amis, en particulier Dominique pour leurs encouragements constants.

Résumé

Avant d'estimer les paramètres intervenant dans des systèmes dynamiques, linéaires ou non-linéaires, contrôlés ou non contrôlés, il est important d'effectuer une étude d'unicité des paramètres considérés par rapport aux données expérimentales. Cette étude est encore appelée identifiabilité. Plusieurs méthodes ont été développées ces dernières années, en particulier la méthode entrée-sortie basée sur l'utilisation de l'algèbre différentielle. Les résultats obtenus à partir de celle-ci permettent de mettre en place des méthodes numériques pour obtenir une première estimation des paramètres, ceci sans aucune connaissance a priori de leur valeur. Cette première estimation peut alors être utilisée comme point de départ d'algorithmes itératifs spécialisés dans l'étude des problèmes mal posés : la régularisation de Tikhonov.

Dans cette thèse, deux modèles non linéaires en pharmacocinétique de type Michaelis-Menten ont tout d'abord été étudiés. Ensuite, nous nous sommes intéressés à un modèle de pollution décrit par une équation aux dérivées partielles parabolique. Le terme source à identifier était modélisé par le produit de la fonction débit par la masse de Dirac, dont le support est la position de la source polluante. Le but du travail était de fournir une première estimation de la source polluante. Après avoir obtenu l'identifiabilité du problème continu, nous avons démontré l'identifiabilité d'un problème approché en reprenant les outils utilisés par la méthode entrée-sortie. Celui-ci a été obtenu en approchant la masse de Dirac par une fonction gaussienne puis en semi-discrétisant le système en espace. Les résultats d'identifiabilité ont été obtenus quel que soit le nombre de points de discrétisation en espace. De cette étude théorique, nous en avons déduit des algorithmes numériques donnant une première estimation de la source polluante.

Mots clés : Identifiabilité, estimation paramétrique, systèmes non linéaires, équations aux dérivées partielles, semi-discrétisation, modèle en biologie, modèle de pollution.

Abstract

Before estimating the parameters appearing in a linear or non-linear, controlled or uncontrolled, dynamical system, it is necessary to study the unicity of the parameters compared to the experimental data. This study is still called identifiability. Several methods were developed these last years, in particular the input-output method based on the use of differential algebra. The results obtained from it make it possible to set up numerical methods to obtain a first estimate of the parameters, this without any knowledge a priori of their value. This first estimate can then be used as starting point of iterative algorithms specialized in the study of the ill-posed problems : the regularization of Tikhonov.

In this thesis, two nonlinear models in pharmacokinetic were first of all studied. Then, we were interested in a model of pollution described by a parabolic partial derivative equation. The source term to be identified was modelled by the product of the function flow with the Dirac mass, of support the position of the polluting source. The goal of the work was to provide a first estimate of the polluting source. After having obtained the identifiability of the continuous problem, the identifiability of an approximated model was obtained by using the step of input-output method. The approximated model was obtained by approaching the Dirac mass by a Gaussian function and by discretizing the system in space then. The results of identifiability were obtained whatever the number of points of discretization in space. From this study, we deduced numerical algorithms giving a first estimate of the polluting source.

Key words : Identifiability, parameter estimation, nonlinear systems, partial differential equations, semi-discretization, biological model, pollution model.

Table des matières

1	Les systèmes étudiés	3
1.1	Quels modèles ?	3
1.2	Un modèle pharmacocinétique	4
1.3	Un modèle de pollution	6
2	Algèbre différentielle	11
2.1	Anneaux et corps différentiels	12
2.2	Polynômes différentiels	12
2.3	Idéaux différentiels	14
2.4	Réduction	15
2.4.1	Théorème des zéros	16
2.4.2	Présentation caractéristique d'un idéal régulier	17
2.4.3	Algorithme de Rosenfeld-Groebner	18
3	Identifiabilité	19
3.1	Définitions d'identifiabilité	19
3.1.1	Définitions analytiques	19
3.1.2	Définitions dans le cadre algébrique	21
3.2	Méthodes classiques pour systèmes linéaires	22
3.2.1	Méthode basée sur la matrice de transfert du système	22
3.2.2	Approche par changement base d'état	24
3.3	Les modèles non-linéaires	25
3.4	Méthode entrée-sortie	25
4	Estimation paramétrique	31
4.1	Méthodes pour obtenir une première estimation des paramètres	31
4.2	Un algorithme d'optimisation : celui de Levenberg-Marquardt	33
5	Identifiabilité et estimation paramétrique de 2 modèles en pharmacocinétique représentés par des équations différentielles non linéaires	37
5.1	Identifiabilité et estimation paramétrique du premier modèle en pharmacocinétique	37
5.2	Identifiabilité et estimation paramétrique du deuxième modèle en pharmacocinétique	45
6	Identifiabilités du modèle de pollution	51
6.1	Identifiabilité du modèle continu	52
6.1.1	Cas où le débit est constant	52
6.1.2	Cas où le débit dépend du temps	57
6.1.3	Pourquoi étudier un système approché ?	58

6.1.4	Erreur sur la solution lorsque l'on approche la masse de Dirac par une fonction gaussienne	59
6.2	Identifiabilité du modèle semi-discrétisé quand le débit est indépendant du temps	61
6.2.1	La condition initiale n'est pas connue	61
6.2.2	La condition initiale est connue	69
6.3	Identifiabilité du modèle semi-discrétisé quand le débit est une fonction régulière du temps	71
6.3.1	La condition initiale n'est pas connue	71
6.3.2	La condition initiale est connue	74
7	Estimation d'une source de pollution	79
7.1	Un problème de simulation	79
7.2	Erreur commise lors de la semi-discrétisation du système	81
7.3	Le modèle dont le débit est indépendant du temps	82
7.3.1	Données	83
7.3.2	La condition initiale n'est pas connue	83
7.3.3	La condition initiale est connue	86
7.4	Le modèle dont le débit est dépendant du temps	88
7.4.1	Données	88
7.4.2	La condition initiale n'est pas connue	88
7.4.3	La condition initiale est connue	93
A	Contrôlabilité, Observabilité	105
A.1	Contrôlabilité	105
A.1.1	Les systèmes linéaires	106
A.1.2	Les systèmes non linéaires	106
A.2	Observabilité	107
A.2.1	Les systèmes linéaires	108
A.2.2	Les systèmes non-linéaires	108
B	Compléments sur le problème spectral	111
B.1	Rappel des théorèmes de [10]	111
B.2	Problème spectral	111
C	Compléments de démonstrations dans le cas où le débit est constant	115
D	Compléments de démonstrations dans le cas où le débit est une fonction dépendant du temps	121
E	Corps de Mikusinski, Identifiabilité linéaire, Estimateurs	127
E.1	Algèbre différentielle	127
E.2	Extension de corps différentielle	127
E.3	Opérateurs différentiels linéaires	128
E.4	Le corps différentiel d'opérateurs de Mikusinski	128
E.4.1	Le corps des opérateurs de Mikusinski	128
E.4.2	La dérivée algébrique	129
E.5	Identifiabilité	129
E.6	Estimateurs	130

Table des figures

1.1	Schéma d'un processus	3
1.2	Schéma expliquant les modèles en pharmacocinétique	5
5.1	Système 1, $\theta_{\sigma_1} = (0.0833, 0.139, 0.058, 0.027)$	44
5.2	Système 1, $\theta_{\sigma_2} = (0.0936, 0.0974, 0.068, 0.0223)$	44
5.3	Système 1, $\theta_{\sigma_1}^{LM} = (0.0106, 1.0776, 0.106, 0.0259)$	44
5.4	Système 1, $\theta_{\sigma_2}^{LM} = (0.011, 0.9706, 0.0978, 0.02)$	44
5.5	Système 1, $\theta_{\sigma_1} = (0.0759, 0.1431, 0.0811, 0.0164)$	45
5.6	Système 1, $\theta_{\sigma_2} = (0.0343, 0.1151, 0.0759, 0.0069)$	45
5.7	Système 1, $\theta_{\sigma_1}^{LM} = (0.0109, 1.0271, 0.102, 0.0196)$	45
5.8	Système 1, $\theta_{\sigma_2}^{LM} = (0.0106, 1.0535, 0.1044, 0.0196)$	45
5.9	Système 2 : $\theta_{\sigma_1} = (0.03, 0.03, 0.2, 17.3)$	49
5.10	Système 2 : $\theta_{\sigma_1}^{LM} = (\beta_1, \beta_2, k_a, \gamma) = (0.007, 0.07, 0.2, 50.4)$	49
5.11	Système 2, $\theta_{\sigma_1} = (0.0244, 0.0263, 0.7, 22.736)$	49
5.12	Système 2, $\theta_{\sigma_2} = (0.017, 0.011, 0.3, 0.9641)$	49
5.13	Système 2, $\theta_{\sigma_1}^{LM} = (0.028, 0.03, 0.29, 49.67)$	50
5.14	Système 2, $\theta_{\sigma_2}^{LM} = (0.0374, 0.0328, 0.2711, 49.66)$	50
7.1	Graphe du produit $w_n(a)w_n(x)$	80
7.2	Concentrations observées quand $a = 230m$	84
7.3	Concentrations observées quand $a = 566m$	86
7.4	débit utilisé	88
7.5	concentrations observées non bruitées quand $a = 273m$	90
7.6	concentrations observées non bruitées quand $a = 442m$	90
7.7	concentrations observées non bruitées quand $a = 547m$	90
7.8	concentrations observées non bruitées quand $a = 621m$	90
7.9	débit obtenu quand $a = 273m$	91
7.10	débit obtenu quand $a = 547m$	91
7.11	débit obtenu quand $a = 621m$	91
7.12	débit obtenu quand $a = 273m$	92
7.13	débit obtenu quand $a = 547m$	92
7.14	débit obtenu quand $a = 621m$	92
7.15	Concentrations observées quand $a = 442m$	99
7.16	Concentrations observées quand $a = 547m$	99
7.17	Concentrations observées quand $a = 621m$	99
7.18	Concentrations observées quand $a = 873m$	99
7.19	débit obtenu quand $a = 442m$	100
7.20	débit obtenu quand $a = 547m$	100

7.21 débit obtenu quand $a = 621m$	100
7.22 débit obtenu quand $a = 853m$	100

Introduction

Les travaux présentés dans ce mémoire sont basés sur l'utilisation de l'algèbre différentielle pour étudier des problèmes d'identifiabilité. L'étude de l'identifiabilité est une étape importante dans la modélisation car elle permet de savoir si le modèle proposé est correct ou non. Elle peut être définie à partir de la notion de problème inverse [30] : on dispose d'observations (mesures expérimentales) et on veut estimer les paramètres intervenant dans les équations du modèle. Mais avant de résoudre numériquement l'estimation de ceux-ci se pose le problème de leur unicité, ce que l'on appelle l'identifiabilité du système. Si l'unicité n'est pas garantie par les données disponibles alors, soit des données supplémentaires doivent être ajoutées, soit l'ensemble des données admissibles doit être restreint. Depuis les années 1990, l'algèbre différentielle a connu un développement accru en automatique sous l'initiative de M. Fliess. C'est à cette occasion que l'idée de l'utiliser pour traiter des problèmes d'identifiabilité est apparue.

Ce mémoire fait suite à la thèse de C. Noiret [42] dans laquelle était comparée trois méthodes appliquées à des équations aux dérivées différentielles non linéaires : méthode entrée-sortie basée sur l'algèbre différentielle et élaborée à partir des travaux de F. Ollivier [44], méthode des similarités [46] et méthodes des invariants [42]. La première s'est avérée être la plus utilisable pour les modèles contrôlés car elle est à la base d'un algorithme global pour l'estimation de paramètres. Etant donné ce début d'étude prometteuse, j'ai étudié cette méthode sur trois applications présentées dans le premier chapitre : les deux premières étant en pharmacocinétique, la troisième, un problème de pollution.

Dans un premier temps, je ferai des rappels d'algèbre différentielle au chapitre 2. Le chapitre 3 consistera à introduire les notions d'identifiabilité vues dans la littérature et à préciser celles que nous utiliserons pour traiter les trois applications.

Le chapitre 4 permettra de faire le lien entre l'identifiabilité et l'estimation paramétrique. En effet, nous verrons que les résultats théoriques obtenus grâce à l'algèbre différentielle pour prouver l'identifiabilité du système permettent de faire une première estimation des paramètres. Nous y introduirons également l'algorithme local de Levenberg-Marquardt adapté dans l'étude de problèmes mal posés et qui nous permettra, dans la suite, d'affiner nos résultats numériques.

Dans le chapitre 5, nous traiterons, théoriquement et numériquement, de deux modèles en pharmacocinétique. Ceux-ci sont des modèles d'équations aux dérivées ordinaires non linéaires proposés par la faculté de pharmacie de Montpellier. L'utilisation de l'algèbre différentielle introduit des dérivées qu'il faut pouvoir ensuite estimer aux mieux numériquement. Pour cela, nous introduirons dans cette partie une première méthode basée sur les B-splines et développée par S. Ibrir et Diop [27]. En effet, elle présente l'avantage de ne demander aucune connaissance statistique sur l'incertitude des mesures.

La troisième application, traitée dans les chapitres 6 et 7 constitue une part importante de ce mémoire. Elle a été fournie par le conseil régional de Picardie. Il s'agit de la modélisation d'un problème de pollution accidentelle dans une rivière, le but du problème étant d'identifier la

source d'une pollution, c'est à dire le débit et la localisation de la source de pollution. L'équation impliquée est une équation aux dérivées partielles parabolique. Bien que le système soit identifiable (cf. chapitre 6), cette équation est difficilement exploitable numériquement. Par exemple, nous verrons dans les chapitres 6 et 7 que la simple résolution directe du problème pose des problèmes numériques. Cette équation a donc été discrétisée en espace, ce qui nous a donné un système d'équations différentielles. Grâce à l'algèbre différentielle, nous avons pu montrer l'identifiabilité de la source de pollution, ceci quel que soit le nombre de points de discrétisation. De plus, son utilisation a conduit à des algorithmes globaux permettant une première estimation des paramètres. Cette partie numérique sera vue dans le chapitre 7. Des dérivées d'ordre très important sont intervenues dans notre estimation. Pour les calculer, nous avons utilisé une méthode proposée par M. Fliess et H. Sira-Ramirez, basée sur le corps de Mikusinski. Celle-ci ne demande pas de connaissance sur les propriétés statistiques des signaux et des bruits et, comme nous le verrons dans le chapitre 7, elle permet de détruire les bruits structurés. De plus, l'estimation des dérivées repose sur des formules explicites, ce qui conduit à des calculs très rapides.

Chapitre 1

Les systèmes étudiés

La première partie de ce chapitre est composée de généralités sur les modèles paramétriques. Nous y présentons la notion de *processus* et introduisons certaines variables interagissant sur celui-ci. Puis, dans la deuxième et troisième partie, nous expliciterons les modèles qui seront étudiés dans les chapitres suivants.

1.1 Quels modèles ?

Les notions que nous allons introduire vont permettre de définir la notion de modélisation. Rappelons que cela consiste à traduire en termes mathématiques des problèmes réels qui peuvent provenir de la physique, de la biologie, Elle dépend entièrement de ce que le modélisateur souhaite étudier en fonction de ce qu'il peut récolter comme informations.

Un processus réel est un système dynamique, c'est à dire un système qui évolue avec le temps. Nous choisissons arbitrairement de mettre en évidence certaines variables interagissant avec le processus (cf graphe (1.1)) :

- des **entrées** ou **contrôles** notes $u = (u_1, \dots, u_l)$. Ce sont des grandeurs connues et dont nous maîtrisons plus ou moins l'évolution. C'est l'action de l'utilisateur sur le système.
- des **perturbations**, notées b agissant sur le système. Elles ne sont pas maîtrisées par l'utilisateur et leurs natures sont plus ou moins inconnues.
- des **sorties** notées $y = (y_1, \dots, y_m)$ mesurées et caractérisant l'action du processus sur l'environnement.
- des grandeurs liées au système mais ne pouvant être mesurées directement. Certaines d'entre elles nous intéressent, elles seront notées z .

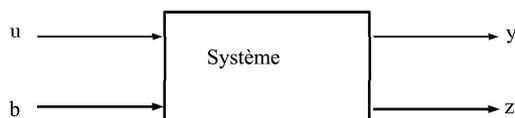


FIG. 1.1 – Schéma d'un processus

Le modèle M est une règle permettant de calculer, à partir de grandeurs connues ou mesurées sur le système, d'autres grandeurs dont nous espérons qu'elles ressembleront aux grandeurs du système qui nous intéresse. Certains modèles font intervenir des grandeurs inconnues constantes, appelées *paramètres* que l'on souhaite estimer à partir de mesures effectuées sur le processus mais aussi à partir d'informations a priori disponibles. Ceci permet de bâtir le *modèle paramétrique* $M(\theta)$, où $M(\theta)$ désigne le modèle obtenu à partir de la structure de modèle $M(\cdot)$ dans laquelle le vecteur de paramètre est θ . Le choix de $M(\cdot)$ est appelé *caractérisation*, en effet, pour un même problème on peut obtenir plusieurs modèles. Tous ne sont pas équivalents. Nous intervenons durant cette étape de caractérisation en étudiant l'*identifiabilité* et l'*identification* de ces paramètres. Ces notions seront étudiées dans les chapitres suivants.

Les modèles étudiés par la suite seront des modèles paramétriques à temps continu décrits par des équations différentielles dont la forme générale est donnée par :

$$\begin{cases} \dot{x}(t, \theta) = f(x(t, \theta), \theta) + \sum_{i=1}^l u_i(t) g_i(x(t, \theta), \theta), \\ x(0, \theta) = x_0(\theta), \\ y(t, \theta) = h(x(t, \theta)). \end{cases} \quad (1.1)$$

θ est le vecteur des paramètres qui appartient à un ensemble $U_{ad} \subset \mathbb{R}^q$. Le vecteur $x(t, \theta) \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$, pour tout $\theta \in U_{ad}$ et tout $t \in [0, T]$ représente le vecteur des variables d'état et où Ω un ouvert connexe de \mathbb{R}^n . Le vecteur u de \mathbb{R} dans \mathbb{R}^l est celui des commandes. Enfin $y : \mathbb{R} \times U_{ad} \rightarrow \mathbb{R}^m$ est le vecteur des sorties. De plus, chaque application $f, g_i, i = 1, \dots, l$ est défini de $\Omega \times U_{ad}$ vers Ω et l'application h de $\Omega \times U_{ad}$ vers \mathbb{R}^m .

1.2 Un modèle pharmacocinétique

Dans cette partie, nous allons nous intéresser à un problème d'infection intracellulaire qui peut prendre la forme de la tuberculose par exemple. Comme les concentrations d'antibiotiques sont souvent moins importantes à l'intérieur des cellules que dans les fluides extracellulaires, il est très difficile de combattre ces maladies. Un moyen d'amener au plus près les médicaments vers les cellules infestées va être d'utiliser les macrophages qui constituent l'une des premières lignes de défense contre les organismes infectieux. Ce sont de grosses cellules qui se trouvent proches de l'extérieur du corps : le poumon, le foie et qui ne détruisent que partiellement les structures étrangères. L'expérience principale va se faire in vivo, c'est à dire que l'on va injecter des macromolécules solubles qui vont transporter le médicament et l'amener vers les macrophages. Ces derniers vont ainsi absorber les macromolécules avec le médicament (cf la figure 1.2). Avant de mener une étude in vivo, il est nécessaire d'étudier la capacité des récepteurs du macrophage à absorber ces macromolécules solubles et de quantifier les différents aspects d'un tel procédé. Pour effectuer cette expérience, du glucose oxydase a été utilisé car il est facilement détectable grâce à la spectrométrie, aux techniques immunologiques,....., d'où, le modèle pharmacocinétique :

$$\begin{cases} \dot{x}_1 &= \alpha_1(x_2 - x_1) - \frac{V_m x_1}{k_c + x_1}, \\ \dot{x}_2 &= \alpha_2(x_1 - x_2), \\ x_1(0) &= C_0, \\ x_2(0) &= 0, \\ y &= x_1, \end{cases} \quad (1.2)$$

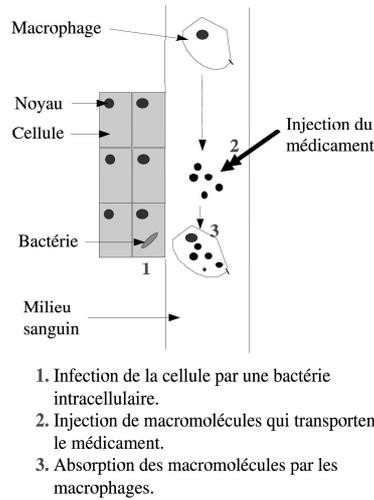


FIG. 1.2 – Schéma expliquant les modèles en pharmacocinétique

où x_1 (resp. x_2) est la concentration de glucose oxydase à l'extérieur du macrophage (resp. à l'intérieur), V_m est le taux maximal d'absorption des récepteurs se situant sur les membranes cellulaires des macrophages, k_c est la concentration molaire du ligand (c'est une molécule qui permet de reconnaître une molécule réceptrice), α_1 (resp. α_2) est le taux de transfert à travers la membrane du macrophage de l'intérieur vers l'extérieur (resp. de l'extérieur vers l'intérieur). L'équation (5.1) permet donc de calculer en tout temps la quantité absorbée par les récepteurs des macrophages. Aussi, les paramètres à identifier sont

$$\theta = (\alpha_1, k_c, V_m, \alpha_2). \quad (1.3)$$

Une fois les macrophages mieux connus, vient l'étude in vivo du transporteur du médicament, une macromolécule sélectionnée qui va amener le médicament vers les macrophages. Toutefois, cette macromolécule est très sensible aux procédés d'étude habituellement utilisés. Pour remédier à ce problème, le glucose oxydase est de nouveau utilisé mais ici comme médicament toujours pour des raisons de facilité d'étude. C'est ce qu'on appelle encore une méthode de compétition. L'estimation précédente des paramètres $(\alpha_1, k_c, V_m, \alpha_2)$ est reprise dans le deuxième modèle qui est :

$$\begin{cases} \dot{x}_1 &= \alpha_1(x_2 - x_1) - \frac{k_a V_m x_1}{k_c k_a + k_c x_3 + k_a x_1}, \\ \dot{x}_2 &= \alpha_2(x_1 - x_2), \\ \dot{x}_3 &= \beta_1(x_4 - x_3) - \frac{k_c V_m x_3}{k_c k_a + x_3 + k_a x_1}, \\ \dot{x}_4 &= \beta_2(x_3 - x_4), \\ y &= x_1, \\ x_1(0) &= C_0, \\ x_2(0) &= 0, \\ x_3(0) &= \gamma C_0, \\ x_4(0) &= 0, \end{cases}$$

x_1, x_3 (resp. x_2, x_4) sont les concentrations de glucose oxydase et du transporteur à l'extérieur (resp. à l'intérieur) du macrophage. β_1 (resp. β_2) représente le taux de transfert à travers la membrane de la macromolécule de l'intérieur vers l'extérieur (resp. de l'extérieur vers l'intérieur). k_c est le taux de ligand correspondant au glucose oxydase et k_a son compétiteur. On suppose observer $y = x_1$ et connaître, à l'état initial la concentration de glucose oxydase à l'extérieur, soit C_0 mais pas la concentration du transporteur à l'extérieur du macrophage, i.e. γ . Les paramètres à identifier qui portent alors sur le transporteur sont

$$\theta = (\beta_1, \beta_2, k_a, \gamma). \quad (1.4)$$

Une fois l'identifiabilité et l'identification faites, il est alors possible de connaître l'interaction du transporteur avec les récepteurs du macrophage et donc la quantité de médicament que ce dernier peut transporter.

La difficulté de ce problème est due à la non linéarité du modèle et au faible nombre de variables d'état observées.

1.3 Un modèle de pollution

Pour s'assurer de la qualité de l'eau d'une rivière, il est nécessaire d'analyser sa composition et la qualité des sédiments qu'elle transporte. On peut aussi étudier la contamination de la chair des poissons qui y vivent ainsi que la diversité des espèces aquatiques qui fréquentent le fond de la rivière ou encore la diversité des végétaux qui peuplent les rives.

Par qualité des eaux, on entend ses propriétés physiques, chimiques et biologiques. Elles peuvent être évaluées en mesurant la quantité de matière organique en suspension, de produits azotés et phosphorés contenus dans les eaux. La matière organique est constituée d'un ensemble de substances organiques dont la dégradation implique une consommation d'oxygène dissous dans l'eau. Ces substances sont contenues dans les rejets d'origine humaine et agricole et dans les nombreux rejets industriels. L'importance de ces pollutions est estimée par les mesures suivantes :

- DBO : Demande Biologique en Oxygène qui est la quantité d'oxygène dissous consommé en 5 jours par les micro-organismes vivants présents dans l'eau pour réaliser une auto-épuration de celle-ci.
- DCO : Demande Chimique en Oxygène qui représente le poids d'oxygène nécessaire à la dégradation par voie chimique des substances polluantes.

Même s'il faut 5 jours pour avoir des résultats sur la DBO, sa connaissance est beaucoup plus pertinente. Aussi, c'est sur celle-ci que nous allons travailler. Le problème qui va nous intéresser est celui de la détermination du débit et des positions des sources à l'origine de la pollution observée. L'équation impliquée est alors l'équation parabolique aux dérivées partielles suivante :

$$(\Sigma) \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t, \cdot) + V \frac{\partial u}{\partial x}(t, \cdot) - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, \cdot) + Ru(t, \cdot) = \sum_i \lambda_i(t) \delta(\cdot - a_i) \text{ dans } [0, T] \times \Omega, \\ u(0, x) = g(x) \text{ dans } \Omega \\ u(t, 0) = 0, \\ \frac{\partial u}{\partial x}(t, L) = 0, \end{cases} \quad (1.5)$$

où u , V , D , R désignent respectivement la concentration de la substance étudiée, la vitesse de transport, le coefficient de diffusion (dispersion), le terme de réaction supposé de premier ordre. Le membre de droite représente l'origine de la source de pollution, les a_i désignent la position

des sources possibles de pollution, λ_i le débit correspondant.

Le but du problème est de déterminer, à partir de (1.5) ou d'un système approché, la position et le débit d'une source polluante. Comme nous le verrons dans les chapitres 6 et 7, la résolution du problème direct est difficile numériquement. Il paraît donc peu raisonnable de chercher à résoudre le problème inverse qui est, par définition, mal posé, ce qui nous a conduit à approcher le système (1.5).

Nous avons choisi d'utiliser l'algèbre différentielle pour pouvoir à partir de l'étude théorique faire une première estimation de la source polluante. Cet outil s'utilise sur des équations différentielles dont les fonctions sont très régulières. Aussi, pour mener notre étude, nous allons dans un premier temps approcher la masse de Dirac $\delta(\cdot - a)$ par la fonction gaussienne

$$w(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} e^{-\frac{(x-a)^2}{\sigma^2}}. \quad (1.6)$$

D'où, le système

$$(\tilde{\Sigma}) \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t, \cdot) + V \frac{\partial u}{\partial x}(t, \cdot) - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, \cdot) + Ru(t, \cdot) = \frac{\lambda(t)}{\sigma\sqrt{\pi}} e^{-\frac{(x-a)^2}{\sigma^2}} & \text{dans } [0, T] \times \Omega, \\ u(0, x) = g(x) & \text{dans } \Omega \\ u(t, 0) = 0, \\ \frac{\partial u}{\partial x}(t, L) = 0. \end{cases} \quad (1.7)$$

Cette approximation sera analysée par une étude de l'erreur commise sur la solution. Notons le second membre $f(t, x)$. Ensuite, ce système approché est discrétisé par un schéma aux différences finies en espace. Supposons que l'on discrétise la rivière en $N+1$ points et approchons $\frac{\partial u}{\partial x}(t, x)$ et $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x)$ par la méthode des différences finies centrées.

On a donc $(x_i)_{i=0, \dots, N}$ une suite de points de discrétisation vérifiant :

$$\begin{aligned} x_i &= ih, \quad i=1, \dots, N-1, \\ x_0 &= 0, \\ x_N &= L, \end{aligned} \quad (1.8)$$

où $h = L/N$ représente le pas de discrétisation. Notons $u_{h,i}(t) = u(t, x_i)$. Supposons la solution u suffisamment régulière. En utilisant le développement de Taylor à l'ordre 2 puis à l'ordre 4 par rapport à la variable x , nous pouvons écrire pour $i = 1, \dots, N$:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t, x_i) = \frac{1}{h} [u_{h,i}(t) - u_{h,i-1}(t)] + \frac{h}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x_i + \varphi_{1,i}h), \quad \text{avec } |\varphi_{1,i}| < 1, \quad (1.9)$$

et

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x_i) = \frac{1}{h^2} [u_{h,i-1}(t) - 2u_{h,i}(t) + u_{h,i+1}(t)] + \frac{h^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(t, x_i + \varphi_{2,i}h), \quad \text{avec } |\varphi_{2,i}| < 1. \quad (1.10)$$

$$\text{avec } g_h = \begin{pmatrix} g(x_1) \\ \vdots \\ g(x_N) \end{pmatrix}.$$

Par la suite, nous noterons les composantes de $v_h(t)$, $v_i(t)$ au lieu de $v_{h,i}(t)$.

Dans le chapitre 6, nous étudierons l'identifiabilité de ce modèle approché en distinguant le cas où le débit est constant et celui où il dépend du temps. Nous prouverons grâce à l'algèbre différentielle que le modèle est identifiable, ceci quel que soit le nombre de points de discrétisation. Cette étude théorique nous permettra de faire une première estimation de la source de pollution (chapitre 7) utilisable pour des algorithmes locaux, comme celui de Levenberg-Marquardt.

Chapitre 2

Algèbre différentielle

L'objectif de ce chapitre est d'introduire des notions d'algèbre différentielle qui permettront de définir proprement la notion de représentation et de manipulation de systèmes différentiels. Pour plus de précisions, on pourra se reporter aux ouvrages de Ritt [45] et de Kolchin [32]. En effet, étant donné un modèle, il ne suffit pas d'utiliser les opérations habituelles de l'algèbre différentielle comme la différentiation et l'élimination pour obtenir un modèle équivalent. Pour se convaincre de cette nécessité, considérons l'exemple suivant :

Exemple 1 : Soit I l'idéal différentiel (c'est tout simplement un sous-ensemble d'un corps différentiel K stable par dérivation) de l'anneau différentiel $K\{x, y\}$ (défini dans la partie 2.2) engendré par le modèle emprunté à [15] :

$$\begin{cases} \dot{x} = x, \\ y = x^2 + x. \end{cases} \quad (2.1)$$

Par différentiation, on montre que le polynôme $\dot{y} = 2x\dot{x} + \dot{x}$ est dans I (en fait, $(2x + 1)\dot{x} - \dot{y} = 0$ et il faut considérer un scindage suivant que $2x + 1$ est nul ou pas). Par élimination, on montre que $\dot{y} = 2x^2 + x$ et $x = 2y - \dot{y}$ sont dans I . Ainsi, les relations $y = (2y - \dot{y})(2y - \dot{y} + 1)$ et $x = 2y - \dot{y}$ sont des éléments de I . On pourrait donc penser que le modèle

$$\begin{cases} y = (2y - \dot{y})(2y - \dot{y} + 1), \\ x = 2y - \dot{y} \end{cases} \quad (2.2)$$

est équivalent au modèle (2.1). Or, $(y = -1/4, x = -1/2)$ est une solution de l'idéal différentiel engendré par ces équations et il n'y a pas de trajectoire du modèle (2.1) qui corresponde à cette solution. Ainsi, pour avoir une représentation équivalente, il ne faut pas prendre en compte cette solution singulière et ajouter l'inégalité $x \neq -1/2$ au modèle (2.2).

Bien sûr, si l'on pouvait définir une base d'un idéal différentiel comme on l'entend dans le sens courant, cela résoudrait bien des problèmes. Il serait facile de vérifier qu'un polynôme appartient à l'idéal, Et c'est au milieu des années soixante que H. Hironaka [26] a introduit la notion de *base standard* d'un idéal dans un anneau de polynômes. A la suite des travaux fondateurs de B. Buchberger [11] et des améliorations algorithmiques, le calcul des bases standard est devenu courant dans la majorité des logiciels de calcul symbolique.

S'inspirant du cadre algébrique classique, différents auteurs ont proposé des méthodes d'élimination dans le cadre différentiel, notamment des généralisations de la notion de base standard aux idéaux différentiels. Malheureusement, elles présentent deux types d'inconvénient. En effet,

ces bases différentielles sont en général de cardinal infini, et dans le cas contraire on ne peut pas garantir qu'il s'agisse bien d'une base standard.

La stratégie pour éviter ce genre de problème va être alors de renforcer les propriétés de l'idéal différentiel que l'on cherche à représenter en imposant qu'il soit premier ou régulier. De plus, ce n'est pas la notion de base standard qui va être utilisée mais celle d'*ensemble caractéristique*. Pour cela, nous allons présenter l'algorithme de Rosenfeld-Gröbner qui a été implémenté par F. Boulier sous maple [5], [6], [7]. Cet algorithme va consister à calculer une liste (par cela, nous devons comprendre une "intersection") d'idéaux différentiels réguliers représentés chacun par leur présentation caractéristique à partir d'un ensemble de polynômes différentiels et d'une relation d'ordre admissible donné. Informellement, les différents idéaux correspondent à différentes classes de solution. En particulier, l'algorithme sépare les solutions de départ qui ne dépendent pas du même nombre de constantes arbitraires.

2.1 Anneaux et corps différentiels

Une dérivation sur un anneau R est une application de R dans R qui vérifie pour tous $a, b \in R$:

$$\delta(a + b) = \delta a + \delta b \quad (2.3)$$

$$\delta(ab) = (\delta a)b + a(\delta b) \quad (2.4)$$

Un *anneau différentiel* (resp. *corps différentiel*) est un anneau (resp. corps) muni d'un ensemble fini de dérivations $\Delta = \{\partial_1, \dots, \partial_m\}$ qui commutent entre elles. Le monoïde commutatif engendré par les dérivations est noté Θ . Ses éléments sont les *opérateurs de dérivations* $\theta = \delta_1^{a_1} \dots \delta_m^{a_m}$ où les a_i sont des entiers positifs ou nuls.

La somme des exposants a_i est appelée l'*ordre de l'opérateur* θ et notée $ord(\theta)$. L'opérateur identité est l'unique opérateur d'ordre 0. Les autres opérateurs sont dits *propres*. Si $\theta = \delta_1^{a_1} \dots \delta_m^{a_m}$ et $\phi = \delta_1^{b_1} \dots \delta_m^{b_m}$ alors $\theta\phi = \delta_1^{a_1+b_1} \dots \delta_m^{a_m+b_m}$.

Un *idéal différentiel* A de R est un idéal de R stable par dérivation, c'est à dire vérifiant :

$$a \in A \Rightarrow \delta_i a \in A \quad (2.5)$$

Soit R un anneau différentiel et S un sous-ensemble de R , ΘS désigne le plus petit sous-ensemble de R contenant S qui soit stable par dérivation. Si $R_0 \subset R$ est un sous-anneau différentiel de R et si $S \subset R$, alors $R_0 S$ désigne le plus petit anneau différentiel contenant R_0 et S , i.e $R_0[\Theta S]$.

2.2 Polynômes différentiels

Soit $U = \{u_1, \dots, u_n\}$ un alphabet fini quelconque et K un corps différentiel. On note $K\{U\}$ l'anneau différentiel des polynômes différentiels à coefficients dans K , construit sur l'alphabet ΘU , i.e l'ensemble de toutes les dérivées θu_i avec θ élément de Θ . Les u_i sont appelées *indéterminées différentielles*.

Exemple 2 Soit u_i un élément de K . En algèbre ordinaire, si δ est la dérivation temporelle $\frac{d}{dt}$ alors \dot{u}_i , \ddot{u}_i et $u_i^{(k)}$ représentent respectivement les dérivées premières, secondes et $k^{ième}$ de u_i .

Exemple 3 :

$$(S) \begin{cases} p_1 = u_x^2 - 4u \\ p_2 = u_{xy}v_y - u + 1 \\ p_3 = v_{xx} - u_x. \end{cases}$$

Il y a deux dérivations qui sont ∂/∂_x et ∂/∂_y et deux indéterminées différentielles u et v représentant deux fonctions de x, y . On peut prendre pour corps des coefficients K le corps \mathbb{Q} des rationnels ou le corps des fractions rationnelles $\mathbb{Q}(x, y)$. L'anneau de polynômes différentiels est $K\{u, v\}$. Les dérivées figurant dans le système sont $u_x, u, u_{xy}, v_y, v_{xx}$.

Pour pouvoir définir un système d'élimination des dérivées, nous allons introduire la définition d'un ordre particulier total.

Un ordre admissible \mathfrak{R} est un ordre total sur ΘU compatible avec l'action des dérivations sur ΘU tel que :

$$\begin{aligned} \forall v \in \Theta U, \quad \forall \partial \in \Delta, \quad v < \partial v, \\ \forall v, w \in \Theta U, \quad \forall \partial \in \Delta, \quad v < w \Rightarrow \partial v < \partial w. \end{aligned}$$

Un ordre, tel que $\forall v, w \in \Theta U, v > w \Rightarrow \partial v > \psi w, \forall \partial \in \Delta, \forall \psi \in \Delta$, est appelé *ordre d'élimination*. Les autres ordres sont dits *alternés*. Dans la suite, on notera $[x] \prec [y]$, l'ordre d'élimination entre x et y , c'est à dire un ordre qui élimine la variable y ainsi que ses dérivées ou encore

$$x < \dot{x} < \ddot{x} < \dots < y < \dot{y} < \ddot{y} < \dots$$

alors que $[x, y]$ désignera un ordre alterné, soit un ordre qui vérifie

$$y < x < \dot{y} < \dot{x} < \ddot{y} < \ddot{x} < \dots$$

Tout ordre admissible est un bon ordre, c'est à dire que toute suite strictement décroissante d'éléments de Δ est nécessairement finie.

Définition 1 Soit p un polynôme de $K\{U\}$ n'appartenant pas à K . Supposons que ΘU soit ordonné selon une relation d'ordre total admissible. L'*indéterminée principale* ou *leader* de p est la plus grande indéterminée $u \in \Theta U$ apparaissant dans l'écriture de p avec un coefficient non nul. Soit S un sous-ensemble de $K\{U\}$, il sera dit *triangulaire* si les leaders de tous les éléments de S sont tous distincts.

Définition 2 Soient p et q deux polynômes de $K\{U\}$ n'appartenant pas à K , p est dit *inférieur* à q ou p est de *rang inférieur* à q (noté $p \leq q$) si :

1. l'indéterminée principale de p est inférieure à celle de q ,
2. ou bien p et q ont même indéterminée principale u et le degré en u de p est inférieur au degré en u de q .

Deux polynômes p et q ayant même indéterminée principale et même degré d en cette indéterminée seront dits de *même rang*, ce que nous noterons $p \simeq q$. Par la suite, u^d sera appelé le *rang* du polynôme p .

Définition 3 Si d est le degré du leader u , alors on définit l'*initial* de p (noté I_p) comme étant le coefficient de u^d dans p et le *séparant* de p (noté S_p) le polynôme $\frac{\partial p}{\partial u}$. Par la suite, H_p désignera l'ensemble $\{S_p, I_p\}$.

Soit A un sous-ensemble de $K\{U\} \setminus K$. On note I_A (resp. S_A) l'ensemble des initiaux (resp. des séparants) des éléments de A et $H_A = I_A \cup S_A$.

Par la suite, tout polynôme différentiel, défini sur l'algèbre ordinaire munie de la dérivation temporelle et de l'alphabet $X = \{x, y\}$, de la forme $\sum_{i=0}^k a_i x^{(i)} + \sum_{j=0}^l y^{(j)}$ s'écrira $p(x, y)$.

Exemple 4

1. Si l'ordre admissible est $[x] \prec [y]$ alors $p(x, y) = x^2 + \dot{x} + y + \ddot{y}$ admet \ddot{y} comme leader, $I_p = 1$ et $S_p = 1$.

Si $p(x, y) = 4x^2 + 5\dot{x} + y$ et $q(x, y) = x + 2y^2$ alors $p \leq q$.

Exemple 5 Reprenons le système (S) . Soit \Re le classement suivant :

$$u < v < u_y < u_x < v_y < v_x < u_{yy} < u_{xy} < u_{xx} < v_{yy} < v_{xy} < v_{xx} < \dots$$

Les leaders des éléments de (S) sont respectivement u_x, u_{xy}, v_{xx} ; les rangs u_x^2, u_{xy}, v_{xx} ; les initiaux $1, v_y, 1$ et les séparants $2u_x, v_y, 1$.

Si R est un domaine de factorisation unique et $p \in R[X]$ alors p peut être écrit sous la forme suivante :

$$p = a_0 t_0 + a_1 t_1 + \dots + a_k t_k, \quad (2.6)$$

où les t_i sont des termes de X (produits de puissance de X) et les $a_i \in R$.

Définition 4 Le *contenu* de p sur R est le *pgcd* de ses coefficients :

$$\text{cont}(p) = \text{pgcd}(a_0, a_1, \dots, a_k). \quad (2.7)$$

La *partie primitive* de p sur R est le polynôme :

$$pp(p) = \frac{p}{\text{cont}(p)}. \quad (2.8)$$

Un polynôme est dit *primitif* s'il est égal à sa partie primitive.

2.3 Idéaux différentiels

Définition 5 Soit R un anneau différentiel, un *idéal différentiel* de R est un idéal de R fermé pour toutes les dérivations, i.e. $\forall a \in I, \forall \theta \in \Theta, \theta a \in I$.

Si $A \subset R$, nous notons (A) l'idéal algébrique engendré par A et $[A]$ l'idéal différentiel engendré par A (fermé par dérivation). Nous avons $[A] = (\Theta A)$.

Définition 6 Nous appellerons *radical de I* l'idéal formé de tous les polynômes différentiels dont une certaine puissance appartient à I . Il sera noté \sqrt{I} .

Un idéal égal à son radical est dit *radiciel*.

Définition 7 Un idéal P est dit *premier* s'il est inclus strictement dans $K\{U\}$ et tel que si $p.q \in P$ alors $p \in P$ ou $q \in P$.

Soit I un idéal différentiel et S un sous ensemble de $K\{U\}$. Notons S^∞ l'ensemble de tous les produits finis d'éléments de S . Nous appelons *saturé de I par S* , $I : S^\infty$ l'ensemble de tous les polynômes différentiels $p \in K\{U\}$ pour lesquels il existe h un produit fini d'éléments de S tel que $h.p \in I$.

Soit $S = \{s_1, \dots, s_t\}$ une famille finie d'éléments de $K\{U\}$, le saturé de l'idéal I par S est :

$$I : S^\infty = \{p \in K\{U\} / \exists a_1, \dots, a_r \in \mathbb{N} t.q. s_1^{a_1} \dots s_t^{a_t} p \in I\}. \quad (2.9)$$

Le saturé d'un idéal différentiel est un idéal différentiel.

2.4 Réduction

Définition 8 Soient p et q deux polynômes de $K\{U\}$, p n'appartenant pas à K . Le polynôme q est dit *partiellement réduit* par rapport à p si aucune dérivée propre de l'indéterminée principale de p n'apparaît dans l'écriture de q .

Définition 9 Le polynôme q est dit *réduit* par rapport à p s'il est partiellement réduit par rapport à p et s'il est de degré inférieur à celui de p , en l'indéterminée principale de p .

Exemple 6 Si l'on considère les polynômes $p(x, y) = x + \dot{x} + \ddot{x} + \dot{y}$, $q_1(x, y) = 3x^2 + 1$, $q_2(x, y) = 3x + 1$ et $r(x, y) = \dot{x}$ avec l'ordre d'élimination $[x] \prec [y]$ alors q_1 , q_2 et r sont réduits par rapport à p . q_1 est partiellement réduit par rapport à q_2 mais n'est pas réduit par rapport à q_2 . q_2 est réduit par rapport à q_1 .

Soit p un polynôme de $K\{U\}$ n'appartenant pas à K . Notons u l'indéterminée principale de p et d le degré de p en u . Il existe un polynôme r , réduit par rapport à p tel que l'on ait :

$$p = I_p u^d + r. \quad (2.10)$$

De plus, pour tout opérateur de dérivation propre θ , il existe un polynôme r_θ , réduit par rapport à θp tel que :

$$\theta p = S_p \theta u + r_\theta. \quad (2.11)$$

Remarque 1 Le polynôme θp est de degré 1 en son indéterminée principale θu . Son initial est aussi le séparant de p .

Par la suite, nous noterons $q \xrightarrow{p} r$ la réduction du polynôme q par p produisant un polynôme r .

Remarque 2 Il existe des entiers positifs α et β tels que le polynôme r obtenu par cette réduction vérifie $I_p^\beta S_p^\alpha q - r \in [p]$ (cf. [5]).

Nous obtenons ainsi les deux règles de réécriture de réduction par p de θp :

$$u^d \longrightarrow \frac{-r}{I_p}. \quad (2.12)$$

$$\theta u \longrightarrow \frac{-r\theta}{S_p} \quad (2.13)$$

Exemple 7 Soit l'algèbre ordinaire dans laquelle $X = \{x_1, x_2, y\}$ et la relation d'ordre admissible donnée $[y] \prec [x_1, x_2]$. Soit le système différentiel :

$$\begin{cases} \dot{x}_1(t) &= a_{11}x_1(t) + a_{12}x_2(t), \\ \dot{x}_2(t) &= a_{12}x_1(t) + a_{22}x_2(t), \\ y &= x_1. \end{cases}$$

L'ordre d'élimination, appliqué à ce système, conduit à :

$$\{\ddot{y} = (a_{11} + a_{22})\dot{y} + (a_{12}a_{21} - a_{11}a_{22})y\}. \quad (2.14)$$

Définition 10 Soit $A \subset K\{U\}$. Il sera dit *différentiellement triangulaire* si aucun élément de A n'appartient à K , s'il est triangulaire (les indéterminées principales sont deux à deux différentes) et si ses éléments sont deux à deux partiellement réduits.

Il sera dit *partiellement réduit* (resp. *réduit*) par rapport à un ensemble $B \subset K\{U\}$ si aucun polynôme de B n'appartient à K et si tous les polynômes de A sont partiellement réduits (resp. réduits) par rapport à tous les polynômes de B .

Il sera dit *auto-réduit* si aucun élément de A n'appartient à K et si chaque polynôme de A est réduit par rapport aux autres polynômes de A .

Exemple 8 Soit $K\{x, y\}$ muni de la dérivation $\frac{d}{dt}$ et de l'ordre d'élimination $[y] \prec [x]$.

L'ensemble $A = \{p_1 = \ddot{x}^2 + x^2, p_2 = y + 1\}$ est un ensemble auto-réduit.

L'ensemble $B = \{q_1 = \ddot{x}^2 + x^2, q_2 = \dot{x} + y + 1\}$ ne l'est pas.

Remarque 3 Un ensemble différentiellement triangulaire est nécessairement fini. Un ensemble auto-réduit étant par définition différentiellement triangulaire sera également fini. Par la suite, nous noterons de tels ensemble A sous la forme d'une séquence ordonnée $A = p_1 < p_2 < \dots < p_r$, en précisant s'il s'agit d'un ensemble auto-réduit ou d'un ensemble différentiellement triangulaire.

Définition 11 Soient deux sous-ensembles auto-réduits de $K\{U\}$,

$A = p_1 < p_2 < \dots < p_r$ et $B = q_1 < q_2 < \dots < q_s$. Nous dirons que A est *inférieur* à B si A et B remplissent l'une des deux conditions suivantes :

1. $p_j \simeq q_j$ et $p_i < q_i, 1 \leq j < i \leq \min(r, s)$
2. $p_j \simeq q_j$ et $r > s, 1 \leq j \leq s$.

Si $r = s$ et si pour toute valeur de i comprise entre 1 et s , le polynôme p_i est de même rang que q_i , nous dirons que les ensembles A et B sont de même rang.

2.4.1 Théorème des zéros

Soit E un système de polynômes différentiels de $K\{U\}$ et \tilde{K} un surcorps de K .

Théorème 1 Un polynôme différentiel $p \in \sqrt{[E]}$ si et seulement si toute solution de E est solution de p .

Soient A et S deux ensembles de polynômes inclus dans $K\{U\}$ et le système :

$$\begin{cases} \forall p \in A, & p(u_1, \dots, u_n) = 0, \\ \forall q \in S, & q(u_1, \dots, u_n) \neq 0. \end{cases}$$

Nous noterons ce système sous forme abrégé $(A = 0, S \neq 0)$.

Une solution dans \tilde{K} de $(A = 0, S \neq 0)$ est un n -uplet $f = (f_1, \dots, f_n)$ qui annule toutes les équations sans annuler les inéquations. On obtient alors le corollaire suivant :

Corollaire 1 Soit $(A = 0, S \neq 0)$ un système d'équations différentielles de $K\{U\}$. Un polynôme différentiel $p \in \sqrt{[A]} : S^\infty$ si et seulement si toute solution de $(A = 0, S \neq 0)$ est solution de p . En particulier, $(A = 0, S \neq 0)$ est sans solution si $1 \in \sqrt{[A]} : S^\infty$.

2.4.2 Présentation caractéristique d'un idéal régulier

Définition 12 Un système $(A = 0, S \neq 0)$ défini sur un anneau de polynômes différentiels $K\{U\}$ est dit un *système différentiel régulier* pour un ordre admissible donné si

1. A est différentiellement triangulaire,
2. S contient tous les séparants de A et est partiellement réduit par rapport à A ,
3. tout polynôme de $[A] : S^\infty$ partiellement réduit par rapport à A appartient à $(A) : S^\infty$.

Définition 13 L'idéal différentiel $[A] : S^\infty$ est appelé *idéal différentiel régulier défini par le système régulier* $(A = 0, S \neq 0)$.

Définition 14 Soit I un idéal différentiel contenant des polynômes non nuls. Nous appelons *ensemble caractéristique* un ensemble $C \subset I$ auto-réduit et minimal (i.e qui ne contient aucun polynôme réduit à zéro par rapport à C).

A cet ensemble, nous associons les règles de réécriture (2.12) et (2.13).

Par la suite, nous noterons $p \xrightarrow{C} r$, la réduction de p à r par rapport à C .

Ainsi, pour tout polynôme p de I , nous avons $p \xrightarrow{C} 0$. En effet, si $p \xrightarrow{C} p_1$ et $p_1 \neq 0$, alors $C \cup \{p_1\}$ est un sous-ensemble auto-réduit de I inférieur à C .

La réciproque est en générale fausse. En effet, si I n'est pas premier, l'ensemble $[C] : H_C^\infty$ n'est pas nécessairement I .

La notion de présentation caractéristique C d'un idéal régulier I , introduite dans ([6]) n'a pas cet inconvénient. Nous avons par définition $I = [C] : H_C^\infty$.

Définition 15 Soient le système régulier $(A = 0, S \neq 0)$ sur R un anneau différentiel pour un ordre admissible de B la base de Groebner algébrique associée à l'idéal régulier algébrique $(A) : S^\infty$, calculé en dimension zéro [6].

Un ensemble différentiellement triangulaire $C = p_1 < \dots < p_n$ est appelé *présentation caractéristique de l'idéal régulier* $[A] : S^\infty$ défini par le système régulier $(A = 0, S \neq 0)$ s'il satisfait les conditions suivantes :

1. pour tout $q \in R$, nous avons $q \in [A] : S^\infty$ si et seulement si $q \xrightarrow{C} 0$,
2. l'ensemble $C \in B$ est minimal,
3. si $C' = p'_1 < p'_2 < \dots < p'_n$ est un autre ensemble satisfaisant les deux conditions précédentes et $i \leq n$ est le plus petit indice tel que $p_i \neq p'_i$ alors l'indéterminée principale de p_i est plus petite que celle de p'_i .

Dans [7], une définition équivalente a été introduite :

Définition 16 Un ensemble C est une présentation caractéristique de l'idéal régulier $[C] : H_C^\infty$ si :

1. C est un ensemble caractéristique de $[C] : H_C^\infty$.
2. C est un ensemble auto-réduit fortement normalisé de $K[L, N]$ tel que les éléments de C sont primitifs sur $K[N]$ où L est l'ensemble des indéterminées principales des éléments de C et N l'ensemble des autres dérivées apparaissant dans l'écriture des éléments de C .

Lorsqu'elle existe, la présentation caractéristique d'un idéal différentiel régulier ne dépend que de l'ordre admissible choisi. Ces notions nous permettent de tester de manière effective l'égalité de deux idéaux différentiels réguliers. Ainsi, nous avons le théorème suivant :

Théorème 2 [6] Deux idéaux différentiels réguliers sont égaux si et seulement si les présentations caractéristiques définies pour un même ordre admissible contiennent les mêmes polynômes.

2.4.3 Algorithme de Rosenfeld-Groebner

A partir d'un ensemble de polynômes différentiels et d'une relation d'ordre admissible donné, l'algorithme de Rosenfeld-Groebner retourne essentiellement une liste (par cela, nous devons comprendre une "intersection") d'idéaux différentiels réguliers représentés chacun par leur présentation caractéristique. Informellement, les différents idéaux correspondent à différentes classes de solution. En particulier, l'algorithme sépare les solutions de départ qui ne dépendent pas du même nombre de constantes arbitraires. Il est fondé sur le théorème suivant :

Théorème 3 [6] Soit $(A = 0, S \neq 0)$ un système différentiel défini sur une K -algèbre de polynômes différentiels. Il est alors possible de calculer un nombre fini d'idéaux différentiels réguliers donnés par leur présentation caractéristique C_i pour $i = 1, \dots, n$ tels que :

$$\sqrt{[A] : S^\infty} = [C_1] : H_{C_1}^\infty \cap \dots \cap [C_n] : H_{C_n}^\infty. \quad (2.15)$$

Les opérations utilisées sont l'addition, la multiplication, la différentiation et le test d'égalité sur le corps K des coefficients. Cette décomposition peut contenir des composantes redondantes.

Cet algorithme a été implanté par F. Boulier dans le paquetage `diffalg` en MAPLE.

Le théorème de Rosenfeld-Groebner ne traite pas toutes les solutions de $[A] : S^\infty$ mais seulement celles n'annulant pas S . Ainsi, certaines solutions ne sont pas obtenues par le théorème de Rosenfeld-Groebner. Nous allons reprendre deux exemples tirés de [33].

Exemple 9 Soit $A = \{u_x^2 - 4u\}$, $S = \{u_x\}$. C'est un système différentiel régulier. Plaçons nous à l'origine. Le polynôme $u(x) = x^2$ n'est pas solution de $A = 0$, $S \neq 0$ car à l'origine, le séparant $u_x(x) = 2x$ s'annule.

Toutefois, on montre que $u(x) = x^2$ est solution de l'idéal $[A] : S^\infty$.

De plus, l'hypothèse de non annulation des inéquations est une condition suffisante qui dans certains cas n'est pas nécessaire. Si l'on poursuit l'exemple précédent :

Exemple 10 Il existe une et une seule solution de $[A] : S^\infty$ vérifiant $u(0) = u_x(0) = 0$. En effet, l'idéal $[A] : S^\infty$ contient le polynôme $u_{xx} - 2$ qui implique $u_{xx}(0) = 2$ et $u_{x^k}(0) = 0$ pour $k > 2$. On retrouve la solution $u(x) = x^2$.

A notre connaissance, il n'existe pas de théorème qui généralise le théorème de Rosenfeld-Groebner à des conditions initiales annulant S .

Chapitre 3

Identifiabilité

Lors de la modélisation d'un phénomène, il est important de savoir si le modèle est bien défini, c'est à dire si à partir d'un comportement entrée-sortie, il est possible d'estimer soit les paramètres du système appartenant à un ensemble U_{ad} admissible de façon unique, ce que l'on appelle *identifiabilité globale* soit un nombre fini de vecteurs de paramètres indépendamment de toute expérience, on parle alors d'*identifiabilité locale*. Cette démarche est importante car elle permet de rejeter ou de conserver un modèle qui, à priori, semble satisfaisant : c'est *la recherche d'identifiabilité paramétrique*. Pour vérifier cette propriété, nous nous plaçons dans un cadre idéalisé, c'est à dire que le processus et le modèle sont supposés avoir des structures identiques (il n'y a pas d'erreur de caractérisation), les données disponibles sont supposées non bruitées et les intervalles de temps des mesures peuvent être librement choisis. De plus, lorsque le système est contrôlé, l'entrée appliquée est supposée pouvoir être choisie librement. Différentes définitions de l'identifiabilité sont disponibles dans la littérature. Elles sont basées sur des notions d'analyse ou d'algèbre différentielles et ne sont pas toutes équivalentes. Ce chapitre débute par un rappel des définitions de l'identifiabilité. Ces dernières s'accompagnent de diverses méthodes qui seront présentées dans une seconde partie.

3.1 Définitions d'identifiabilité

Cette section débute par un rappel des définitions analytiques. Elles ne sont pas toutes équivalentes mais les liens logiques ont été étudiés dans la thèse de C.Noiret [42]. Pour des raisons de lisibilité, nous gardons les mêmes notations que les auteurs auxquels nous faisons référence.

3.1.1 Définitions analytiques

Pour U une classe quelconque d'applications définies de \mathbb{R}^+ sur \mathbb{R}^l , F.Ollivier donne une définition générale du comportement entrée-sortie [43].

Définition 17 Le **comportement entrée-sortie** du modèle $M(\theta)$ est l'application

$$\begin{aligned} C(\theta) &: U \longrightarrow \text{appl}(\mathbb{R}^+, \mathbb{R}^m) \\ &u \longmapsto y. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Le comportement entrée-sortie de la structure $M(\cdot)$ est l'application C qui à tout vecteur de paramètres θ associe le comportement entrée-sortie du modèle $M(\theta)$.

Pour la plupart des modèles, il existe des points atypiques de U_{ad} , l'ensemble des paramètres admissibles de \mathbb{R}^q pour lesquels le modèle étudié n'est pas identifiable. Pour prendre en compte ces derniers, E. Walter et L. Pronzato ont introduit dans [48] la notion d'**identifiabilité structurelle**. En effet, une propriété **structurelle** est une propriété qui est vraie partout sauf sur un ensemble de mesure nulle. D'où les définitions suivantes :

Définition 18 Le paramètre θ_i est dit **structurellement globalement** (resp. **structurellement localement**) **identifiable** si pour presque tout $\bar{\theta} \in U_{ad}$ (resp. s'il existe un voisinage W de $\bar{\theta}$ dans U_{ad}) :

$$\theta^* \in U_{ad} \text{ (resp. } \theta^* \in W), C(\theta^*) = C(\bar{\theta}) \Rightarrow \theta_i^* = \bar{\theta}_i.$$

Les structures de modèles peuvent être ainsi **structurellement identifiées** au sens des définitions suivantes :

Définition 19 Une structure de modèle est **structurellement globalement** (resp. **structurellement localement**) **identifiable** si tous les paramètres le sont.

Il est possible également d'étudier l'identifiabilité de la structure du modèle en une valeur particulière du vecteur de paramètres. Pour cela, S. Vajda et al ont donné la définition suivante [46] :

Définition 20 Une structure de modèle est **globalement** (resp. **localement**) **identifiable** en $\theta^* \in U_{ad}$ si (resp. il existe un voisinage W de θ^* dans U_{ad}) :

$$\bar{\theta} \in U_{ad} \text{ (resp. } \bar{\theta} \in W), C(\theta^*) = C(\bar{\theta}) \Rightarrow \theta^* = \bar{\theta}.$$

Remarque 4 Ces définitions ne prennent pas en compte le vecteur de conditions initiales x_0 . Lorsque ce dernier sera connu, l'étude portera sur des trajectoires partant de cette valeur initiale. Lorsque ce n'est pas le cas, deux situations peuvent se produire :

- si cette valeur nous intéresse, l'étude portera sur le vecteur de paramètre étendu $\theta_e = [\theta, x_0]$,
- sinon, x_0 est considéré comme une perturbation du système considéré.

Les définitions précédentes se plaçaient sur l'intervalle de temps $[0, +\infty[$. Pour mener l'étude sur un intervalle de temps plus restreint, S. Vajda et al. ont proposé des définitions plus restrictives dans [46]. Elles supposent la condition initiale $x_0(\theta)$ totalement déterminée après avoir sélectionné θ et utilisent le **comportement entrée-sortie** défini par :

Définition 21 Le **comportement entrée-sortie** du système $M(\theta)$ est l'application :

$$\begin{aligned} \Sigma_{\theta}^{x_0(\theta)} &: U[t_0, t_1[\longrightarrow \text{appl}([t_0, t_1[, \mathbb{R}^m) \\ u(\cdot) &\longmapsto y(\cdot, \theta), \end{aligned} \tag{3.2}$$

où $U[t_0, t_1[$ est une classe d'applications bornées, mesurables de $[t_0, t_1[$ sur \mathbb{R}^l . On en déduit des définitions semblables aux précédentes en remplaçant $C(\theta)$ par $\Sigma_{\theta}^{x_0(\theta)}$.

Remarque 5 Cette dernière définition sur le comportement entrée-sortie amène une restriction car l'identifiabilité porte sur un intervalle plus restreint. Il est clair que si le système est globalement identifiable au sens S. Vajda, il le sera au sens de la définition 19. Mais la réciproque est fautive en général. Pour conclure, il faudrait étudier les trajectoires de la structure aux points de temps inférieurs à t_0 ou supérieurs à t_1 .

3.1.2 Définitions dans le cadre algébrique

Depuis le début des années 1990, l'algèbre différentielle s'est considérablement développée en automatique sous l'initiative de Michel Fliess [21], [?]. Elle a trouvé une application dans le problème de la recherche de l'identifiabilité. Par contre, il faut redéfinir les systèmes considérés en leur ajoutant d'une part des inéquations dont nous précisons par la suite leur nature et d'autre part des équations prenant en compte le caractère constant des paramètres $(\theta_i)_{i=0,\dots,q}$ à identifier, soit les équations $\dot{\theta}_i = 0$, $i = 1, \dots, q$. Par la suite, lorsque nous parlerons d'idéal généré par un système d'équations, nous considérerons ce dernier système.

En outre, nous supposons que le modèle ne tient pas compte des conditions initiales :

$$\begin{cases} \dot{x}(t, \theta) = f(x(t, \theta), \theta) + \sum_{i=1}^l u_i(t) g_i(x(t, \theta), \theta), \\ y(t, \theta) = h(x(t, \theta)). \end{cases} \quad (3.3)$$

et que les fonctions f , g , h sont des fonctions rationnelles. L'entrée u sera supposée analytique et transcendante sur l'idéal différentiel généré par les équations et les inéquations du modèle. Dans ce cadre, lorsque l'on parlera de solution du système on sous-entendra un ensemble de solutions dans lequel on ne conservera que les solutions non-dégénérées, c'est à dire les solutions n'annulant pas certains polynômes. Cette notion a été introduite par L. Ljung et S.T. Glad [37]. Par la suite, l'ensemble des solutions (correspondant à la donnée d'un contrôle u et d'un vecteur de paramètre θ) est noté $\bar{x}(\theta, u)$ et nous leur faisons correspondre l'ensemble $\bar{y}(\theta, u)$ des observations.

L. Ljung et S.T. Glad proposent les définitions suivantes [37] :

Définition 22 Une structure de modèle est **globalement identifiable** en θ^* sur un ensemble D_m s'il existe une entrée u^* telle que :

$$\bar{y}(\theta^*, u^*) \neq \emptyset \text{ et } \bar{y}(\theta^*, u^*) \cap \bar{y}(\theta, u^*) \neq \emptyset, \theta \in D_m, \Rightarrow \theta = \theta^*,$$

où D_m est un sous-ensemble de U_{ad} .

Définition 23 Une structure de modèle est **localement identifiable** en θ^* s'il existe un voisinage ouvert D_m de θ^* tel qu'elle soit globalement identifiable en θ^* sur D_m .

Ces définitions ne sont pas structurelles puisqu'elles sont définies en une valeur particulière de paramètres et non pour presque toutes les valeurs de paramètres. E. Walter [49] a introduit une définition d'identifiabilité "non structurelle" suivante :

Définition 24 Une structure de modèle est **globalement identifiable** en θ^* s'il existe une entrée u^* telle que :

$$\bar{y}(\theta^*, u^*) \equiv \bar{y}(\theta, u^*), \theta \in U_{ad} \Rightarrow \theta = \theta^*.$$

Définition 25 Une structure de modèle est **localement identifiable** en θ^* s'il existe un voisinage ouvert $V(\theta^*)$ de θ^* dans U_{ad} et une entrée u^* tels que :

$$\bar{y}(\theta^*, u^*) \equiv \bar{y}(\theta, u^*), \theta \in V(\theta^*) \Rightarrow \theta = \theta^*.$$

Remarque 6 La connaissance de la condition initiale entraîne la formulation de l'identifiabilité globale (resp. locale) classique.

Dans le cas non contrôlé, nous introduisons une nouvelle définition de l'identifiabilité globale qui est la suivante :

Définition 26 Un modèle est **globalement identifiable** en $\theta \in U_{ad}$ s'il existe un temps fini $t_1 > 0$ tel que si $\bar{y}(\bar{\theta}; t) = \bar{y}(\theta; t)$ pour tout $t \in [0, t_1]$ avec $\bar{\theta} \in U_{ad}$ alors $\theta = \bar{\theta}$.
Le modèle est dit **localement identifiable** en $\theta \in U_{ad}$ si il existe un voisinage W de θ tel que le modèle soit globalement identifiable en θ avec U_{ad} restreint à W .

Nous utiliserons cette définition pour étudier l'identifiabilité des paramètres du problème de pollution.

3.2 Méthodes classiques pour systèmes linéaires

Les définitions données dans la section précédente étaient de nature algébriques et analytiques, par conséquent les méthodes s'y rattachant également. Dans cette thèse, nous ne donnons que les techniques nous paraissant les plus pertinentes pour nos exemples. Pour de plus amples informations sur les méthodes disponibles, le lecteur pourra se reporter à [49].

Nous allons présenter trois méthodes pour les systèmes linéaires, la première utilise la transformée de Laplace, la deuxième est fondée sur le théorème d'équivalence algébrique et la troisième sur l'algèbre différentielle. Nos exemples vont être tirés du problème approché de pollution dans une rivière quand le débit est constant.

Dans le cas d'un système non linéaire, la première démarche proposée dans la littérature a été de linéariser le système autour d'une trajectoire connue et d'utiliser les méthodes adaptées aux structures linéaires.

Les modèles linéaires sont des modèles (Σ_θ) de la forme :

$$\begin{cases} \dot{x}(t, \theta) &= A(\theta)x(t, \theta) + B(\theta)u(t), \\ y(t, \theta) &= C(\theta)x(t, \theta), \\ x(0, \theta) &= x_0(\theta), \end{cases} \quad (3.4)$$

où $x(t, \theta)$ est un vecteur de \mathbb{R}^n .

3.2.1 Méthode basée sur la matrice de transfert du système

Définition 27 On appelle *matrice de transfert* d'un système linéaire, d'entrée u et de sortie le vecteur m -dimensionnel y , la matrice $F(s, \theta)$ telle que $Y(s, \theta) = F(s, \theta)U(s)$ où s désigne la variable de Laplace et $U(s)$ (resp. $Y(s, \theta)$) la transformée de Laplace de $u(t)$ (resp. $y(t, \theta)$) si elle existe.

En utilisant la transformée de Laplace appliquée au système (3.4), nous obtenons [4] :

$$F(s, \theta) = H_1(s, \theta)x_0(\theta) + H_2(s, \theta)U(s),$$

avec,

$$\begin{aligned} H_1(s, \theta) &= C(\theta)[sI_n - A(\theta)]^{-1}, \\ H_2(s, \theta) &= C(\theta)[sI_n - A(\theta)]^{-1}B(\theta), \end{aligned}$$

et I_n la matrice identité de dimension $n \times n$.

Proposition 1 Soit θ dans U_{ad} . Le modèle est structurellement identifiable si et seulement si pour presque tout $\bar{\theta} \in D_m$, l'implication :

$$\forall s, F(s, \theta) = F(s, \bar{\theta}) \Rightarrow \theta = \bar{\theta},$$

est vérifiée.

L'identifiabilité structurelle sera globale si $D_m = U_{ad}$, locale si D_m est un voisinage de θ .

Remarque 7 Lorsque $x_0(\theta) = 0$, cette méthode s'appelle méthode par la fonction de transfert puisque la transformée de Laplace est réduite à la fonction $H_2(s, \theta)U(s)$, où $H_2(s, \theta)$ est la fonction de transfert.

Remarque 8 Si le système linéaire considéré n'est plus contrôlé, la proposition suivante permet de tester l'identifiabilité de ses paramètres.

Proposition 2 Soit le système linéaire non contrôlé :

$$\begin{cases} \dot{x}(t, \theta) &= A(\theta)x(t, \theta), \\ y(t, \theta) &= C(\theta)x(t, \theta), \\ x(0, \theta) &= x_0(\theta). \end{cases} \quad (3.5)$$

La matrice de transfert du système (3.5) est identique à celle du système linéaire contrôlé :

$$\begin{cases} \dot{x}(t, \theta) &= A(\theta)x(t, \theta) + B(\theta)u(t), \\ y(t, \theta) &= C(\theta)x(t, \theta), \\ x(0, \theta) &= 0, \end{cases} \quad (3.6)$$

avec $B(\theta) = x_0(\theta)$. Ainsi (3.5) est identifiable si et seulement si (3.6) est identifiable.

Ce résultat est faux dans le cas non linéaire.

Exemple 11 Prenons l'exemple de la pollution de la rivière quand le débit est constant. Supposons que l'on a discrétisé la rivière en 5 points $x_0 < \dots < x_4$ et que l'on observe v_1 et v_4 , donc $h = \frac{1}{4}$. Le système discrétisé peut encore se mettre sous la forme :

$$\begin{cases} \dot{v}_h(t, \theta) &= Av_h(t, \theta) + B(\theta), \\ y(t, \theta) &= Cv_h(t, \theta) \\ v_h(0, \theta) &= 0 \end{cases} \quad (3.7)$$

où A est la matrice tridiagonale de dimension $4 * 4$ telle que :

$$A = \begin{pmatrix} \beta & \gamma & 0 & 0 \\ \alpha & \beta & \gamma & 0 \\ 0 & \alpha & \beta & \gamma \\ 0 & 0 & \alpha' & \beta \end{pmatrix},$$

$$B(\theta) = (k_1lQ, k_2lQ^2, k_3lQ^3, k_4lQ^4)^\top,$$

Et C , de dimension $2 * 4$ est égal à :

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Le système (3.7) se réécrit :

$$\begin{cases} \dot{v}_h(t, \theta) &= Av_h(t, \theta) + B(\theta)u(t), \\ y(t, \theta) &= Cv_h(t, \theta) \\ v_h(0, \theta) &= 0, \end{cases} \quad (3.8)$$

où $u(t) = 1$. La transformée de Laplace est dans ce cas particulier égale à $F(s, \theta) = H_2(s, \theta)U(s)$. Nous avons obtenu grâce au logiciel maple la matrice transfert H de dimension 2×1 . En particulier :

$$H_2(1, 1) = \frac{c_3 s^3 + c_2 s^2 + c_1 s + c_0}{den(s)}$$

avec

$$\begin{aligned} c_0 &= (\beta^3 - \beta\alpha'\gamma - \beta\alpha\gamma)k_1lQ + \gamma^3k_4lQ^4 - \gamma^2\beta k_3lQ^3 + (\beta^2 - \alpha'\gamma)\gamma k_2lQ^2, \\ c_1 &= (-3\beta^2 + \alpha\gamma + \alpha'\gamma)k_1lQ + \gamma^2k_3lQ^3 - 2\beta\gamma k_2lQ^2, \\ c_2 &= 3\beta k_1lQ + \gamma k_2lQ^2, \\ c_3 &= -k_1lQ, \end{aligned} \quad (3.9)$$

et den est une polynôme en s de degré 4.

Ainsi, si $\theta = (l, Q)$ et $\bar{\theta} = (\bar{l}, \bar{Q})$, l'égalité $F(s, \theta) = F(s, \bar{\theta})$ pour tout s conduit à $l = \bar{l}$ et $Q = \bar{Q}$. Donc l et Q sont identifiables.

3.2.2 Approche par changement base d'état

Soit le modèle linéaire Σ_θ décrit par :

$$\begin{cases} \dot{x} &= A(\theta)x + B(\theta)u, \\ y &= C(\theta)x, \\ x(0) &= x_0(\theta). \end{cases}$$

La méthode de changement de base d'état ou méthode des réalisations minimales est basée sur le théorème d'équivalence algébrique et ne peut être utilisé que si le système est minimal, c'est à dire s'il est contrôlable et observable (voir annexe A). La vérification de la minimalité peut se faire à l'aide des critères de Kalman. Deux systèmes linéaires minimaux qui réalisent le même comportement entrée-sortie différent seulement par une transformation linéaire. D'où l'idée de la méthode par changement de base d'état qui consiste à trouver une transformation linéaire T telle que $T(x) = \bar{x}$ où \bar{x} représente le vecteur d'état du système $(\Sigma_{\bar{\theta}})$. Le nombre de solutions en (T, θ) vérifiant le système :

$$\begin{cases} A(\theta) &= T^{-1}A(\bar{\theta})T, \\ B(\theta) &= T^{-1}B(\bar{\theta}), \\ C(\theta) &= C(\bar{\theta})T, \end{cases}$$

conduit à l'identifiabilité structurelle globale ou locale des paramètres, ou encore à leur non-identifiabilité.

Exemple 12 Reprenons l'exemple précédent. Nous sommes amenés à résoudre le système suivant :

$$\begin{cases} TA &= AT, \\ TB(\theta) &= B(\bar{\theta}), \\ C(\theta) &= C(\bar{\theta})T, \end{cases}$$

Pour pouvoir appliquer cette méthode, il faut tout d'abord vérifier l'observabilité grâce au critère du rang de Kalman. Maple a calculé le rang de la matrice d'observabilité qui est égal à 4. Donc, le système est observable. A la main, $C(\theta) = C(\bar{\theta})T$ permet de trouver certains coefficients de la matrice $T = (t_{i,j})_{1 \leq i,j \leq 4}$ qui s'écrit alors :

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ t_{2,1} & t_{2,2} & t_{2,3} & t_{2,4} \\ t_{3,1} & t_{3,2} & t_{3,3} & t_{3,4} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Puis de l'égalité $TA = AT$, on calcule les coefficients restant et on en déduit que T est la matrice identité. Enfin, de la relation $TB(\theta) = B(\bar{\theta})$, on a immédiatement $\theta = (l, Q) = (\bar{l}, \bar{Q}) = \bar{\theta}$. Donc le système est bien identifiable globalement.

3.3 Les modèles non-linéaires

Une idée simple pour traiter un modèle non-linéaire est de le linéariser autour d'une trajectoire connue. On obtient ainsi des systèmes linéaires sur lesquels on peut appliquer les méthodes précédentes. Dans [22], Glover montre que si pour certains processus de linéarisation, le modèle linéarisé est globalement (resp. localement) identifiable en un paramètre θ alors le modèle non-linéaire est globalement (resp. localement) identifiable en θ . Si le système linéaire, obtenu après linéarisation, n'est pas identifiable, on ne peut rien déduire sur l'identifiabilité du système non-linéaire original. Dans ce cas, on doit étudier directement l'identifiabilité du système non-linéaire. Nous allons voir dans la partie suivante que l'algèbre différentielle évite ce passage de linéarisation.

3.4 Méthode entrée-sortie

La méthode présentée ici se base sur l'algèbre différentielle [12], [42]. Elle a pour but d'obtenir des relations liant les entrées, les sorties et les paramètres et reflétant le plus fidèlement le comportement entrée-sortie du modèle. Cette méthode s'applique aux modèles avec ou sans entrées tels que les fonctions du système soient rationnelles et l'entrée u une fonction régulière.

Cas où les conditions initiales $x_0(\theta)$ ne sont pas prises en compte

Introduisons tout d'abord une définition, donnée dans [29] qui nous permettra de restreindre notre étude au cas des systèmes différentiels sans condition initiales.

Définition 28 Une fonction analytique f définie sur un ouvert U de \mathbb{R} ou \mathcal{C} est dite *différentiellement algébrique* (DA) si elle satisfait une équation différentielle de la forme :

$$Q(z, f(z), f'(z), \dots, f^{(n)}(z)) = 0,$$

pour tout $z \in U$ et où Q est un polynôme non nul de $n + 2$ variables.

Une fonction de plusieurs variables est dite *DA* si elle est DA en chacune des variables, les autres étant fixées.

Il a été montré dans [29] que les solutions d'un système différentiel calculées à partir des conditions initiales ne sont pas DA. Aussi, nous allons dans un premier temps supposer le système différentiel suivant sans condition initiale :

$$\Sigma^\theta \begin{cases} \dot{x}(t, \theta) &= f(x(t, \theta), \theta) + u(t)g(x(t, \theta), \theta), \\ y(t, \theta) &= h(x(t, \theta)). \end{cases} \quad (3.10)$$

avec $g = 0$ dans le cas non contrôlé. u est un élément de $U[0, t_1]$ avec $U[0, t_1]$ représentant la classe des entrées bornées et C^∞ définies sur $[0, t_1]$, $\theta \in U_{ad}$. Les fonctions f, g, h sont réelles et rationnelles sur un sous-ensemble ouvert connexe M de \mathbb{R}^n pour tout $\theta \in U_{ad}$ et tout $t \in [0, t_1]$. Ce système peut alors se récrire comme un système polynomial complété avec $\theta_i = 0, i = 1, \dots, q$. Le système Γ obtenu est décrit par les équations et inéquations polynomiales suivantes :

$$\Gamma \begin{cases} p(\dot{x}, x, u, \theta) & = 0, \\ q(x, y, \theta) & = 0, \\ r(x, \theta) & \neq 0, \\ \dot{\theta}_i & = 0, i=1, \dots, q. \end{cases} \quad (3.11)$$

r représente les dénominateurs des fractions du système initial obtenus après simplification.

Une solution de Σ^θ est un quadruplet $\{x, y, u, \theta\}$ satisfaisant Γ .

La méthode entrée-sortie est basée sur l'utilisation de l'algorithme de Rosenfeld-Gröbner implémenté par F.Boulier dans le package Diffalg de MAPLE [5], [6], [7]. Etant donné I le radical de l'idéal différentiel engendré par les équations de Γ (définition 6), cet algorithme associé à l'ordre

$$[\theta] \prec [y, u] \prec [x], \quad (3.12)$$

va éliminer l'état non observé par combinaison des dérivées successives des équations de Γ . Pour cela, il décompose d'abord le radical $I \subset K\{x, u, y, \theta\}$ en intersection d'idéaux différentiels réguliers (définition 12) admettant chacun une présentation caractéristique et calcule ces derniers par la suite. Chacune de ces présentations caractéristiques correspond à une classe particulière de solutions du système Γ .

Introduisons de nouvelles notations.

- L est l'ensemble des indéterminées principales (définition 1) dans $\Theta\{x, u, y, \theta\}$ des polynômes de C , N les autres dérivées apparaissant dans C et $K[N]$, l'anneau des polynômes à indéterminées dans N et à coefficients dans K .
- I_θ est le radical de l'idéal différentiel engendré par les équations de Γ pour la valeur particulière du paramètre θ et C_θ est la présentation caractéristique associée à cet idéal pour l'ordre $[y, u] \prec [x]$.
- $C(\theta)$ est la présentation caractéristique C évaluée en θ pour l'ordre (3.12).

Notons $I_\theta^{io} \subset K(\theta)\{u, y\}$ l'idéal du système spécialisé pour la valeur θ ne contenant que les polynômes en u, y . L'ensemble $C_\theta^{io} = C_\theta \cap K(\theta)\{u, y\}$ est alors une présentation caractéristique de l'idéal I_θ^{io} , appelée *présentation caractéristique entrée-sortie* et est constituée de polynômes appelés *polynômes entrées-sorties*.

La proposition suivante, démontrée dans [42], va donner une condition nécessaire et suffisante pour qu'un modèle soit globalement identifiable.

Proposition 3 Si le système admet des solutions génériques (i.e qu'elles ne sont pas solution d'équations autres que celles qui sont dans l'idéal de départ), alors il est globalement identifiable en θ si et seulement si pour tout $\bar{\theta} \in U_{ad}$:

$$C_\theta^{io} = C_{\bar{\theta}}^{io} \Rightarrow \theta = \bar{\theta}. \quad (3.13)$$

Cette proposition est difficilement utilisable dans la pratique. En effet, nous rencontrons deux problèmes.

- (i) Si l'on voulait vérifier (3.13), il faudrait calculer pour chaque $\bar{\theta} \in U_{ad}$ les présentations caractéristiques. Une idée pour y remédier serait de calculer directement la présentation caractéristique de l'idéal I et, ensuite, de l'évaluer en chaque $\bar{\theta}$. La question qui se pose alors est de savoir comment relier $C_{\bar{\theta}}^{io}$ et $C(\bar{\theta})$, ou encore $C_{\bar{\theta}}$ et $C(\bar{\theta})$.
- (ii) Le deuxième problème rencontré est celui de l'hypothèse sur la généricité qui est, en général, difficile à vérifier.

- (i) Commençons par résoudre le premier problème qui est celui du lien entre $C_{\bar{\theta}}$ et $C(\bar{\theta})$. Bien évidemment (cela aurait été trop facile!), nous n'avons pas toujours $C_{\bar{\theta}} = C(\bar{\theta})$. La preuve se trouvant dans [13] et [42].

Les polynômes différentiels de C peuvent être considérés comme des polynômes algébriques à coefficient dans $K[N]$ et ayant pour indéterminées des éléments de L .

Le résultat qui suit donne alors une condition suffisante pour avoir l'égalité des présentations caractéristiques $C_{\bar{\theta}}$ et $C(\bar{\theta})$.

Proposition 4 Soit $C = \{\dot{\theta}_1, \dots, \dot{\theta}_q, c_1, \dots, c_{m+n}\}$ la présentation caractéristique de l'idéal différentiel I obtenu avec l'ordre (3.12).

Si pour tout $\theta \in \Omega_q$ et tout $i = 1, \dots, m+n$, l'initial de $c_i(\theta) \in C(\theta)$ (définition 3) est non nul et qu'aucun de ses facteurs ($\neq 1$) est un diviseur des autres coefficients de $c_i(\theta) \in K[N]$, alors $C_{\theta} = C(\theta)$ pour tout $\theta \in \Omega_q$.

Avant de continuer, nous allons donner la forme de la présentation caractéristique C de l'idéal I , celle-ci nous étant utile pour la suite.

Proposition 5 Si I admet une présentation caractéristique C pour la relation d'ordre (3.12) alors C a la forme suivante :

$$\{\dot{\theta}_1, \dots, \dot{\theta}_q, P_1(y, u, \theta), \dots, P_m(y, u, \theta), Q_1(x, y, u, \theta), \dots, Q_n(x, y, u, \theta)\}, \quad (3.14)$$

où l'indéterminée principale de P_i est y_i pour $i = 1, \dots, m$ et celle de Q_j est x_j pour $j = 1, \dots, n$.

Donc les présentations caractéristiques entrées-sorties C_{θ}^{io} sont de la forme :

$$\{\dot{\theta}_1, \dots, \dot{\theta}_q, P_1(y, u, \theta), \dots, P_m(y, u, \theta)\}. \quad (3.15)$$

Les polynômes différentiels P_i , $i = 1, \dots, m$ peuvent être considérés comme des polynômes en y , u et leurs dérivées avec leurs coefficients dans $K(\theta)$. Ils sont récrits sous la forme

$$P_i(y, u, \theta) = m_{0,i}(y, u) + \sum_{k=1}^{n_i} \gamma_{k,i}(\theta) m_{k,i}(y, u), \quad (3.16)$$

où $\gamma_{k,i}(\theta)$ sont des fractions rationnelles en θ et $m_{k,i}(y, u)$, $i = 1, \dots, m$, $k = 0, \dots, n_i$ des polynômes différentiels en y et u .

Les relations qui en découlent

$$m_{0,i}(y, u) + \sum_{k=1}^{n_i} \gamma_{k,i}(\theta) m_{k,i}(y, u) = 0 \quad (3.17)$$

forment ce que l'on appellera dans la suite le *système entrée-sortie*.

- (ii) Regardons maintenant le deuxième problème qui était la difficulté à vérifier l'hypothèse de généricité. Quand le système est contrôlé, nous disposons d'une condition suffisante de généricité qui est que la forte contrôlabilité locale implique la généricité [20]. Quand le système n'est pas contrôlé, il n'existe pas de test simple pour prouver l'existence de solutions génériques. Nous allons donc voir dans la suite des méthodes évitant d'utiliser cette notion. Dans le reste de la section, nous considérerons tous les polynômes normalisés à coefficients dans $K(\theta)$, c'est à dire que nous faisons apparaître le coefficient 1 (les autres coefficients sont donc rationnels).

Comme nous allons le voir, la méthode entrée-sortie est basée sur l'étude des coefficients en θ des polynômes contenus dans C_θ^{i0} .

En reprenant la définition 22, il a été prouvé dans [42], [14], [14] la proposition suivante.

Proposition 6 Notons

$$\Delta P_i(y, u) = \det(m_{k,i}(y, u), k = 1, \dots, l, i = 1, \dots, m). \quad (3.18)$$

Si pour tout (y, u) , solution de I_θ^{i0} , $\Delta P_i(y, u)$ n'est pas dans l'idéal I_θ^{i0} , alors Γ est globalement identifiable en θ si et seulement si pour tout $\bar{\theta} \in U_{ad}$ ($\bar{\theta} \neq \theta$), les deux présentations caractéristiques C_θ^{i0} et $C_{\bar{\theta}}^{i0}$ sont distinctes.

Cette proposition utilise le comportement entrée-sortie du système, qui va être remplacé par une fonction plus simple appelée *résumé exhaustif*. Ce dernier est défini de la façon suivante :

Définition 29 Nous appelons **résumé exhaustif** d'une structure de modèle M, une application ρ de U_{ad} dans un ensemble E telle que

$$\forall \theta \in U_{ap}, \forall \theta^* \in U_{ad}, C(\theta) = C(\theta^*) \Leftrightarrow \rho(\theta) = \rho(\theta^*). \quad (3.19)$$

Cette fonction est constituée des coefficients $\gamma_{k,i}(\theta)$ de (3.16). L'analyse de ce résumé permet de conclure quant à l'identifiabilité des paramètres.

Récapitulons ce que nous avons. Pour prouver l'identifiabilité de Γ en θ , nous devons démontrer que pour tout $\bar{\theta} \in U_{ad}$ ($\bar{\theta} \neq \theta$), les deux présentations caractéristiques C_θ^{i0} et $C_{\bar{\theta}}^{i0}$ sont distinctes (proposition 6). Comme cette condition n'est pas facilement vérifiable dans la pratique, nous avons établi des conditions qui permettent d'avoir l'égalité entre C_θ et $C_{\bar{\theta}}$ (proposition 4), cette égalité permettant de ne faire qu'un calcul de présentations caractéristiques. Nous avons vu que l'étude de l'égalité $C(\theta) = C(\bar{\theta})$ peut être ramenée à une étude plus simple, celle du résumé exhaustif (définition 29). Il reste alors à vérifier l'hypothèse de la proposition 6 pour prouver l'identifiabilité.

Un algorithme permettant de tester l'identifiabilité de paramètres dans un système d'équations aux dérivées ordinaires a été implémenté par C. Noiret en MAPLE VII. La seconde et la cinquième étapes sont basées sur l'algorithme de Rosenfeld-Groebner qui a été réalisé par F. Boulier en MAPLE VII (Boulier et al., 1995).

Informations : f et h (les fonctions se trouvant dans Σ^θ).

Etape 1 : Le logiciel récrit le système original Σ^θ (3.21) sous la forme (3.11).

Etape 2 : L'algorithme Rosenfeld-Groebner calcule la présentation caractéristique générale entrée-sortie. Le logiciel permet d'avoir toutes les présentations caractéristiques particulières.

Etape 3 : Le logiciel calcule les valeurs de θ telles que des hypothèses techniques de la proposition 4 sur les polynômes de $C(\theta)$ ne sont pas valides.

Etape 4 : Le logiciel sauve les coefficients $\{\gamma_{k,i}(\theta), i = 1, \dots, l\}$ en tant que résumé exhaustif. Ce dernier est alors simplifié dans le but d'extraire le plus petit système générateur en terme de degré, nombre de monômes,...

Etape 5 : Le résumé exhaustif est alors analysé par l'algorithme de Rosenfeld-Groebner qui résout :

$$\begin{cases} \gamma_{k,i}(\theta) = \gamma_{k,i}(\bar{\theta}), & i = 1, \dots, m, k = 1, \dots, n_i, \\ \theta_i = 0, & i = 1, \dots, q. \end{cases} \quad (3.20)$$

Etape 6 : Le logiciel valide la méthode en vérifiant les hypothèses de la proposition 6. En particulier, il vérifie que les solutions ne sont pas dégénérées.

Des exemples complets de cet algorithme seront traités dans le chapitre 5.

Cas où les conditions initiales $x_0(\theta)$ sont prises en compte

Première méthode

Cette première méthode consiste à calculer les polynômes $P_i, i = 1, \dots, m$ de (3.16) d'après la méthode présentée précédemment sans considérer les conditions initiales puis de les intégrer dans une étude d'identifiabilité grâce à la proposition 7. Cette dernière donne une condition nécessaire et suffisante d'identifiabilité globale du vecteur de paramètre θ à partir de (3.16). Pour simplifier les notations, nous allons prendre $m = 1$. Soit l l'ordre le plus élevé de la dérivation de y dans (3.16) et Γ le modèle polynomial (3.11) associé au modèle

$$\Sigma_{x_0}^\theta \begin{cases} \dot{x}(t, \theta) &= f(x(t, \theta), \theta) + u(t)g(x(t, \theta), \theta), \\ y(t, \theta) &= h(x(t, \theta)) \\ x(0, \theta) &= x_0(\theta). \end{cases} \quad (3.21)$$

Proposition 7 On suppose que Γ possède des solutions non dégénérées. Le vecteur de paramètre $\theta \in U_{ad}$ est globalement (resp. localement) identifiable en θ s'il existe une solution non dégénérée tel que si l'on a pour tout $\bar{\theta} \in U_{ad}$,

$$\begin{cases} \gamma_{k,1}(\theta) &= \gamma_{k,1}(\bar{\theta}), k = 1, \dots, n_1 \\ y^{(j)}(0^+, \theta) &= y^{(j)}(0^+, \bar{\theta}) j = 0, \dots, l-1 \end{cases} \quad (3.22)$$

alors $\theta = \bar{\theta}$. (resp. il existe un voisinage V de θ dans U_{ad} tel que l'implication ci-dessus soit vraie avec U_{ad} remplacé par V .)

Si de plus le coefficient de $y^{(l)}$ dans (3.16) ne s'annule pas en $t = 0$ alors la réciproque est vraie.

Les dérivées $y^{(j)}(0^+, \theta)$ pour $j = 0, \dots, l-1$ peuvent être calculées en évaluant la présentation caractéristique en 0 ou directement à partir des équations du modèle.

Notre méthode permet de rendre compte de l'importance des conditions initiales dans une étude d'identifiabilité. En effet, le deuxième modèle que l'on étudiera nécessitera l'utilisation des conditions initiales pour avoir l'identifiabilité de tous les paramètres. La proposition 7 n'est pas

toujours facile à utiliser quand le coefficient de la dérivée $y^{(l)}$ s'annule en $t = 0$. Donnons un exemple académique.

Exemple 13 Soit le système suivant

$$\begin{cases} \dot{x}_1 &= \theta_1 x_1^2 + \theta_2 x_1^3 x_2 + u, \\ \dot{x}_2 &= \theta_3 x_1^2 + \theta_4 x_1 x_2, \\ x(0, \theta) &= (0, 1), \\ y &= x_1. \end{cases} \quad (3.23)$$

La présentation caractéristique générale calculée lors de l'étape 2 est égale à

$$\{x_1 - y, x_2 \theta_2 y^3 - \dot{y}y + \theta_1 y^2 + u, \ddot{y}y - (\theta_2 \theta_3 y^6 + y\dot{u} + (\theta_4 - \theta_1)y^2 \dot{y} - y^4 \theta_1 \theta_4 - 3\dot{y}(u - \dot{y}) - y^2 u \theta_4), \dot{\theta}_1, \dot{\theta}_2, \dot{\theta}_3, \dot{\theta}_4\}. \quad (3.24)$$

L'étape suivante ne donne aucune restriction sur les paramètres.

L'étape 5 donne le résumé exhaustif

$$\{-\theta_2 \theta_3, \theta_4 \theta_1, \theta_4, -\theta_4 + \theta_1\}. \quad (3.25)$$

L'analyse du résumé exhaustif lors des étapes 6 et 7 donne l'existence de solutions non dégénérées et les égalités

$$\bar{\theta}_1 = \theta_1, \bar{\theta}_2 \bar{\theta}_3 = \theta_4 \theta_1, \dot{\bar{\theta}}_3 = 0, \bar{\theta}_4 = \theta_4. \quad (3.26)$$

Sans prendre en compte les conditions initiales, les paramètres sont non identifiables. Le terme de plus haut degré dans le polynôme entrée-sortie est \ddot{y} et son coefficient pour $t = 0$ est nul. La réciproque de la proposition 7 ne peut donc pas être appliquée. Pour obtenir des informations supplémentaires, il faut dériver x_1 jusqu'à l'ordre 4, ce qui donne

$$x_1^{(4)}(0) = 6\theta_2 u(0) + 6\theta_1 \dot{u}(0). \quad (3.27)$$

En reprenant (3.26), on en déduit l'identifiabilité globale.

Chapitre 4

Estimation paramétrique

Une fois l'identifiabilité des paramètres établie, vient l'étape de leur identification. Un algorithme utilisé fréquemment pour des modèles non linéaires de type Michaelis-Menten est celui de Levenberg-Marquardt. Il consiste à minimiser un critère quadratique d'erreur de sortie. Toutefois, celui-ci étant un algorithme local, il ne converge que si nous disposons au départ d'une première estimation raisonnable de nos paramètres, ce que nous allons chercher à déterminer.

Pour obtenir une première estimation des paramètres à identifier, nous allons utiliser l'étude menée pour prouver l'identifiabilité de nos modèle. Pour cela, nous allons introduire dans la première partie de ce chapitre des critères d'optimisation utilisant les polynômes des présentations caractéristiques ainsi que les polynômes intégro-différentiels déduits des précédents. Ces critères vont permettre de déterminer une valeur approchée de θ , laquelle permettra d'utiliser l'algorithme de Levenberg-Marquardt qui sera présenté dans la seconde partie de ce chapitre.

Notons $y(t_i) \in \mathbb{R}^m$ le vecteur contenant les mesures effectuées au temps t_i où $i = 0, \dots, M$. Le vecteur contenant les mesures effectuées s'écrira alors :

$$y = \begin{bmatrix} y(t_0) \\ y(t_1) \\ \vdots \\ y(t_M) \end{bmatrix}. \quad (4.1)$$

De même, $\bar{y}(t_i, \theta) \in \mathbb{R}^m$ désigne le vecteur des quantités correspondantes calculées pour la valeur θ au temps t_i . $\bar{y}(\theta)$ désigne le vecteur construit comme précédemment rassemblant toutes les valeurs ainsi calculées.

4.1 Méthodes pour obtenir une première estimation des paramètres

Rappelons que les polynômes obtenus dans la présentation caractéristique peuvent s'écrire (nous renvoyons au chapitre 3, équation(3.16)) :

$$P_i(y, u, \theta) = m_{0,i}(y, u) + \sum_{k=1}^{n_i} \gamma_{k,i}(\theta) m_{k,i}(y, u), \quad i = 1, \dots, m, \quad (4.2)$$

où m est le nombre d'observation, $\gamma_{i,k}(\theta)$ sont des fractions rationnelles en θ et $m_{k,i}(y, u)$, $i = 1, \dots, m$, $k = 0, \dots, n_i$ des polynômes différentiels en y et u . De plus, il y a autant de polynômes que d'observation. Les relations

$$P_i(y, u, \theta) = 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (4.3)$$

forment ce que l'on appelle le système entrée-sortie quand le système est contrôlé et le système paramètre-sortie sinon. Par définition, cette équation est vérifiée en $(y(\theta^\dagger), u, \theta^\dagger)$, θ^\dagger étant la valeur exacte des paramètres.

Pour simplifier les notations, nous allons supposer par la suite n'avoir qu'une observation, et le polynôme de la présentation caractéristique sera noté P . On l'écrira :

$$P(y, u, \theta) = m_0(y, u) + \sum_{k=1}^n \gamma_k(\theta) m_k(y, u), \quad (4.4)$$

– **Critère entrée-sortie**

En considérant l'erreur sur le polynôme entrée-sortie, $e(\theta) = (P(y(t_i), u(t_i), \theta))_{i=0, \dots, M}$, un premier type de critère peut-être obtenu :

$$J_{es} = e(\theta)^2 = \sum_{i=0}^M P(y(t_i), u(t_i), \theta)^2. \quad (4.5)$$

Cette formulation revient à considérer :

$$J_{es} = \sum_{i=0}^M \sum_{j=1}^n \left[\gamma_j m_j(y(t_i), \dot{y}(t_i), \dots, y^{(k_j)}(t_i), u(t_i)) + m_0(y(t_i), \dot{y}(t_i), \dots, y^{(k_0)}(t_i), u(t_i)) \right]^2 \quad (4.6)$$

Notons $\gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_p)$. Ce critère se récrit :

$$J_{es}(\gamma) = \| A\gamma + b \|^2, \quad (4.7)$$

où

$$A = \left(m_j(y(t_i), \dot{y}(t_i), \dots, y^{(k_j)}(t_i), u(t_i)) \right)_{j=1, \dots, n; i=0, \dots, M}, \quad (4.8)$$

$$b^T = \left(m_0(y(t_i), \dot{y}(t_i), \dots, y^{(k_0)}(t_i), u(t_i)) \right)_{i=0, \dots, M}. \quad (4.9)$$

Le minimum global de ce critère sera trouvé grâce à la factorisation QR de la matrice A . Le désavantage de ce critère est la présence de dérivées de l'observation jusqu'à un ordre $\kappa = \max(k_0, \dots, k_n)$ en les temps t_0, \dots, t_M . De plus, nous ne disposons que de données bruitées. Dans un tel cas, approcher les valeurs des dérivées par une quelconque méthode (différence finie, interpolation polynômiale, ...) propage le bruit présent dans l'état observé, ce qui ne peut que conduire à une importante erreur sur la matrice A donc à une grande incertitude sur l'estimation de θ .

– **Critère intégral**

Pour diminuer le bruit occasionné par les dérivées de l'observation, il est possible dans certains cas d'intégrer les polynômes entrée-sortie pour diminuer κ , l'ordre maximal des dérivées en y intervenant dans $P(y, u, \theta)$ et utiliser l'erreur sur ce nouveau polynôme dans le critère. Dans ce dernier subsistera toujours des dérivées qui seront cette fois d'ordre strictement inférieur à κ , mais également des intégrales dont les intégrandes seront fonction des observations et de ses dérivées. Celles-ci seront calculées en utilisant la méthode des trapèzes. Toutes ces manipulations fournissent un critère linéaire en les blocs γ dont le minimum est aisément calculable.

Cette méthode fournit un nouveau critère appelé critère intégral et que l'on écrit :

$$J_{int}(\gamma) = \| A_{int}\gamma + b_{int} \|^2, \quad (4.10)$$

où la matrice A_{int} et b_{int} sont construits de manière analogue à la matrice A et au vecteur b de (4.7).

Ces deux critères ont été étudiés dans la thèse de C. Noiret [42] et elle en est arrivée à la conclusion que la deuxième méthode est de loin la plus efficace. C'est donc celle-ci que nous reprendrons dans nos applications numériques.

Une fois cette première estimation calculée, des algorithmes locaux tels que Levenberg-Marquardt peuvent être utilisés. C'est ce dernier que nous utiliserons dans nos applications numériques et que nous présentons dans la partie suivante.

4.2 Un algorithme d'optimisation : celui de Levenberg-Marquardt

Une fois obtenue une première estimation des paramètres, nous allons chercher à minimiser l'erreur sur les sorties, soit :

$$e(\theta)^2 = \sum_{i=0}^M (\bar{y}(t_i, \theta) - y(t_i))^2, \quad (4.11)$$

où $e(\theta)$ est l'erreur de sortie $\bar{y}(\theta) - y$.

L'algorithme de Levenberg-Marquardt consiste à appliquer une méthode de régularisation sur ce critère.

Opérateurs linéaires

L'estimation de paramètres peut se formuler comme un problème de reconstruction de la solution x à partir de données \bar{y} satisfaisant des équations de type :

$$Tx = \bar{y}, \quad (4.12)$$

où $T : D(T) \subset X \rightarrow Y$ est un opérateur linéaire, injectif entre les deux espaces de Hilbert X et Y .

Ce problème sera dit bien posé, au sens d'Hadamard [31], si :

1. Le système (4.12) admet une solution.
2. Cette solution est unique.
3. La solution dépend continûment des données du problème.

Rappelons que les données dont nous disposons sont généralement bruitées ce qui conduit à d'importants problèmes numériques puisque la troisième condition d'Hadamard n'est pas vérifiée et entraîne que de petites perturbations des données peuvent conduire à de très grandes perturbations sur la solution. Pour y remédier, il est possible d'utiliser des méthodes de régularisation qui vont apporter des informations de façon partielle sur la solution. L'art d'appliquer ces méthodes va consister à trouver un compromis entre l'exactitude recherchée sur la solution et la stabilité de la méthode.

Précisons ce que nous entendons par équation bien posée en introduisant la définition suivante :

Définition 30 Soit $T : D(T) \subset X \rightarrow Y$ un opérateur linéaire de X dans Y , deux espaces normés. L'équation (4.12) est dite *bien posée* si T est bijectif et d'inverse $T^{-1} : Y \rightarrow X$ continu.

Résoudre (4.12) revient à inverser l'opérateur T . Comme T remplit rarement les hypothèses de la définition précédente, il faut trouver une bonne approximation de T^{-1} , d'où la définition suivante

Définition 31 Un *schéma de régularisation* pour un opérateur linéaire T borné est une famille d'opérateurs $(R_\alpha)_{\alpha>0}$ tel que :

$$\forall x \in X, \lim_{\alpha \rightarrow 0} \|R_\alpha T x - x\| = 0. \quad (4.13)$$

Le paramètre α est appelé *paramètre de régularisation*.

Soit $(R_\alpha)_\alpha$ un schéma de régularisation de T , $\bar{y} \in T(X)$, \bar{x} l'unique antécédent de \bar{y} et y^δ l'approximation des données \bar{y} telle que

$$\|\bar{y} - y^\delta\| \leq \delta. \quad (4.14)$$

Le but est donc de déterminer \bar{x} à partir de y^δ en définissant la famille $\{x^{\alpha,\delta} = R_\alpha y^\delta\}$. L'erreur de reconstruction est alors égale à $\|x^{\alpha,\delta} - \bar{x}\|$ et est bornée par $\delta \|R_\alpha\| + \|R_\alpha T \bar{x} - \bar{x}\|$. Il faut donc choisir α pour rendre l'erreur de reconstruction la plus petite possible.

Définition 32 Une stratégie de régularisation $\alpha = \alpha(\delta)$ est dite admissible si

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \alpha(\delta) = 0 \text{ et } \limsup_{\delta \rightarrow 0} \{\|R_{\alpha(\delta)} y^\delta - x\| \text{ tel que } \|Ax - y^\delta\| \leq \delta\} = 0 \quad (4.15)$$

pour tout $x \in X$.

Dans la suite, nous supposons que seule une donnée bruitée y^δ est disponible et que

$$\|y^\delta - \bar{y}\| \leq \delta. \quad (4.16)$$

Résoudre (4.12) avec une donnée bruitée y^δ est équivalent à trouver le minimum de la fonctionnelle $J_0 : x \mapsto \|Tx - y^\delta\|^2$ dans X . Bien sûr, la solution de ce problème ne dépend pas continûment des données. Pour résoudre ce problème de stabilité, on peut lui ajouter un terme de pénalité à la fonctionnelle, soit :

$$J_\alpha : x \mapsto \|Tx - y^\delta\|^2 + \alpha \|x - x^*\|^2 \quad (4.17)$$

où x^* est une approximation de la solution \bar{x} . La fonctionnelle est appelée *fonctionnelle de Tikhonov* et le paramètre α est appelé paramètre de régularisation. Si nous ne disposons pas d'une première approximation de \bar{x} , on peut prendre $x^* = 0$. Le théorème suivant justifie du choix de la méthode.

Théorème 4 La fonctionnelle de Tikhonov J_α admet un unique minimum $x^{\alpha,\delta}$ dans X pour tout $\alpha > 0$, $y^\delta \in Y$ et $x^* \in X$. Ce minimum est égal à

$$x^{\alpha,\delta} = (T^*T + \alpha I)^{-1}(T^*y^\delta + \alpha x^*). \quad (4.18)$$

L'opérateur $T^*T + \alpha I$ est borné et inversible, donc $x^{\alpha,\delta}$ dépend continûment de y^δ .

Quand $x^* = 0$, la méthode de Tikhonov [31] consiste donc à approcher l'opérateur T^{-1} par les opérateurs de régularisation $(T^*T + \alpha I)^{-1}$ où T^* est l'opérateur adjoint. La solution du problème s'écrit alors

$$x^{\alpha,\delta} = (T^*T + \alpha I)^{-1}T^*y^\delta. \quad (4.19)$$

Il est facile de voir que lorsque le paramètre de régularisation α tend vers 0, l'unique solution $x^{\alpha,\delta}$ de (4.19) converge au sens des moindres carrés vers la solution de (4.12). Malheureusement cette méthode est déficiente dans le cas des problèmes mal posés car le taux de convergence de (4.19) n'excède pas $O(\delta^{2/3})$.

L'étude des opérateurs linéaires va nous servir pour celle des opérateurs non linéaires. En effet, nous allons voir que les méthodes type Newton ou Levenberg-Marquardt consistent à linéariser l'opérateur F de (4.12) autour d'un point approchant la solution.

Opérateurs non linéaires

L'équation à résoudre se réécrit

$$F(x) = \bar{y}, \quad (4.20)$$

où $F : D(F) \subset X \rightarrow Y$ est un opérateur non-linéaire, différentiable entre X et Y , deux espaces de Hilbert réels.

Comme précédemment, nous supposons que seule une donnée bruitée y^δ est disponible et vérifie $\|\bar{y} - y^\delta\| \leq \delta$, et que x^* est une première estimation a priori de la solution \bar{x} .

La méthode de Gauss-Newton est en général choisie pour résoudre (4.20). Elle consiste à linéariser l'opérateur F de l'équation (4.20) autour de la solution approchée x_{n-1}^δ et de calculer x_n^δ à partir de

$$F'(x_{n-1}^\delta)(x_n^\delta - x_{n-1}^\delta) = y^\delta - F(x_{n-1}^\delta). \quad (4.21)$$

Malheureusement, elle atteint vite ses limites car le problème (4.21) est très souvent mal posé. Il n'aura donc pas de solution. Levenberg en 1944 [34], puis Marquardt en 1963 [38] ont imaginé de lui appliquer le procédé de régularisation de Tikhonov, d'où des itérés de la forme

$$x_n^\delta = x_{n-1}^\delta - (F'(x_{n-1}^\delta)^* F'(x_{n-1}^\delta) + \alpha_{n-1} I)^{-1} F'(x_{n-1}^\delta)^* (F(x_{n-1}^\delta) - y^\delta), \quad (4.22)$$

où (α_n) est une suite de paramètres de régularisation. Cette méthode a alors été appelée *méthode de Levenberg-Marquardt*. Chaque itéré peut-être caractérisé comme la solution du problème de minimisation

$$\|F(x) - y^\delta\|^2 + \alpha_{n-1} \|x - x^*\|, \quad (4.23)$$

où F est linéarisé autour de x_{n-1}^δ et $x^* = x_n^\delta$, soit

$$\|F(x_{n-1}^\delta) + F'(x_n^\delta)(x_n^\delta - x_{n-1}^\delta) - y^\delta\|^2 + \alpha_n \|x_n^\delta - x_{n-1}^\delta\|^2, \quad (4.24)$$

Le choix de la suite (α_n) est important dans cette méthode. Si $\|\bar{x} - x^*\|$ est suffisamment petit, alors on peut choisir comme suite de paramètres régularisantes la suite

$$\alpha_n = \alpha_0 \left(\frac{1}{2}\right)^n. \quad (4.25)$$

M. Hanke [24] propose un autre choix qui consiste à définir les termes de la suite comme solution de l'équation

$$\|y^\delta - F(x_n^\delta) - F'(x_n^\delta)(x_{n+1}^\delta - x_n^\delta)\| = \rho \|y^\delta - F(x_n^\delta)\|, \quad (4.26)$$

avec $0 < \rho < 1$ et où x_{n+1}^δ est remplacé par son expression déduite de (4.22). Le taux de convergence est alors $o(1)$.

Si A_{n-1} est une approximation de la dérivée de Fréchet de F en x_{n-1} , alors les itérés (4.22) se réécrivent

$$x_n^\delta = x_{n-1}^\delta - (A_{n-1}^* A_{n-1} + \alpha_{n-1} I)^{-1} A_{n-1}^* (F(x_{n-1}^\delta) - y^\delta). \quad (4.27)$$

D'où l'algorithme :

Entrer $x_0^\delta = x^*$, N : le nombre maximal d'itérations,
n=1,

Répéter

 Calcul de (α_n) en utilisant (4.25) ou (4.26),

 Calcul de x_n^δ en utilisant (4.27),

 n=n+1,

jusqu'à ce que ($\|x_n^\delta - x_{n-1}^\delta\| \leq 10^{-4}$ ou $n = N$)

Chapitre 5

Identifiabilité et estimation paramétrique de 2 modèles en pharmacocinétique représentés par des équations différentielles non linéaires

Dans cette partie, nous allons traiter les deux modèles paramétriques en pharmacocinétique introduits dans le chapitre 1. Pour chacun d'eux, nous étudierons d'abord l'identifiabilité du modèle en nous appuyant sur les résultats d'algèbre différentielle vus dans le chapitre 3, puis à partir de cette étude théorique, nous ferons une première estimation des paramètres. Celle-ci nous servira de point de départ pour appliquer l'algorithme d'optimisation locale de Levenberg-Marquard, vu dans le chapitre 4. La principale difficulté numérique de cette partie a été l'estimation des dérivées qui était plus ou moins sensible au bruit selon la méthode employée. Nous avons utilisé deux méthodes différentes, l'une basée sur l'interpolation polynômiale, l'autre proposée par Ibrir et Diop dans [27] qui ne demande aucune connaissance statistique sur l'incertitude des mesures. Puis nous avons comparé les résultats.

5.1 Identifiabilité et estimation paramétrique du premier modèle en pharmacocinétique

Etudions le premier modèle pharmacocinétique qui rappelons-le est donné par :

$$\begin{cases} \dot{x}_1 &= \alpha_1(x_2 - x_1) - \frac{V_m x_1}{k_c + x_1}, \\ \dot{x}_2 &= \alpha_2(x_1 - x_2), \\ x_1(0) &= C_0, \\ x_2(0) &= 0, \\ y &= x_1, \end{cases} \quad (5.1)$$

On observe donc l'état x_1 et les paramètres à identifier sont $\theta = \{\alpha_1, k_c, V_m, \alpha_2\}$.

L'ensemble des valeurs admissibles pour θ est \mathbb{R}_+^4 .

Cet exemple a été traité avec le logiciel implémenté par C. Noiret et dont l'algorithme a été présenté dans la partie 3.4. Les étapes sont les suivantes :

1. Le logiciel récrit le système de la façon suivante :

$$\begin{cases} \dot{x}_1(k_c + x_1) - \alpha_1(x_2 - x_1)(k_c + x_1) + (V_m x_1) = 0, \\ \dot{x}_2 - \alpha_2(x_1 - x_2) = 0, \\ y - x_1 = 0, \\ k_c + x_1 \neq 0, \\ \dot{\alpha}_1 = 0, \dot{\alpha}_2 = 0, \dot{V}_m = 0, \dot{k}_c = 0. \end{cases}$$

2. Il retourne ensuite la présentation caractéristique suivante, sous l'hypothèse $\alpha_1 \neq 0$:

$$\{2k_c\ddot{y}y + k_c^2\ddot{y} + (\alpha_1 + \alpha_2)\dot{y}y^2 + 2k_c(\alpha_1 + \alpha_2)\dot{y}y + ((\alpha_1 + \alpha_2)k_c + V_m)k_c\dot{y} + \alpha_2V_m y^2 + \alpha_2V_mk_c y - \dot{y}y^2\}.$$

(Le cas particulier $\alpha_1 = 0$ ne correspond pas à une hypothèse réaliste. En effet, la membrane du macrophage est perméable dans les deux sens, de l'extérieur vers l'intérieur et réciproquement).

3. Le cas $V_mk_c = 0$ est exclu car il ne vérifie pas les hypothèses techniques de la proposition 4 sur les polynômes de $C(\theta)$. Aussi, l'ensemble Ω_q est défini par $\Omega_q = \{\theta \in \mathbb{R}^4 / \alpha_1 \neq 0, V_mk_c \neq 0\}$.
4. Le logiciel donne le résumé exhaustif suivant :

$$\{k_c\alpha_2V_m, k_c^2, k_c, k_c(\alpha_1 + \alpha_2), \alpha_2V_m, \alpha_1 + \alpha_2, k_c(k_c\alpha_2 + k_c\alpha_1 + V_m)\}.$$

5. L'analyse du résumé exhaustif donne :

$$\{V_m = \bar{V}_m, k_c = \bar{k}_c, \alpha_1 = \bar{\alpha}_1, \alpha_2 = \bar{\alpha}_2\}$$

6. Le logiciel vérifie ensuite que le déterminant $\det\{\ddot{y}y, \ddot{y}, \dot{y}y, \dot{y}, y^2, y\}$ n'est pas dans I_θ^0 , l'idéal obtenu après élimination des variables d'état.

On en déduit donc que le modèle (5.1) est globalement identifiable sur Ω_q ou structurellement identifiable sur \mathbb{R}_+^4 .

Le polynôme entrée-sortie, donné par le logiciel est égal à :

$$P(y, \gamma) = \ddot{y}y^2 + 2\gamma_1\ddot{y}y + \gamma_2\ddot{y} + \gamma_3\dot{y}y^2 + 2\gamma_4y\dot{y} + \gamma_5\dot{y} + \gamma_6y^2 + \gamma_7y, \quad (5.2)$$

avec $\gamma = \{k_c, k_c^2, \alpha_1 + \alpha_2, k_c(\alpha_1 + \alpha_2), (k_c(\alpha_1 + \alpha_2) + V_m)k_c, \alpha_2V_m, \alpha_2V_mk_c\}$ qui est connu.

Pour ne pas avoir à estimer la dérivée seconde de y , nous allons intégrer le polynôme entrée-sortie entre $t_0 > 0$ et t . La borne inférieure d'intégration provient de la difficulté à estimer les dérivées au temps $t = 0$. Ce qui nous donne :

$$\begin{aligned} P_{int} &= \dot{y}(t)y(t)^2 - \dot{y}(t_0)y(t_0)^2 - 2 \int_{t_0}^t y(s)\dot{y}(s)^2 ds \\ &+ 2\gamma_1(\dot{y}(t)y(t) - \dot{y}(t_0)y(t_0) - \int_{t_0}^t \dot{y}(s)^2 ds) + \gamma_2(\dot{y}(t) - \dot{y}(t_0)) + \gamma_3(y(t)^3 - y(t_0)^3)/3 \\ &+ \gamma_4(y(t)^2 - y(t_0)^2) + \gamma_5(y(t) - y(t_0)) + \gamma_6 \int_{t_0}^t y(s)^2 ds + \gamma_7 \int_{t_0}^t y(s) ds \\ &= 0. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Il intervient dans cette équation des intégrales que nous ne pouvons pas calculer de manière exacte. Aussi, celles-ci vont être estimées numériquement par la méthode des trapèzes. La discrétisation en temps de l'intervalle d'étude a été choisie uniforme ($t_0 = t_{n_0}, t = t_k, k = n_0, \dots, n_1$). On est alors ramené à résoudre le problème de moindres carrés suivant :

$$\min_{\gamma_1(\theta), \dots, \gamma_7(\theta)} \sum_{k=n_0}^{n_1} \left(\sum_{j=1}^7 A_{k,j} \gamma_j(\theta) - b_k \right)^2, \quad (5.4)$$

où

$$\begin{aligned} A_{k,1} &= 2(y_p(t_{n_0})y(t_{n_0}) - y_p(t_k)y(t_k)) + \sum_{i=n_0}^{k-1} (t_{i+1} - t_i)(y_p(t_i)^2 + y_p(t_{i+1})^2), \\ A_{k,2} &= y_p(t_{n_0}) - y_p(t_k), \quad A_{k,3} = (y(t_{n_0})^3 - y(t_k)^3)/3, \\ A_{k,4} &= (y(t_{n_0})^2 - y(t_k)^2), \quad A_{k,5} = y(t_{n_0}) - y(t_k), \\ A_{k,6} &= -\frac{1}{2} \sum_{i=n_0}^{k-1} (t_{i+1} - t_i)(y(t_i)^2 + y(t_{i+1})^2), \quad A_{k,7} = -\frac{1}{2} \sum_{i=n_0}^{k-1} (t_{i+1} - t_i)(y(t_i) + y(t_{i+1})) \\ b_k &= y_p(t_k)y(t_k)^2 - y_p(t_{n_0})y(t_{n_0})^2 - \sum_{i=n_0}^{k-1} (t_{i+1} - t_i)(y(t_i)y_p^2(t_i) + y(t_{i+1})y_p^2(t_{i+1})), \end{aligned} \quad (5.5)$$

où $y_p(t_i)$ est l'approximation numérique de $\dot{y}(t_i)$.

L'une des principales difficultés numériques est d'obtenir une estimation fiable des dérivées des mesures en présence de bruit dont nous supposons inconnue la variance. Nous allons introduire deux méthodes de dérivation que nous comparerons.

Dans un premier temps, nous avons utilisé une méthode d'interpolation polynomiale, que nous appellerons méthode de dérivation 1 (MD1). Après plusieurs essais, nous avons choisi des polynômes de degré 3. En effet, des polynômes de degré plus élevé n'ont pas permis d'améliorer les résultats. Sachant que la donnée de départ est la trajectoire mesurée $y = (y_0, \dots, y_N)$ où $y_i = y(t_i)$ pour $i = 0, \dots, N$, la méthode consiste à approcher chaque y_i par l'évaluation en t_i du polynôme de degré 3 :

$$a_i t^3 + b_i t^2 + c_i t + d_i. \quad (5.6)$$

Pour obtenir les coefficients a_i, b_i, c_i, d_i nous avons introduit la fonctionnelle suivante :

$$F_i(a_i, b_i, c_i, d_i) = \sum_{k=i-3}^{i+3} (y_k - a_i t^3 - b_i t^2 - c_i t - d_i)^2. \quad (5.7)$$

Minimiser F_i , pour $i = 3, \dots, N - 3$ peut se formuler sous la forme quadratique :

$$\| z_i - H_i \theta_i \|^2, \quad (5.8)$$

avec

$$\begin{aligned} z_i &= (y_{i-3}, \dots, y_{i+3})^T, \\ \theta_i &= (a_i, b_i, c_i, d_i)^T, \\ H_i &= (h_{k,j})_{k,j}, \text{ tel que } h_{k,j} = t_{i+k-3}^j. \end{aligned} \quad (5.9)$$

**Chapitre 5. Identifiabilité et estimation paramétrique de 2 modèles en
40 pharmacocinétique représentés par des équations différentielles non linéaires**

La factorisation QR de H_i permet une résolution simple et rapide de (5.8). Ainsi, des approximations de l'observation au temps t_i , $i = 3, \dots, N - 3$ sont obtenues par la résolution de $N - 5$ problèmes des moindres carrés linéaires du type (5.8). Les dérivées premières en t_i sont estimées en dérivant une fois le polynôme (5.6).

La deuxième méthode de dérivation que nous utiliserons est une méthode de régularisation. Elle sera appelée méthode de dérivation 2 (MD2). Les critères proposés dans la littérature sont composés d'un terme de moindres carrés, qui symbolise le rapprochement de la solution du problème d'optimisation aux mesures, et d'un autre terme de lissage qui mesure le degré de filtrage de la solution. Nous avons choisi l'algorithme initié par S. Ibrir et Diop dans [27] basé sur un problème de régularisation avec un terme de lissage équivalent à l'intégrale du carré de la q -ième dérivée de la solution.

Faisons d'abord quelques rappels.

Définition 33 On définit par récurrence sur k la i ème fonction B-spline normalisée $B_{i,k+1}$ d'ordre $k + 1$ pour $i = 0, \dots, n - k - 1$ correspondant à la séquence des noeuds $\tau = (t_i)_{i=0}^n$ par les relations suivantes :

$$B_{i,1}(t) = \begin{cases} 1 & \text{si } t \in [t_i, t_{i+1}[\\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

$$B_{i,k+1}(t) = w_{i,k}(t)B_{i,k}(t) + (1 - w_{i+1,k}(t))B_{i+1,k}(t), \quad k \geq 1,$$

avec

$$w_{i,j}(t) = \begin{cases} \frac{t - t_i}{t_{i+j} - t_i}, & \text{si } t_i \neq t_{i+1}, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (5.10)$$

Proposition 8 1. La fonction $B_{j,k+1}$ est sur chaque intervalle $[t_i, t_{i+1}]$ de degré $\leq k$.

2. La fonction $B_{i,k+1}$ s'annule en dehors de l'intervalle $[t_i, t_{i+k+1}]$.

On peut construire $2k$ B-splines de degré k linéairement indépendantes en introduisant $2k$ noeuds fictifs

$$t_{-k} \leq t_{-k+1} \leq \dots \leq t_{-1} \leq t_0 = a, \\ b = t_n \leq t_{n+1} \leq \dots \leq t_{n+k}$$

auxquels on associe les B-splines $B_{i,k+1}$ pour $i = -k, \dots, -1$ et $i = n - k, \dots, n - 1$. Les fonctions B-splines d'ordre $k + 1$, $(B_{i,k+1})_{i=-k}^{n-1}$ constituent ainsi une base de l'espace vectoriel des fonctions définies sur l'intervalle $[t_0, t_n]$, polynômiales de degré inférieur ou égal à k sur chaque intervalle $[t_i, t_{i+1}]$ de classe C^{k-r} au voisinage de chaque noeud de multiplicité r .

Proposition 9 Les dérivées des B-splines sont données par la formule :

$$d^j(\sum \alpha_i B_{i,k}) = \sum \alpha_i^{<j+1>} B_{i,k-j}, \quad (5.11)$$

avec

$$\alpha_i^{<j+1>} = \begin{cases} \alpha_r, & \text{si } j = 0 \\ \frac{\alpha_r^{<j>} - \alpha_{r-1}^{<j>}}{(t_{r+k-j} - t_r)/(k - j)}, & \text{si } j > 0. \end{cases} \quad (5.12)$$

Comme dans la suite nous n'aurons besoin que du calcul des dérivées premières, nous nous limiterons aux B-splines cubiques. De plus, il est possible de trouver une suite de points optimaux (cf. [8]). Mais cette détermination est coûteuse et n'est intéressante que si l'emplacement précis de certains points est important pour la qualité de l'approximation, comme par exemple quand les données présentent des discontinuités ou que l'on cherche une approximation avec peu de points. Comme nos données sont régulières, nous nous limiterons à une répartition uniforme des noeuds. Examinons le cas particulier des B-splines cubiques sur les noeuds équirépartis $t_{i+1} = t_i + h$, $i = 0, \dots, n-1$. Alors, on a :

$$6h^3 B_{i,4}(t) = \begin{cases} (t - t_i)^3, & \text{si } t \in [t_i, t_{i+1}], \\ h^3 + 3h^2(t - t_{i+1}) + 3h(t - t_{i+1})^2 - 3(t - t_{i+1})^3, & \text{si } t \in [t_{i+1}, t_{i+2}], \\ h^3 + 3h^2(t_{i+3} - t) + 3h(t_{i+3} - t)^2 - 3(t_{i+3} - t)^3, & \text{si } t \in [t_{i+2}, t_{i+3}], \\ (t_{i+4} - t)^3, & \text{si } t \in [t_{i+3}, t_{i+4}], \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (5.13)$$

Nous allons dans la suite chercher à donner une valeur approchée de $y'(t_i)$. Pour cela, nous allons supposer observer $y(t_l) = \bar{y}(t_l) + \epsilon(t_l)$, $l = i-4, \dots, i$ pour $i = 4, \dots, n$ où $\epsilon(t_l)$ est l'erreur de mesure en t_l et \bar{y} est la solution exacte. Le but de ce qui va suivre va consister à trouver une fonction \hat{y} exprimée dans la base des B-splines cubiques et minimisant l'erreur entre les observations et cette fonction sur l'ensemble des noeuds τ .

D'après ce qui précède, on a :

$$\hat{y}(t) = \sum_{j=i-4}^i \alpha_j B_{j,4}(t), \quad t_{i-4} \leq t \leq t_i, \quad (5.14)$$

où $\alpha \in \mathbb{R}^5$ et $B_{i,4}$ est la i ème fonction de la base de B-spline d'ordre 4.

Introduisons la fonction coût J :

$$J = \frac{1}{5} \sum_{l=i-4}^i [\hat{y}(t_l) - y(t_l)]^2 + \lambda \sum_{l=i-3}^{i-1} [\hat{y}_l^{(2)}(\Delta t)^2]^2, \quad (5.15)$$

où $\hat{y}_l^{(2)}$ désigne la dérivée seconde en t_l de $\hat{y}(t)$ calculée par le schéma aux différences finies, Δt un pas de temps régulier, λ un paramètre constant qui sera précisé par la suite.

On va chercher à la minimiser sur chaque fenêtre $[t_{i-4}, \dots, t_i]$ de longueur 5. J peut-être réécrite sous forme matricielle comme :

$$J = \frac{1}{5} \|Y - \hat{Y}\|^2 + \lambda \|H\hat{Y}\|^2, \quad (5.16)$$

avec

$$Y = \begin{pmatrix} y_{i-4} \\ y_{i-3} \\ \vdots \\ y_i \end{pmatrix}, \quad (5.17)$$

$$\hat{Y} = \begin{pmatrix} \hat{y}_{i-4} \\ \hat{y}_{i-3} \\ \vdots \\ \hat{y}_i \end{pmatrix} \quad (5.18)$$

et H la matrice de taille $(3) \times (5)$ qui s'écrit :

$$H = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.19)$$

En reprenant (5.14), la fonction coût se récrit

$$J = \frac{1}{5}(Y - B\alpha)'(Y - B\alpha) + \lambda\alpha' B' R B \alpha, \quad (5.20)$$

où

$$R = H' H, \quad (5.21)$$

et

$$B = \begin{pmatrix} B_{i-4,4}(t_{i-4}) & B_{i-3,4}(t_{i-4}) & \dots & B_{i,4}(t_{i-4}) \\ B_{i-4,4}(t_{i-3}) & B_{i-3,4}(t_{i-3}) & \dots & B_{i,4}(t_{i-3}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{i-4,4}(t_i) & B_{i-3,4}(t_i) & \dots & B_{i,4}(t_i) \end{pmatrix}. \quad (5.22)$$

La condition d'optimalité de J est obtenue en prenant $\frac{dJ}{d\alpha} = 0$, ce qui donne après simplification :

$$\alpha = (5\lambda R B + B)^{-1} Y, \quad (5.23)$$

et par conséquent,

$$\hat{Y} = (I - 5\lambda R(I + 5\lambda R)^{-1}) Y.$$

Reste à préciser le paramètre d'ajustement λ . Dans son article, Ibrir propose d'utiliser le critère GCV (Generalized Cross Validation) introduit par Craven et Wahba en 1970 qui, dans ce cas particulier, consiste à minimiser la fonction

$$V(\lambda) = \frac{\frac{1}{5} \| 5\lambda R(I + 5\lambda R)^{-1} Y \|^2}{\left[\frac{1}{5} \text{trace}(5\lambda R(I + 5\lambda R)^{-1}) \right]^2}. \quad (5.24)$$

Pour cela, il est possible d'utiliser la méthode de Newton pour calculer le minimum de $V(\lambda)$, d'où les itérations :

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k - \frac{\dot{V}(\lambda_k)}{\ddot{V}(\lambda_k)}, \quad (5.25)$$

où \dot{V} et \ddot{V} sont les dérivées de V par rapport au paramètre λ . En posant

$$\begin{aligned} p &= 5\lambda, \\ v &= (pR + I)^{-1} Y, \\ W &= (pR + I)^{-1}, \end{aligned} \quad (5.26)$$

le critère V se récrit

$$V(p) = \frac{\frac{1}{5} \| pRv \|^2}{\left[\frac{1}{5} \text{trace}(pRW) \right]^2} =: \frac{N}{D}.$$

En dérivant N et D par rapport à λ , il vient que :

$$\frac{dN}{d\lambda} = 2pv'R'R[I + p^2RWR - pR]v,$$

et

$$\frac{dD}{d\lambda} = \frac{2}{5} \text{trace}(pRW) [\text{trace}(RW) + \text{trace}(pR^2W(pRW - I))].$$

Les dérivées secondes s'écrivent

$$\frac{d^2N}{d\lambda^2} = 10v'R'R(I + S)v + 10p \left\{ 2v'R'R(I + S)\frac{dv}{dp} + v'R'R\frac{dS}{dp}v \right\},$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2D}{d\lambda^2} &= 2 [\text{trace}(RW + pR^2W(pRW - I))]^2, \\ &+ 2\text{trace}(pRW) \left\{ \text{trace}\left(R\frac{dW}{dt} + \text{trace}(R^2W(pRW - I)) \right. \right. \\ &\left. \left. + \text{trace}\left(pR^2\frac{dW}{dp}(pRW - I)\right) + \text{trace}\left(pR^2W(RW + pR\frac{dW}{dp})\right) \right\} \end{aligned} \quad (5.27)$$

avec

$$\begin{aligned} S &= p^2RWR - pR, \\ \frac{dS}{dp} &= 2pR \left\{ W + \frac{p}{2} \frac{dW}{dp} \right\} R - R, \\ \frac{dW}{dp} &= p(EW)^2 - RW, \\ \frac{dv}{dp} &= pRW Rv - Rv. \end{aligned} \quad (5.28)$$

Ces expressions permettent alors de calculer les dérivées

$$\begin{aligned} \dot{V} &= \frac{d}{d\lambda} \left(\frac{N}{D} \right), \\ \ddot{V} &= \frac{d^2}{d\lambda^2} \left(\frac{N}{D} \right). \end{aligned} \quad (5.29)$$

Finalement, nous obtenons l'algorithme suivant. Etant donné l'ensemble de noeuds τ ,

Pour i de 5 à n faire

- Construire les matrices H , B , R en utilisant respectivement (5.19), (5.22), (5.21)
- Calculer λ en minimisant (5.24),
- Calculer le vecteur de coefficients $\alpha = (5\lambda RB + B)^{-1}$,
- Calculer la dérivée en utilisant (5.11),

Fin Pour

Revenons à notre exemple. L'état mesuré est simulé à partir du signal \bar{y} , celui-ci étant calculé à partir de la valeur des paramètres $\theta = (0.011, 1, 0.1, 0.02)$, et il suit une loi aléatoire de moyenne \bar{y} et de variance $(\sigma\bar{y})^2$. Le coefficient σ est calculé de telle sorte que l'erreur relative soit au

maximum égale à 0.01 (resp. 0.05) avec une erreur de probabilité inférieure à 0.03 : il sera noté σ_1 (resp. σ_2).

Puis en résolvant le problème (5.4) grâce à la factorisation QR de la matrice A et au calcul des dérivées selon MD1 ou MD2, nous avons obtenu une première estimation des paramètres des composantes de γ . Nous avons alors appliqué la méthode des moindres carrés pour obtenir une première estimation θ_{σ_i} de θ (θ_{σ_i} étant le paramètre estimé à partir de l'état mesuré qui a été bruité en utilisant σ_i). Pour améliorer les résultats, nous avons repris l'algorithme de Levenberg-Marquardt avec comme valeur initiale θ_{σ_i} . Nous avons alors obtenu les résultats suivants :

- **MD1** : La première estimation des paramètres est égale à $\theta_{\sigma_1} = (0.0833, 0.139, 0.058, 0.027)$ (resp. $\theta_{\sigma_2} = (0.0936, 0.0974, 0.068, 0.0223)$). La figure 5.1 (resp. 5.2) représente les données mesurées (trait plein) et les sorties (trait hachuré).

Puis, la méthode de Levenberg-Marquardt a été appliquée, ce qui a donné comme estimation des paramètres $\theta_{\sigma_1}^{LM} = (0.0106, 1.0776, 0.106, 0.0259)$ (resp. $\theta_{\sigma_2}^{LM} = (0.011, 0.9706, 0.0978, 0.02)$). La figure 5.3 (resp. 5.4) représente les données mesurées (trait plein) et les sorties (trait hachuré).

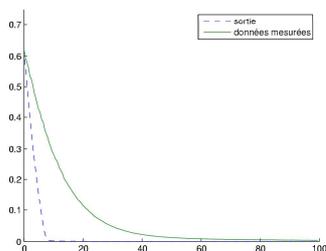


FIG. 5.1 - Système 1, $\theta_{\sigma_1} = (0.0833, 0.139, 0.058, 0.027)$

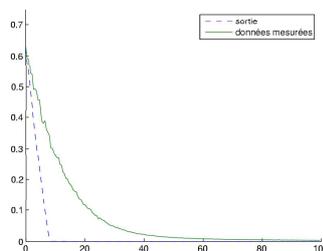


FIG. 5.2 - Système 1, $\theta_{\sigma_2} = (0.0936, 0.0974, 0.068, 0.0223)$

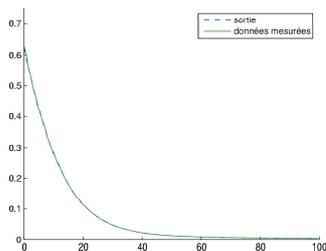


FIG. 5.3 - Système 1, $\theta_{\sigma_1}^{LM} = (0.0106, 1.0776, 0.106, 0.0259)$

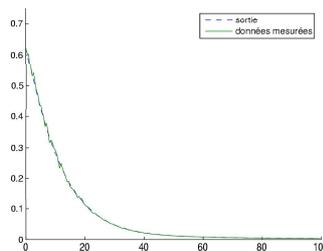


FIG. 5.4 - Système 1, $\theta_{\sigma_2}^{LM} = (0.011, 0.9706, 0.0978, 0.02)$

- **MD2** : La première estimation des paramètres est égale à $\theta_{\sigma_1} = (0.0759, 0.1431, 0.0811, 0.0164)$ (resp. $\theta_{\sigma_2} = (0.0343, 0.1151, 0.0759, 0.0069)$). La figure 5.5 (resp. 5.6) représente les données mesurées (trait plein) et les sorties (trait hachuré).

Puis, la méthode de Levenberg-Marquardt a été appliquée, ce qui a donné comme estimation des paramètres $\theta_{\sigma_1}^{LM} = (0.0109, 1.0271, 0.102, 0.0196)$ (resp. $\theta_{\sigma_2}^{LM} = (0.0106, 1.0535, 0.1044, 0.0196)$). La figure 5.7 (resp. 5.8) représente les données mesurées (trait plein) et les sorties (trait hachuré).

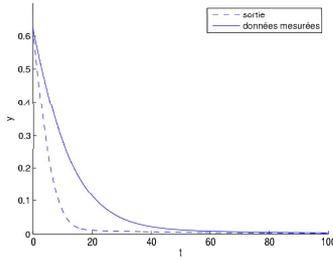


FIG. 5.5 - Système 1, $\theta_{\sigma_1} = (0.0759, 0.1431, 0.0811, 0.0164)$

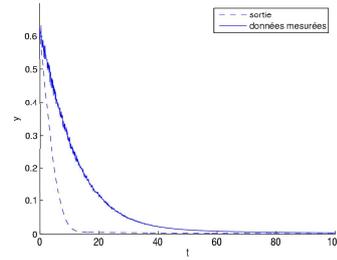


FIG. 5.6 - Système 1, $\theta_{\sigma_2} = (0.0343, 0.1151, 0.0759, 0.0069)$

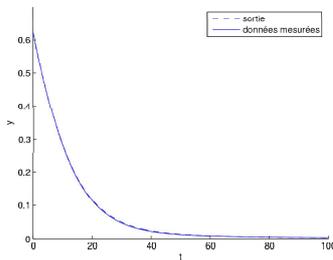


FIG. 5.7 - Système 1, $\theta_{\sigma_1}^{LM} = (0.0109, 1.0271, 0.102, 0.0196)$

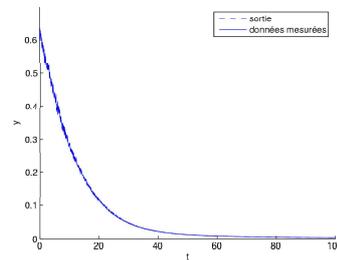


FIG. 5.8 - Système 1, $\theta_{\sigma_2}^{LM} = (0.0106, 1.0535, 0.1044, 0.0196)$

Conclusion : La première estimation des paramètres obtenue grâce aux polynômes entrée-sortie ne permet pas d'avoir une reconstruction des sorties correcte. Toutefois, elle est satisfaisante dans les deux cas puisque, prise comme valeur initiale, l'algorithme de Levenberg-Marquardt converge.

5.2 Identifiabilité et estimation paramétrique du deuxième modèle en pharmacocinétique

L'estimation précédente des paramètres $(\alpha_1, k_c, V_m, \alpha_2)$ est reprise dans le deuxième modèle, et nous supposons observer $y = x_1$. Le deuxième modèle est :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dx_1}{dt} = \alpha_1(x_2 - x_1) - \frac{k_a V_m x_1}{k_c k_a + k_c x_3 + k_a x_1}, \\ \frac{dx_2}{dt} = \alpha_2(x_1 - x_2), \\ \frac{dx_3}{dt} = \beta_1(x_4 - x_3) - \frac{k_c V_m x_3}{k_c k_a + x_3 + k_a x_1}, \\ \frac{dx_4}{dt} = \beta_2(x_3 - x_4), \\ y = x_1, \\ x_1(0) = C_0, \\ x_2(0) = 0, \\ x_3(0) = \gamma C_0, \\ x_4(0) = 0, \end{array} \right.$$

46 Chapitre 5. Identifiabilité et estimation paramétrique de 2 modèles en pharmacocinétique représentés par des équations différentielles non linéaires

On suppose qu le système à l'état initial est connu, soit $C_0 = 10/16$. Les paramètres à identifier portent alors sur le transporteur et sont $\theta = \{\beta_1, \beta_2, k_a, \gamma\}$.

Le logiciel de C.Noiret, décrit dans la partie 3.4 a été utilisé pour étudier l'identifiabilité des paramètres $(\beta_1, \beta_2, k_a, \gamma)$.

Le système initial n'a pas permis de conclure quant à l'identifiabilité des paramètres. En effet, le polynôme entrée-sortie calculé faisait plus d'une page et le calcul de la présentation caractéristique n'a pas abouti du à la complexité croissante des calculs qui a saturé la mémoire. Nous devons alors fournir plus d'information au logiciel. Tout d'abord, l'état x_2 peut être considéré comme une nouvelle variable observée. En effet, la deuxième équation ainsi que la condition initiale $x_2(0) = 0$ constitue une équation différentielle avec condition initiale. Elle admet donc une unique solution que l'on peut calculer directement et qui ne dépendra que de l'observation y . Ainsi, l'état x_2 a été considéré comme une variable observé. De plus, de la première équation du système

$$\dot{x}_1 = \alpha_1(x_2 - x_1) - \frac{k_a V_m x_1}{k_c k_a + k_c x_3 + k_a x_1}, \quad (5.30)$$

on tire l'expression de $\frac{x_3}{k_a}$ qui vaut

$$\frac{x_3}{k_a} = \frac{\alpha_1(k_c + y)(x_2 - y) - V_m y - k_c \dot{y} - y \dot{y}}{\dot{y} k_c + \alpha_1 k_c + (x_2 - y)}. \quad (5.31)$$

et qui peut-être considéré comme connu. Ainsi, la quantité $\frac{\frac{x_3}{k_a}}{1 + \frac{x_3}{k_a} + \frac{x_1}{k_c}}$ qui intervient dans le second membre de la troisième équation est bien déterminée. L'algorithme peut alors être appliqué au modèle avec $y = (x_1, x_2, \frac{x_3}{1 + \frac{x_3}{k_a} + \frac{x_1}{k_c}}, \frac{x_3}{k_a})$ et $\theta = (\beta_1, \beta_2, k_a)$.

1. Le logiciel récrit le système comme le système différentiel suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{x}_1(k_c k_a + k_c x_3 + k_a x_1) - \alpha_1(x_2 - x_1)(k_c k_a + k_c x_3 + k_a x_1) + k_a V_m x_1 = 0, \\ \dot{x}_2 - \alpha_2(x_1 - x_2) = 0 \\ \dot{x}_3(k_c k_a + k_c x_3 + k_a x_1) - \beta_1(x_4 - x_3)(k_c k_a + k_c x_3 + k_a x_1) + k_c V_m x_3 = 0, \\ \dot{x}_4 - \beta_2(x_3 - x_4) = 0, \\ y_1 - x_1 = 0, \\ y_2 - x_2 = 0, \\ y_3(k_c k_a + k_c x_3 + k_a x_1) - k_c x_3 = 0, \\ k_a y_4 - x_3 = 0, \\ k_c k_a + k_c x_3 + k_a x_1 \neq 0, \\ \dot{\beta}_1 = 0, \dot{\beta}_2 = 0, \dot{k}_a = 0. \end{array} \right.$$

2. Il retourne la présentation caractéristique suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \ddot{y}_4 y_4^2 k_c k_a + \dot{y}_4 y_4^2 k_c (\beta_1 + \beta_2) k_a + y_4^2 y_3 k_c V_m \beta_2 - (y_3^3 y_4 - y_3^2 y_4 + y_3^3) V_m^2 \\ - (-y_3 y_4 \dot{y}_4) k_c V_m - (y_3^2 y_4^2 - y_3 y_4^2 + \frac{y_2}{k_c} y_3^2 y_4 + y_3^2 y_4) \alpha_1 k_c V_m, \\ (\dot{y}_3 y_4^2 - y_3 y_4 \dot{y}_4) k_c + (y_3^3 y_4 - y_3^2 y_4 + y_3^3) V_m \\ + (\frac{y_2}{k_c} y_3^2 y_4 + y_3^2 y_4 + y_3^2 y_4^2 - y_3 y_4^2) \alpha_1 k_c, \\ y_1 y_3 + (y_3 + y_3 y_4 - y_4) k_c, \\ \dot{y}_2 y_3 + y_2 y_3 \alpha_2 + (y_3 - y_3 y_4 + y_4) \alpha_2 k_c. \end{array} \right.$$

Seul le premier polynôme contient les paramètres à identifier. Les autres correspondent à des relations connues entre les sorties introduites de façon artificielle pour simplifier le

calcul de la présentation caractéristique. Ainsi, la troisième équation $y_1 y_3 + (y_3 + y_3 y_4 - y_4) k_c$ vient de l'introduction des sorties $y_3 = \frac{\frac{x_3}{k_a}}{1 + \frac{x_3}{k_a} + \frac{x_1}{k_c}}$ et $y_4 = \frac{x_3}{k_a}$.

3. Le paramètre k_a doit être non nul, donc l'ensemble admissible des paramètres à identifier est restreint à $\Omega_q = \{\theta \in \mathbb{R}^3, k_a \neq 0.\}$
4. Le logiciel donne le résumé exhaustif suivant :

$$\{k_a, \beta_2, k_a(\beta_1 + \beta_2)\}. \quad (5.32)$$

5. L'analyse du résumé exhaustif conduit à :

$$\{k_a = \bar{k}_a, \beta_1 = \bar{\beta}_1, \beta_2 = \bar{\beta}_2\}. \quad (5.33)$$

6. Le logiciel vérifie alors que $\{\ddot{y}_4, \dot{y}_4, y_3\}$ n'est pas dans I_θ^0 , l'idéal obtenu après élimination des variables d'état..

Ainsi, le deuxième modèle est, sans avoir considéré les conditions initiales, globalement identifiable dans Ω_q ou structurellement identifiable sur \mathbb{R}^3 . En ce qui concerne le paramètre γ , il suffit de reprendre la première équation en $t = 0$, d'où :

$$\frac{\gamma}{k_a} = - \left(\frac{1}{C_0} + \frac{1}{k_c} \right) - \frac{V_m}{y'(0) + \alpha_1 C_0}. \quad (5.34)$$

Pour estimer numériquement les paramètres, nous allons reprendre les deux premiers polynômes de la présentation caractéristique que nous allons simplifier. Tout d'abord, de la deuxième équation, nous avons :

$$(y_3^3 y_4 - y_3^2 y_4 + y_3^3) V_m + \left(\frac{y_2}{k_c} y_3^2 y_4 + y_3^2 y_4^2 - y_3 y_4^2 \right) \alpha_1 k_c = -(\dot{y}_3 y_4^2 - y_3 y_4 \dot{y}_4) k_c \quad (5.35)$$

qui, substitué dans la première équation et après simplification donne le polynôme entrée-sortie :

$$\begin{aligned} P(y, \theta) &= \ddot{y}_4 + (\beta_1 + \beta_2) \dot{y}_4 + \frac{\beta_2 V_m}{k_a} y_3 + \frac{V_m}{k_a} \dot{y}_3, \\ &= 0 \quad . \end{aligned} \quad (5.36)$$

Comme précédemment, nous allons démontrer qu'il est possible de trouver une première estimation des paramètres grâce au polynôme entrée-sortie. Celle-ci sera alors utilisable comme point de départ de méthodes locales d'optimisation.

Pour diminuer l'ordre des dérivées dans le polynôme entrée-sortie et ainsi espérer diminuer l'erreur sur l'estimation des paramètres, nous avons intégré une fois (5.36), ce qui donne le polynôme :

$$\begin{aligned} P_{int}(y, \theta) &= \dot{y}_4(t) - \dot{y}_4(t_0) + (\beta_1 + \beta_2)(y_4(t) - y_4(t_0)) \\ &+ \frac{\beta_2 V_m}{k_a} \int_{t_0}^t y_3(u) du + \frac{V_m}{k_a} (y_3(t) - y_3(t_0)) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (5.37)$$

L'équation (5.37) peut se récrire sous la forme d'un système linéaire $A\Theta = b$, où

$$\begin{aligned} A_{k,1} &= y_4(t_k) - y_4(t_0), \\ A_{k,2} &= \int_{t_0}^{t_k} y_3(u) du, \\ A_{k,3} &= y_3(t_k) - y_3(t_0), \\ \Theta &= \left(\beta_1 + \beta_2, \frac{\beta_2 V_m}{k_a}, \frac{V_m}{k_a} \right)^\top, \\ b_k &= -(\dot{y}_4(t_k) - \dot{y}_4(t_0))_{j=1, \dots, N}. \end{aligned} \quad (5.38)$$

Résoudre (5.37) revient à résoudre le problème :

$$\min_{\Theta} J(\Theta) = \min_{\Theta} \| A\Theta - b \|^2. \quad (5.39)$$

L'état mesuré est simulé à partir du signal \bar{y} , calculé à partir de la valeur des paramètres $\theta = (\beta_1, \beta_2, k_a, \gamma) = (0.01, 0.02, 0.5, 50)$ et il suit une loi aléatoire de moyenne \bar{y} et de variance $(\sigma\bar{y})^2$. Le coefficient σ est calculé de telle sorte que l'erreur relative soit inférieure à 0.01 (resp. 0.05) avec une erreur de probabilité de moins de 0.03 : il sera noté σ_1 (resp. σ_2). L'ensemble des valeurs admissibles pour θ étant alors R_+^4 .

Comme dans le cas précédent, le problème de minimisation (5.39) est résolu par la méthode QR selon les deux cas de calcul des dérivées MD1 ou MD2 (par MD1, nous avons désigné une méthode d'interpolation polynômiale qui consistait à approcher chaque y_i par l'évaluation en t_i d'un polynôme de degré 3 et par MD2 une méthode de régularisation basée sur l'utilisation des B-splines). Nous avons obtenu alors une première estimation des trois composantes de Θ . Puis, nous avons appliqué la méthode des moindres carrés pour effectuer une première estimation de β_1, β_2, k_a . Le dernier paramètre γ a été calculé à partir de la relation (5.34). Notons que son expression dépend de la dérivée de y en 0 qu'il est donc important d'estimer au mieux. Nous avons alors obtenu les résultats suivants :

- **MD1** : nous avons obtenu la première estimation $\theta_{\sigma_1} = (\beta_1, \beta_2, k_a, \gamma) = (-0.0298, 0.00047, 0.003, 0.005)$. La valeur des paramètres trouvée est loin des vraies valeurs. En effet, le conditionnement de A , de l'ordre de 1000 est très mauvais et induit une erreur déjà très importante sur les paramètres (β_1, β_2, k_a) . De plus, γ , estimé à partir de la relation (5.34) dépend de l'estimation de k_a et de la dérivée de l'observation en 0. Or, il est bien connu qu'il est difficile d'avoir de bons résultats à partir de conditions initiales, surtout quand les données sont bruitées. Cette accumulation d'erreur fait que le paramètre γ est mal évalué. Toutefois, nous allons utiliser cette première estimation pour utiliser des méthodes locales.

Pour prendre en compte la relation (5.34) ainsi que le caractère positif des paramètres, nous avons utilisé la méthode de pénalité intérieure qui consiste en la résolution du problème suivant :

$$\begin{aligned} \min_{\theta} J_2(\theta) &= \min_{\theta} (\| A\theta + b \|^2 + \| \frac{\gamma}{k_a} + \left(\frac{1}{C_0} + \frac{1}{k_c} \right) + \frac{V_m}{y'(0) + \alpha_1 C_0} \|^2 \\ &+ \epsilon \sum_{i=1, \dots, 4} \frac{1}{(\theta_i^+)^2}). \end{aligned}$$

où $\theta = (\theta_i)_{i=1, \dots, 4} = (\beta_1, \beta_2, k_a, \gamma)$, $\theta_i^+ = \max(\theta_i, 0)$ et ϵ est une constante fixée.

Ce qui nous a permis d'obtenir $(\beta_1, \beta_2, k_a, \gamma) = (0.03, 0.03, 0.2, 17.3)$. La figure FIG. 5.9 représente les données mesurées (trait plein) et les sorties (trait hachuré).

En appliquant l'algorithme de Levenberg-Marquardt, nous avons trouvé $\theta_{\sigma_1}^{LM} = (\beta_1, \beta_2, k_a, \gamma) = (0.007, 0.07, 0.2, 50.4)$. La courbe obtenue à partir de ces valeurs est représentée à la figure FIG. 5.10 (trait hachuré) ainsi que les sorties (trait plein).

θ_{σ_2} ayant toutes ses composantes négatives, nous n'avons pas cherché à aller plus loin dans notre démarche.

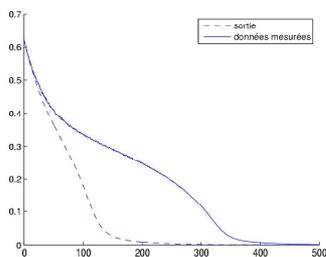


FIG. 5.9 – Système 2 : $\theta_{\sigma_1} = (0.03, 0.03, 0.2, 17.3)$

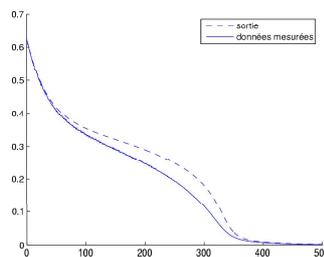


FIG. 5.10 – Système 2 : $\theta_{\sigma_1}^{LM} = (\beta_1, \beta_2, k_a, \gamma) = (0.007, 0.07, 0.2, 50.4)$

- **MD2** : L'expression de γ dépend de $\dot{y}(0)$ que nous avons cherché à déterminer à partir des B-splines. Pour cela, il faut déterminer t_{-3}, t_{-2}, t_{-1} ainsi que $y(t_{-3}), y(t_{-2}), y(t_{-1})$ puisque :

$$y(t) = \sum_{j=-3}^0 \alpha_j B_{j,4}(t), \text{ pour } 0 = t_0 \leq t < t_1. \quad (5.40)$$

Etant donné la forme de la courbe, nous avons supposé que la courbe était symétrique par rapport au point $A(0, y(0))$. Nous avons donc introduit les trois points de coordonnées $(-t_3, -y(t_3) + 2y(t_0)), (-t_2, -y(t_2) + 2y(t_0)), (-t_1, -y(t_1) + 2y(t_0))$, ce qui nous a permis d'utiliser (5.23) pour calculer les coefficients (α_j) de (5.40). Puis, nous avons repris (5.11). Nous avons trouvé $\theta_{\sigma_1} = (\beta_1, \beta_2, k_a, \gamma) = (0.0244, 0.0263, 0.7, 22.736)$ (resp. $\theta_{\sigma_2} = (0.017, 0.011, 0.3, 0.9641)$) et les courbes obtenues à partir de ces premières estimations sont représentées sur la figure 5.11 (resp. 5.12) (en pointillé) ainsi que les courbes obtenues à partir des vraies valeurs (en trait continu).

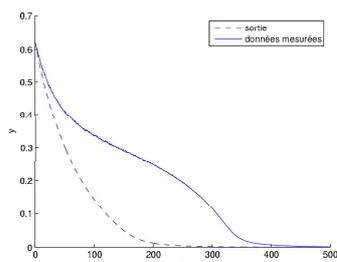


FIG. 5.11 – Système 2, $\theta_{\sigma_1} = (0.0244, 0.0263, 0.7, 22.736)$

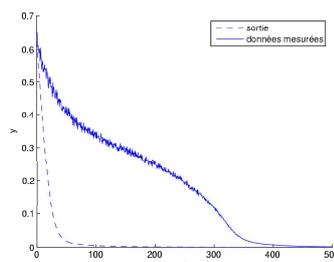


FIG. 5.12 – Système 2, $\theta_{\sigma_2} = (0.017, 0.011, 0.3, 0.9641)$

Remarquons que la valeur de γ est moins mauvaise que précédemment, du moins pour σ_1 . Nous avons remarqué numériquement que cette différence provenait du calcul de la dérivée en 0 qui avait été amélioré par l'utilisation de la méthode de régularisation. En fait, l'erreur semble provenir surtout de celle de k_a .

Ces estimations sont reprises comme valeurs de départ dans l'algorithme de Levenberg-Marquardt. Nous avons trouvé $\theta_{\sigma_1}^{LM} = (\beta_1, \beta_2, k_a, \gamma) = (0.028, 0.03, 0.29, 49.67)$ (resp. $\theta_{\sigma_2}^{LM} = (0.0374, 0.0328, 0.2711, 49.66)$). Les courbes obtenues à partir de ces estimations et des vraies valeurs sont représentées sur la figure 5.13 (resp. 5.14).

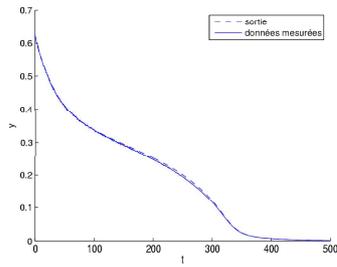


FIG. 5.13 – Système 2, $\theta_{\sigma_1}^{LM} = (0.028, 0.03, 0.29, 49.67)$

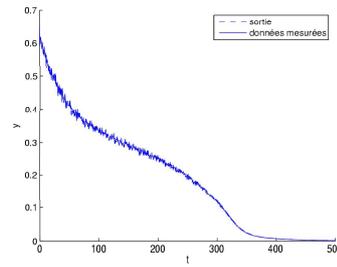


FIG. 5.14 – Système 2, $\theta_{\sigma_2}^{LM} = (0.0374, 0.0328, 0.2711, 49.66)$

Conclusion : Dans cet exemple, il a été important de trouver une méthode permettant de calculer de façon efficace les dérivées. La méthode de régularisation proposée par Ibrir et Diop a montré son efficacité. En effet, quand la variance était égale à $(\sigma_1 \bar{y})^2$, les résultats avaient été améliorés. De plus, il a permis d'obtenir des résultats dans le cas où la variance était égale à $(\sigma_2 \bar{y})^2$.

Chapitre 6

Identifiabilités du modèle de pollution

Rappelons le modèle que nous allons identifier et les étapes qui nous y ont conduit. Tout d'abord, nous avons considéré le système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t}(t, \cdot) + V \frac{\partial u}{\partial x}(t, \cdot) - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, \cdot) + Ru(t, \cdot) = \lambda(t) \delta(\cdot - a) \text{ dans } [0, T] \times]0, L[, \\ u(0, x) = g(x) \text{ dans }]0, L[, \\ u(t, 0) = 0, \\ \frac{\partial u}{\partial x}(t, L) = 0, \end{array} \right. \quad (6.1)$$

où u , V , D , R désignent respectivement la concentration de la substance étudiée, la vitesse de transport, le coefficient de diffusion (dispersion), le terme de réaction supposé de premier ordre. Le membre de droite représente l'origine de la source de pollution, a désigne la position de la source possible de pollution, λ le débit correspondant.

La masse de Dirac a alors été approchée par la fonction gaussienne

$$w(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} e^{-\frac{(x-a)^2}{\sigma^2}}. \quad (6.2)$$

Ce qui a conduit au système

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t}(t, \cdot) + V \frac{\partial u}{\partial x}(t, \cdot) - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, \cdot) + Ru(t, \cdot) = f(t, \cdot) \text{ dans } [0, T] \times]0, L[, \\ u(0, x) = g(x) \text{ dans }]0, L[, \\ u(t, 0) = 0, \\ \frac{\partial u}{\partial x}(t, L) = 0, \end{array} \right. \quad (6.3)$$

où $f(t, x) = \frac{\lambda(t)}{\sigma\sqrt{\pi}} e^{-\frac{(x-a)^2}{\sigma^2}}$. Ce système a ensuite été discrétisé par un schéma aux différences finies en espace, dont nous avons négligé les termes d'ordre plus grand que deux, d'où l'approximation v_h de u_h et le problème discret dont nous traiterons l'identifiabilité à l'aide de l'algèbre différentielle :

$$\left\{ \begin{array}{l} v_h'(t, \theta) = A_h v_h(t, \theta) + b_h(t, \theta), \text{ pour tout } t \in [0, T], \\ v_h(0, \theta) = g_h, \end{array} \right. \quad (6.4)$$

où $\theta = (l, Q)$,

$$A_h = \begin{pmatrix} \beta & \gamma & 0 & \dots & 0 \\ \alpha & \beta & \gamma & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \alpha & \beta & \gamma \\ 0 & \dots & 0 & \alpha' & \beta \end{pmatrix}, b_h(t, \theta) = \begin{pmatrix} k_1 l Q \\ \vdots \\ k_N l Q^N \end{pmatrix}, g_h = \begin{pmatrix} g(x_1) \\ \vdots \\ g(x_N) \end{pmatrix}. \quad (6.5)$$

Dans la suite, pour simplifier les notations, nous noterons $v(t)$ la solution du système (6.4) au lieu de $v_h(t, \theta)$.

Dans ce chapitre, nous étudierons tout d'abord l'identifiabilité du système continu (6.1) quand le débit est constant et la stabilité de la méthode, c'est à dire si de faibles variations des paramètres à identifier, soient λ et a , conduisent à de faibles perturbations des mesures. Le cas où le débit est une fonction du temps a été étudié dans [2]. Nous rappellerons les résultats dans la section 6.1.2. Même si le système continu est identifiable, il est difficilement utilisable dans la pratique. En effet, nous verrons dans la section 6.1.3 que la simple résolution directe du problème pose déjà d'importants problèmes numériques. Nous justifierons alors l'approximation de la masse de Dirac par la fonction gaussienne (6.2) en étudiant l'erreur entre les solutions des systèmes (6.1) et (6.3). Nous traiterons ensuite l'identifiabilité du modèle (6.4) en (λ, a) en distinguant deux cas : celui où le débit est constant et celui où il dépend du temps. Nous verrons alors que considérer les conditions initiales permet de diminuer le nombre de points d'observation.

6.1 Identifiabilité du modèle continu

6.1.1 Cas où le débit est constant

Pour démontrer l'identifiabilité du système continu, nous avons besoin du résultat suivant sur la régularité de la solution.

Théorème 5 Soit $\mathcal{V} := \{v \in H^1(0, L) / v(0) = 0\}$. Posons \mathcal{V}' le dual de \mathcal{V} . Alors :

- (i) il existe une fonction $u \in C^1([0, T]; \mathcal{V}') \cap C([0, T]; \mathcal{V})$ solution du problème (6.1),
- (ii) elle est unique dans $C([0, T]; L^2(0, L)) \cap L^2(0, T; H^1(0, L))$.

Démonstration : L'unicité de la solution a été démontrée dans [2].

Démontrons (i). Pour cela, nous allons travailler avec le système (6.6) qui a été obtenu à partir de (6.1) en posant $\tilde{u}(t, x) = e^{\nu x} u(t, x)$ avec $\nu = -\frac{V}{2D}$, d'où :

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t}(t, x) - D \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2}(t, x) + \rho \tilde{u}(t, x) = \tilde{f}(t, x) \text{ dans }]0, T[\times]0, L[, \\ \tilde{u}(0, x) = \tilde{g}(x) \text{ dans }]0, L[\\ \tilde{u}(t, 0) = 0, \\ \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x}(t, L) - \nu \tilde{u}(t, L) = 0, t \in]0, T[\end{cases} \quad (6.6)$$

où $\tilde{f}(t, x) = e^{\nu x} \lambda \delta(x - a)$, $\tilde{g}(x) = e^{\nu x} g(x)$ et $\rho = \nu^2 D + R$.

Notons tout d'abord que \mathcal{V} est un espace de Hilbert pour la norme de $H^1(0, L)$.

Considérons alors l'application

$$A : \begin{array}{l} \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}' \\ v \mapsto Av \end{array} \quad (6.7)$$

telle que pour tout $w \in \mathcal{V}$, on ait :

$$(Av, w) = D \int_0^L \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial x} dx + \rho \int_0^L v w dx + \frac{V}{2} v(L)w(L).$$

Pour prouver (i), nous allons reprendre le théorème VII de [10] qui est rappelé dans l'annexe B, théorème 13. Nous allons donc démontrer que le domaine de définition \mathcal{V} de A est dense dans \mathcal{V}' et $\forall \lambda > 0$, $I + \lambda A$ est bijectif de \mathcal{V} sur \mathcal{V}' avec $\| (I + \lambda A)^{-1} \| \leq 1$. En fait, il est suffisant de prouver que l'opérateur A est un opérateur linéaire, maximal monotone, d'après la proposition 13 de l'annexe B, soit

- a) $\forall v \in \mathcal{V} (Av, v) \geq 0$,
- b) $\forall h \in \mathcal{V}', \exists u \in \mathcal{V}$ tel que $u + Au = h$ dans \mathcal{V}' .

On vérifie facilement que $(Av, v) \geq 0$ pour tout $v \in \mathcal{V}$, donc a) est vrai. Il reste à prouver b). Pour cela, il suffit de vérifier :

$$\forall h \in \mathcal{V}', \exists u \in \mathcal{V}, \forall v \in \mathcal{V}, (u + Au, v) = \langle h, v \rangle. \quad (6.8)$$

En effet, si (6.8) est vérifié, on aurait en particulier ($D(]0, L[) \subset \mathcal{V}$) :

$$\forall h \in \mathcal{V}', \exists u \in \mathcal{V}, \forall v \in D(]0, L[), (u + Au, v) = \langle h, v \rangle. \quad (6.9)$$

En conséquence, u vérifierait :

$$u + Au = h \text{ dans } D'(]0, L[). \quad (6.10)$$

Mais comme u appartient à \mathcal{V} donc à \mathcal{V}' et $Au, h \in \mathcal{V}'$, on en déduit que $u + Au = h$ est vrai dans \mathcal{V}' .

Démontrons (6.8) en utilisant le lemme de Lax-Milgram. Soit $h \in \mathcal{V}'$ donné et

$$\tilde{a}(u, v) := \int_0^L ((1 + \rho)uv + D \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x}) dx + \frac{V}{2} u(L)v(L).$$

Tout d'abord, \tilde{a} est clairement bilinéaire. De plus, en utilisant successivement les propriétés sur les intégrales et Cauchy-Schwartz dans $L^2(0, L)$, les inégalités suivantes sont obtenues pour tout $(u, v) \in \mathcal{V} \times \mathcal{V}$:

$$\begin{aligned} |\tilde{a}(u, v)| &\leq (1 + \rho) \int_0^L |u(x)v(x)| dx + D \int_0^L \left| \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} \right| dx + \frac{V}{2} |u(L)v(L)| \\ &\leq (1 + \rho) \|u\|_2 \|v\|_2 + D \left\| \frac{\partial u}{\partial x} \right\|_2 \left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_2 + \frac{V}{2} |u(L)v(L)|. \end{aligned} \quad (6.11)$$

Or, comme u et v sont dans \mathcal{V} , on peut écrire :

$$|u(L)v(L)|^2 = |u(L) - u(0)|^2 |v(L) - v(0)|^2 = \left(\int_0^L \frac{\partial u}{\partial x} dx \right)^2 \left(\int_0^L \frac{\partial v}{\partial x} dx \right)^2$$

et en vertu du théorème de Cauchy-Schwartz, il vient

$$\begin{aligned} |u(L)v(L)|^2 &\leq L^2 \int_0^L \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right|^2 dx \int_0^L \left| \frac{\partial v}{\partial x} \right|^2 dx \\ &\leq L^2 \|u\|_{H^1(\Omega)}^2 \|v\|_{H^1(\Omega)}^2. \end{aligned} \quad (6.12)$$

On obtient alors la majoration :

$$|\tilde{a}(u, v)| \leq \max(1 + \rho, D, \frac{LV}{2}) \|u\|_{H^1(\Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega)}. \quad (6.13)$$

Ainsi, l'application $\tilde{a}(\cdot, \cdot) : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R}$ est continue. La \mathcal{V} -ellipticité est immédiatement vérifiée car pour tout $v \in \mathcal{V}$,

$$\tilde{a}(v, v) \geq (1 + \rho) \int_0^L |v|^2 dx + D \int_0^L \left| \frac{\partial v}{\partial x} \right|^2 dx \geq \min(D, 1 + \rho) \|v\|_{H^1(\Omega)}.$$

Reste à vérifier que l'application linéaire H définie par :

$$H : \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R} : v \mapsto \langle h, v \rangle$$

est continue. D'après le théorème de représentation de Riesz-Fréchet, comme $h \in \mathcal{V}'$, il existe un unique $h_0 \in \mathcal{V}$ tel que $\langle h, v \rangle = (h_0, v)$ pour tout $v \in \mathcal{V}$. Aussi, on obtient la majoration suivante :

$$\forall v \in \mathcal{V}, |H(v)| = |\langle h, v \rangle_{\mathcal{V}', \mathcal{V}}| = |(h_0, v)_{\mathcal{V}, \mathcal{V}}| \leq \|h_0\|_2 \|v\|_{H^1(\Omega)}. \quad (6.14)$$

Les hypothèses de Lax-Milgram étant vérifiées, on en déduit l'existence d'une solution $u \in \mathcal{V}$ du problème (6.8).

Comme l'opérateur A est monotone maximal, on a que pour tout $u_0 \in \mathcal{V}$ et $h \in C^1([0, T], \mathcal{V}')$, il existe une solution $u \in C^1([0, T]; \mathcal{V}') \cap C([0, T]; \mathcal{V})$ du problème (6.6). ■

Le théorème suivant va nous permettre de conclure quant à l'identifiabilité des paramètres.

Théorème 6 Soit le système suivant :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, \cdot) + V \frac{\partial u}{\partial x}(t, \cdot) - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, \cdot) + Ru(t, \cdot) = \lambda \delta(\cdot - a) \text{ dans } [0, T] \times]0, L[, \quad (6.15)$$

$$\begin{aligned} u(0, x) &= g(x) \text{ dans } \Omega \\ u(t, 0) &= 0, \\ \frac{\partial u}{\partial x}(t, L) &= 0, \end{aligned} \quad (6.16)$$

où λ est constant. Alors, si on observe $u(t, L)$ pour tout $t \in]0, T[$, λ et a sont identifiables.

Démonstration : Remarquons tout d'abord que pour identifier λ et a , il suffit d'identifier le produit $\lambda \delta(\cdot - a)$. En effet, supposons que :

$$\text{pour presque tout } x \in \Omega, \lambda_1 \delta(\cdot - a_1) = \lambda_2 \delta(\cdot - a_2) \text{ dans } D'(0, L).$$

Comme $\delta(\cdot - a_1)$ et $\delta(\cdot - a_2)$ sont linéairement indépendants dans $D'(0, L)$ si $a_1 \neq a_2$, on a soit $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$ ce qui est impossible, soit $a_1 = a_2$ et donc $\lambda_1 = \lambda_2$.

Ensuite, l'équation (6.15) prise en $t = 0$ et la condition initiale $u(0, x) = g(x)$ donnent :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(0, x) + Vg'(x) - Dg''(x) + Rg(x) = \lambda \delta(x - a). \quad (6.17)$$

Aussi, identifier $\lambda \delta_a$ revient à identifier $\frac{\partial u}{\partial t}(0, x)$.

Considérons la fonction $\phi : P = (\lambda, a) \mapsto u(P)(\cdot, L)$ où $u(P)(\cdot, L)$ correspond à la solution dépendant des paramètres (λ, a) . Montrer l'identifiabilité revient à montrer l'injectivité de la fonction ϕ , soit l'implication suivante :

$$u(P_1)(\cdot, L) = u(P_2)(\cdot, L) \Rightarrow P_1 = P_2, \quad (6.18)$$

où $P_1 = (\lambda_1, a_1)$ et $P_2 = (\lambda_2, a_2)$. Et si $v = u(P_1) - u(P_2)$, cela revient à prouver l'implication

$$v(\cdot, L) = 0 \Rightarrow P_1 = P_2, \quad (6.19)$$

qui est, d'après ce qui précède, équivalent à montrer

$$v(\cdot, L) = 0 \Rightarrow \frac{\partial v}{\partial t}(0, x) = 0. \quad (6.20)$$

Supposons alors que l'on ait $v(t, L) = 0$ pour tout $t \in]0, T[$. De la définition de v , on déduit de (6.15) l'équation :

$$\frac{\partial v}{\partial t}(t, x) + V \frac{\partial v}{\partial x}(t, x) - D \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}(t, x) + Rv(t, x) = \lambda_1 \delta(x - a_1) e^{\alpha x} - \lambda_2 \delta(x - a_2) e^{\alpha x} \text{ dans }]0, T[\times]0, L[\quad (6.21)$$

De plus, on a $\frac{\partial v}{\partial t}(t, L) = 0$.

Dérivons (6.21) par rapport à t au sens des distributions. Ceci est possible car d'après le théorème précédent $v \in C^1([0, T]; \mathcal{V}') \cap C([0, T]; \mathcal{V})$. Ce qui nous donne :

$$\frac{\partial^2 v}{\partial t^2}(t, \cdot) + V \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial t} - D \frac{\partial^3 v}{\partial x^2 \partial t}(t, \cdot) + R \frac{\partial v}{\partial t}(t, \cdot) = 0. \quad (6.22)$$

En posant $z = \frac{\partial v}{\partial t}$, l'équation précédente et la condition $\frac{\partial v}{\partial t}(t, L) = 0$ se récrivent :

$$\begin{cases} \frac{\partial z}{\partial t}(t, \cdot) + V \frac{\partial z}{\partial x} - D \frac{\partial^2 z}{\partial x^2}(t, \cdot) + Rz(t, \cdot) = 0, \\ z(t, L) = 0. \end{cases} \quad (6.23)$$

Remarquons que $t \mapsto z(t, L)$ est nulle et analytique sur $]0, T[$ donc identiquement nulle sur $]0, +\infty[$. De plus, z s'exprime dans la base de vecteurs propres $(w_n)_n$ définie par le problème : *trouver les valeurs μ pour lesquelles il existe une fonction $w :]0, L[\rightarrow \mathbb{R}$ non identiquement nulle vérifiant*

$$-Dw''(x) + \rho w(x) = \mu w(x), \quad x \in [0, L] \quad (6.24)$$

$$w(0) = 0, \quad (6.25)$$

$$w'(L) - \nu w(L) = 0, \quad (6.26)$$

la justification est donnée dans l'annexe B.2. $z(t, x)$ s'écrit :

$$z(t, x) = \sum_{n=1}^{+\infty} \langle z(0, \cdot), w_n \rangle_{\mathcal{V}', \mathcal{V}} w_n(x) e^{-\mu_n t} \quad (6.27)$$

De $z(t, L) = 0$ et après avoir factorisé par $e^{-\mu_1 t}$ dans l'expression de $z(t, L)$, il vient que :

$$\langle z(0, \cdot), w_1 \rangle_{\mathcal{V}', \mathcal{V}} w_1(L) + \sum_{n=2}^{+\infty} \langle z(0, \cdot), w_n \rangle_{\mathcal{V}', \mathcal{V}} w_n(L) e^{-(\mu_n - \mu_1)t} = 0. \quad (6.28)$$

Cette série converge uniformément pour $t > \tau$ avec $\tau > 0$ car $\mu_n > \mu_{n-1}$ pour tout $n > 1$ et $\lim_{n \rightarrow +\infty} \mu_n = +\infty$. Ainsi, nous pouvons échanger la somme et la limite quand $t \rightarrow +\infty$. Le second terme de (6.28) converge alors vers 0. Il reste :

$$\langle z(0, \cdot), w_1 \rangle_{L^2} w_1(L) = 0 \quad (6.29)$$

Comme $w_1(L) \neq 0$, le premier terme de la série est nul. En itérant le procédé, il vient que tous les coefficients de la série sont nuls. Ainsi, l'égalité $\langle z(0, \cdot), w_n \rangle$ pour tout $n \geq 0$ conduit à $z(0, \cdot) = 0$. ■

La question qui se pose maintenant est de connaître la stabilité de la méthode, c'est à dire la dépendance continue de la source $\lambda\delta(a - \cdot)$ par rapport aux mesures ou en d'autres termes si de faibles variations de λ et a conduisent à de faibles variations des mesures. Nous allons, pour cela prouver un résultat de stabilité lipschitzienne locale.

Jusqu'à la fin de ce paragraphe, nous noterons $u(t, x, F, g)$ les concentrations de D.B.O calculées à partir de la source F avec pour condition initiale g .

Supposons avoir $(\lambda, a), (\mu, c) \in \mathbb{R}^+ \times [0, L]$, alors pour k suffisamment petit,

$$(\lambda + k\mu, a + kc) \in \mathbb{R}^+ \times [0, L]$$

et la source correspondante est égale à

$$F^k(t, x) = (\lambda + k\mu)\delta(x - (a + kc))$$

D'après la formule de Taylor Young à l'ordre 2 appliquée à la masse de Dirac en a , on obtient :

$$\begin{aligned} F^k(t, x) &= (\lambda + k\mu)\delta((x - a) - kc) \\ &= \lambda\delta(x - a) + k(\mu\delta(x - a) - \lambda c\delta'(x - a)) + k^2(-\mu c\delta'(x - a) + \frac{\lambda c^2}{2}\delta''(x - a) + \epsilon(k)). \end{aligned} \quad (6.30)$$

Posons

$$\begin{aligned} F(t, x) &= \lambda\delta(x - a), \\ \hat{F}(t, x) &= \mu\delta(x - a) - \lambda c\delta'(x - a), \\ \tilde{F}(t, x) &= -\mu c\delta'(x - a) + \frac{\lambda c^2}{2}\delta''(x - a) + k\epsilon(k). \end{aligned} \quad (6.31)$$

Alors, les fonctions

$$(t, x) \mapsto \frac{u(t, x, F^k, g) - u(t, x, F, g)}{k}$$

et

$$(t, x) \mapsto u(t, x, \hat{F}, 0) + ku(t, x, \tilde{F}, 0)$$

sont solutions de :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + V \frac{\partial u}{\partial x} + Ru = \hat{F}(t, x) + k\tilde{F}(t, x), \\ u(0, x) = 0. \end{cases} \quad (6.32)$$

Or, nous avons vu (théorème 5) que ce problème admettait une unique solution dans $C([0, T], L^2(0, L)) \cap L^2(0, T; H^1(0, L))$. Donc

$$u(t, x, F^k, g) = u(t, x, F, g) + ku(t, x, \hat{F}, 0) + k^2u(t, x, \tilde{F}, 0).$$

Il vient alors :

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{u(t, L, F^k, g) - u(t, L, F, g)}{k} = u(t, L, \hat{F}, 0). \quad (6.33)$$

Théorème 7 (*Stabilité lipschitzienne locale*). Si $(\mu, c) \neq (0, 0)$ pour $0 < t < T$ alors :

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{u(t, L, F^k, g) - u(t, L, F, g)}{k} \neq 0. \quad (6.34)$$

Démonstration : Supposons que la limite soit nulle. Par définition, $u(t, L, \hat{F}, 0)$ est solution du problème :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, \cdot, \hat{F}, 0) + V \frac{\partial u}{\partial x}(t, \cdot, \hat{F}, 0) - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, \cdot, \hat{F}, 0) + Ru(t, \cdot, \hat{F}, 0) = k\mu\delta(\cdot - a) - \lambda c\delta'(\cdot - a) \quad (6.35)$$

$$\begin{aligned} u(0, x, \hat{F}, 0) &= 0 \text{ dans }]0, L[\\ u(t, 0, \hat{F}, 0) &= 0, \\ \frac{\partial u}{\partial x}(t, L, \hat{F}, 0) &= 0. \end{aligned} \quad (6.36)$$

Nous allons montrer que le terme de droite, $k\mu\delta(\cdot - a) - \lambda c\delta'(\cdot - a)$ est nul et comme les fonctions $\delta(\cdot - a)$ et $\delta'(\cdot - a)$ sont linéairement indépendantes, on en déduira que $(\mu, c) = (0, 0)$, ce qui contredira l'hypothèse que le couple est non nul.

Comme pour la démonstration de l'identifiabilité, il suffit de prouver que $\frac{\partial u}{\partial t}(0, x, \hat{F}, 0) = 0$ puisque en $t = 0$, on a :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(0, x, \hat{F}, 0) = k\mu\delta(\cdot - a) - \lambda c\delta'(\cdot - a).$$

Dérivons (6.35) par rapport au temps et posons $z(t, x) = \frac{\partial u}{\partial t}(t, x, \hat{F}, 0)$, ce qui donne :

$$\frac{\partial z}{\partial t}(t, \cdot) + V \frac{\partial z}{\partial x}(t, \cdot) - D \frac{\partial^2 z}{\partial x^2}(t, \cdot) + Rz(t, \cdot) = 0.$$

De plus, comme $\frac{\partial z}{\partial t}(t, L) = 0$, $z(t, L) = 0$. On retrouve le système (6.23), d'où $z(0, \cdot) = \frac{\partial u}{\partial t}(0, \cdot, \hat{F}) = 0$. ■

6.1.2 Cas où le débit dépend du temps

Ce cas a été traité dans [2]. Il a été prouvé d'une part que le système est identifiable sous la condition d'avoir deux points d'observation encadrant la source de pollution et que la fonction débit s'annule sur un intervalle $[T^*, T]$ et d'autre part, la stabilité lipschitzienne locale.

6.1.3 Pourquoi étudier un système approché ?

La première chose à laquelle tout expérimentateur est confronté lors de la modélisation d'un modèle mathématique est celle de la simulation. Une première idée pour simuler une pollution accidentelle est d'obtenir l'expression de la concentration solution du problème (6.37) suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t, \cdot) + V \frac{\partial u}{\partial x}(t, \cdot) - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, \cdot) + Ru(t, \cdot) = \lambda(t)\delta_a(\cdot) \text{ dans }]0, T[\times]0, L[, \\ u(0, x) = g(x) \text{ dans }]0, L[, \\ u(t, 0) = 0, \\ \frac{\partial u}{\partial x}(t, L) = 0. \end{cases} \quad (6.37)$$

Comme nous l'avons déjà fait dans la première partie du chapitre 6, nous posons $\tilde{u}(t, x) = e^{\nu x}u(t, x)$ avec $\nu = -\frac{V}{2D}$. Le système précédent se réécrit :

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t}(t, x) - D \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2}(t, x) + \rho \tilde{u}(t, x) = \tilde{f}(t, x) \text{ dans }]0, T[\times \Omega, \\ \tilde{u}(0, x) = \tilde{g}(x) \text{ dans } \Omega \\ \tilde{u}(t, 0) = 0, \\ \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x}(t, L) - \nu \tilde{u}(t, L) = 0, t \in]0, T[\end{cases} \quad (6.38)$$

où $\tilde{f}(t, x) = e^{\nu x}\lambda(t)\delta(x-a)$, $\tilde{g}(t, x) = e^{\nu x}g(x)$ et $\rho = \nu^2 D + R$.

Soit $\mathcal{V} := \{v \in H^1(]0, L[) / v(0) = 0\}$, alors (6.38) admet pour formulation variationnelle :

$$\forall v \in \mathcal{V}, \frac{d}{dt}(\tilde{u}(t), v) + \bar{a}(\tilde{u}(t), v) = (\tilde{f}(t, \cdot), v), \quad (6.39)$$

où $\bar{a}(w, v) = (Aw, v) = D \int_0^L \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} dx + \rho \int_0^L wv dx + \frac{V}{2}w(L)v(L)$, $(w, v) \in \mathcal{V} \times \mathcal{V}$.

Nous avons montré au théorème 5 qu'il existait une solution de (6.40) dans $C^1([0, T]; \mathcal{V}') \cap C([0, T]; \mathcal{V})$ et qu'elle était unique dans $C([0, T]; L^2(0, L)) \cap L^2(0, T; H^1(0, L))$.

$$\begin{cases} \forall v \in \mathcal{V}, \frac{d}{dt}(\tilde{u}(t), v) + \bar{a}(\tilde{u}(t), v) = (\tilde{f}(t), v), \\ \tilde{u}(0) = \tilde{g}. \end{cases} \quad (6.40)$$

De plus, nous avons prouvé dans l'annexe B qu'il existait une base de vecteurs propres (w_n) solution du problème spectral :

trouver les valeurs μ pour lesquelles il existe une fonction $w :]0, L[\rightarrow \mathbb{R}$ non identiquement nulle vérifiant

$$-Dw''(x) + \rho w(x) = \mu w(x), x \in [0, L] \quad (6.41)$$

$$w(0) = w'(L) - \nu w(L) = 0, \quad (6.42)$$

et qui formait une base hilbertienne orthonormale de $L^2(0, L)$. L'expression des w_n a également été calculée dans l'annexe B. Or $\tilde{u} \in C([0, T]; L^2(0, L))$, donc pour tout $t \in [0, T]$, $\tilde{u}(t)$ s'écrit :

$$\tilde{u}(t) = \sum_{n \geq 0} (\tilde{u}(t), w_n) w_n.$$

Mais comme $\tilde{u}(t) \in \mathcal{V}$ (presque partout), on a :

$$\bar{a}(\tilde{u}(t), w_n) = \mu_n(\tilde{u}(t), w_n). \quad (6.43)$$

Prenons alors le cas particulier $v = w_n$ dans (6.40). En posant $\alpha_n(t) = (\tilde{u}(t), w_n)$ et en utilisant (6.43), il vient que :

$$\frac{d}{dt}\alpha_n(t) + \mu_n\alpha_n(t) = (\tilde{f}(t), w_n). \quad (6.44)$$

Donc α_n est solution de l'équation différentielle linéaire à coefficients constants :

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\alpha_n(t) + \mu_n\alpha_n(t) = (\tilde{f}(t), w_n), \\ \alpha_n(0) = g, \end{cases} \quad (6.45)$$

dont la solution est donnée par :

$$\alpha_n(t) = (g, w_n)e^{-\mu_n t} + \int_0^t (\tilde{f}(s), w_n)e^{-\mu_n(t-s)} ds = (g, w_n)e^{-\mu_n t} + w_n(a)e^{\nu a} \int_0^t \lambda(s)e^{-\mu_n(t-s)} ds \quad (6.46)$$

Finalement, la solution du problème initial (6.15) est égal à :

$$u(t, x) = e^{-\nu x} \left(\sum_{n \geq 0} (g, w_n)e^{-\mu_n t} w_n(x) + w_n(a)w_n(x)e^{\nu a} \int_0^t \lambda(s)e^{-\mu_n(t-s)} ds \right), \quad (6.47)$$

avec $\nu = -\frac{V}{2D}$, $w_n(x) = c_n \sin(\xi_n x)$ où ξ_n est solution de $yL \cot(yL) = \nu L$, $\mu_n = \rho + D\xi_n^2$, $\rho = R + \nu^2 D$. De plus, $\xi_n = (2n + 1)\frac{\pi}{2} + \varepsilon_n$ avec $0 < \varepsilon_n < \frac{\pi}{2}$ et $\lim_{n \rightarrow \infty} \varepsilon_n = 0$.

Toutefois, il a été impossible de l'utiliser numériquement pour nos simulations comme nous le verrons dans la section 7.1. Nous avons donc décidé de reprendre le système semi-discrétisé (6.4).

6.1.4 Erreur sur la solution lorsque l'on approche la masse de Dirac par une fonction gaussienne

Théorème 8 Posons $\hat{f}(t, x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} e^{\nu x} \lambda(t) e^{-\frac{(x-a)^2}{\sigma^2}}$, \tilde{u} (resp. \hat{u}) la solution du système (6.38) (resp. la solution obtenue en remplaçant f par \hat{f} dans (6.38)). Alors, si λ est une fonction majorée par une constante positive λ_{max} (ce qui est toujours vérifié dans la réalité), nous avons la majoration suivante :

$\forall \epsilon > 0, \exists \sigma^* > 0$, tel que si $0 < \sigma < \sigma^*$, alors

$$\| \tilde{u}(t) - \hat{u}(t) \|_2 \leq \frac{\lambda_{max}\epsilon}{\mu} \sqrt{1 - e^{-\mu T}}. \quad (6.48)$$

où μ est la constante de V-ellipticité associée à la forme bilinéaire \bar{a} définie ci-dessus.

Démonstration : Reprenons la formulation variationnelle (6.39), comme $\tilde{u}(t) - \hat{u}(t) \in V$, on a :

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt}(\tilde{u}(t) - \hat{u}(t), \tilde{u}(t) - \hat{u}(t)) + \bar{a}(\tilde{u}(t) - \hat{u}(t), \tilde{u}(t) - \hat{u}(t)) \\ &= (f(t, \cdot) - \hat{f}(t, \cdot), \tilde{u}(t) - \hat{u}(t)). \end{aligned} \quad (6.49)$$

\bar{a} est \mathcal{V} -elliptique car d'après le lemme de Poincaré, il existe une constante $C > 0$ telle que :

$$\forall w \in \mathcal{V}, \bar{a}(w, w) \geq D \left\| \frac{\partial w}{\partial x} \right\|_{L^2}^2 \geq DC \|w\|_{H^1}^2. \quad (6.50)$$

Il vient alors :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} (\|\tilde{u}(t) - \hat{u}(t)\|_2^2) + \mu \|\tilde{u}(t) - \hat{u}(t)\|_2^2 &\leq \|f(t, \cdot) - \hat{f}(t, \cdot)\|_{\mathcal{V}'} \|\tilde{u}(t) - \hat{u}(t)\|_2, \\ &\leq \frac{1}{2\mu} \|f(t, \cdot) - \hat{f}(t, \cdot)\|_{\mathcal{V}'}^2 + \frac{\mu}{2} \|\tilde{u}(t) - \hat{u}(t)\|_2^2, \end{aligned} \quad (6.51)$$

d'où

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} (\|\tilde{u}(t) - \hat{u}(t)\|_2^2) + (\mu - \frac{\mu}{2}) \|\tilde{u}(t) - \hat{u}(t)\|_2^2 \leq \frac{1}{2\mu} \|f(t, \cdot) - \hat{f}(t, \cdot)\|_{\mathcal{V}'}^2. \quad (6.52)$$

Posons $\varphi(t) = \|\tilde{u}(t) - \hat{u}(t)\|_2^2$, alors (6.52) se récrit :

$$\varphi'(t) + \mu\varphi(t) \leq \frac{1}{\mu} \|f(t, \cdot) - \hat{f}(t, \cdot)\|_{\mathcal{V}'}^2. \quad (6.53)$$

En multipliant l'inégalité précédente par $e^{\mu t}$ puis en intégrant par rapport à t sur $[0, t]$, on obtient :

$$\begin{aligned} \int_0^t (\varphi'(s) + \mu\varphi(s)) e^{\mu s} ds &= \int_0^t (\varphi(s) e^{\mu s})' ds \\ &\leq \frac{1}{\mu} \int_0^t \|f(s, \cdot) - \hat{f}(s, \cdot)\|_{\mathcal{V}'}^2 e^{\mu s} ds, \end{aligned} \quad (6.54)$$

soit

$$\varphi(t) e^{\mu t} \leq \frac{1}{\mu} \int_0^t \|f(s, \cdot) - \hat{f}(s, \cdot)\|_{\mathcal{V}'}^2 e^{\mu s} ds \quad (6.55)$$

puisque $\varphi(0) = \|\tilde{u}(0) - \hat{u}(0)\|_2^2 = 0$. Ce qui fait finalement :

$$\|\tilde{u}(t) - \hat{u}(t)\|_2^2 \leq \frac{1}{\mu} e^{-\mu t} \int_0^t \|f(s, \cdot) - \hat{f}(s, \cdot)\|_{\mathcal{V}'}^2 e^{\mu s} ds. \quad (6.56)$$

Majorons $\|f(s, \cdot) - \hat{f}(s, \cdot)\|_{\mathcal{V}'}$. Comme $\lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} e^{-\frac{(x-a)^2}{\sigma^2}} = \delta_a$ au sens des distributions, il vient pour toute fonction $v \in \mathcal{V}$:

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} e^{-\frac{(x-a)^2}{\sigma^2}} e^{\nu x} v(x) dx \right) - v(a) e^{\nu a} = 0. \quad (6.57)$$

Ainsi, pour tout $\epsilon > 0$, il existe $\tilde{\sigma} > 0$ tel que si l'on a $0 < \sigma < \tilde{\sigma}$ alors

$$\left| \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} e^{-\frac{(x-a)^2}{\sigma^2}} e^{\nu x} v(x) dx - v(a) e^{\nu a} \right| < \epsilon. \quad (6.58)$$

De même, comme pour tout $\tilde{\epsilon} > 0$,

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} \left(\int_{-\infty}^{a-\tilde{\epsilon}} \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} e^{-\frac{(x-a)^2}{\sigma^2}} e^{\nu x} v(x) dx \right) + \lim_{\sigma \rightarrow 0} \left(\int_{a+\tilde{\epsilon}}^{+\infty} \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} e^{-\frac{(x-a)^2}{\sigma^2}} e^{\nu x} v(x) dx \right) = 0,$$

nous avons également l'existence de $\sigma^* > 0$ tel que si $0 < \sigma < \sigma^*$ alors

$$\left| \int_0^L \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} e^{-\frac{(x-a)^2}{\sigma^2}} e^{\nu x} v(x) dx - v(a) e^{\nu a} \right| < \epsilon. \quad (6.59)$$

ceci pour tout $v \in \mathcal{V}$. D'où

$$\| f(s, \cdot) - \hat{f}(s, \cdot) \|_{\mathcal{V}'} = \sup_{\|v\|=1} | \langle f(s, \cdot) - \hat{f}(s, \cdot), v \rangle | \leq \lambda_{max} \epsilon. \quad (6.60)$$

Ainsi, nous obtenons la majoration suivante en reprenant (6.56) et (6.60) :

$$\| \tilde{u}(t) - \hat{u}(t) \|_2 \leq \frac{\lambda_{max} \epsilon}{\mu} \sqrt{1 - e^{-\mu T}}. \blacksquare \quad (6.61)$$

Nous pouvons alors déterminer l'erreur commise sur la solution du système initial (6.37) lorsque l'on approche la masse de Dirac par une fonction exponentielle. En effet, reprenons les notations du début du paragraphe, soit u la solution du système (6.37), \hat{u} celle de (6.3) et \tilde{u} la solution du système (6.38). D'après (6.48), \tilde{u} vérifie :

$$\| \tilde{u}(t) - \hat{u}(t) \|_2 \leq \frac{\lambda_{max} \epsilon}{\mu} \sqrt{1 - e^{-\mu T}}. \quad (6.62)$$

Or, en reprenant la définition de la norme L^2 et comme $0 \leq x \leq L$, $\nu < 0$, on obtient :

$$\begin{aligned} \| \tilde{u}(t) - \hat{u}(t) \|_2 &= \left(\int_0^L (\tilde{u}(t, x) - \hat{u}(t, x))^2 dx \right)^{1/2} \\ &= \left(\int_0^L e^{2\nu x} (u(t, x) - \hat{u}(t, x))^2 dx \right)^{1/2} \\ &\geq \left(\int_0^L (u(t, x) - \hat{u}(t, x))^2 dx \right)^{1/2} e^{\nu L} \\ &\geq \| u(t) - \hat{u}(t) \|_2 e^{\nu L}. \end{aligned} \quad (6.63)$$

D'où

$$\| u(t) - \hat{u}(t) \|_2 \leq \frac{\lambda_{max} \epsilon}{\mu} \sqrt{1 - e^{-\mu T}} e^{-\nu L}. \quad (6.64)$$

La majoration (6.64) nous montre que l'on peut rendre l'erreur entre la solution calculée avec la masse de Dirac et celle calculée avec la fonction gaussienne aussi petite que l'on veut.

6.2 Identifiabilité du modèle semi-discrétisé quand le débit est indépendant du temps

6.2.1 La condition initiale n'est pas connue

L'utilisation de l'algèbre différentielle ne prend pas en compte les conditions initiales. Aussi, elles ne seront pas considérées dans l'étude qui suit.

Rappelons que pour déterminer l'expression des polynômes paramètres-sorties de la présentation caractéristique, l'algorithme de Rosenfeld-Groebner est utilisé. Il consiste, à partir d'un ordre d'élimination donné (ici on cherche à éliminer tout d'abord les variables d'état non observées, puis les sorties et enfin les paramètres à identifier), à combiner les équations entre-elles en utilisant

l'addition, la multiplication, la différentiation et le test d'égalité sur le corps \mathbb{R} des coefficients. Ceci permet d'obtenir un ou des polynômes ne contenant que les variables d'observation et les paramètres à identifier. Pour prouver l'identifiabilité de notre système semi-discrétisé, indépendamment du nombre de points de discrétisation en espace, nous allons reprendre la démarche de cet algorithme. Supposons que l'on ait $N+1$ points de discrétisation. Pour nous donner une idée sur le choix du nombre de points d'observation, nous avons utilisé le logiciel de C. Noiret implémenté sous maple. Après plusieurs essais, nous en avons conclu que deux points d'observation suffisaient pour que le système semi-discrétisé, sans les conditions initiales, soit globalement identifiable. Aussi, nous avons cherché à établir ce résultat, ceci quel que soit le nombre de points de discrétisation et en supposant observer le dernier point de discrétisation. Pour cela, nous allons donner explicitement l'expression des polynômes paramètres-sorties. Nous partirons de la dernière équation qui nous permettra d'exprimer la variable d'état v_{N-1} inconnue en fonction de la fonction d'observation. Puis en remontant dans le système, nous finirons par obtenir des polynômes ne dépendant que des observations, de l et Q . Ces derniers seront par définition les polynômes paramètres-sorties. La régularité du système permettra de plus de déterminer des relations de récurrence sur les coefficients des polynômes.

Supposons que $y_1 = v_q$, $y_2 = v_N$, $1 \leq q < N$ sont observés, alors le système (6.4) peut-être récrit comme un système de polynômes différentiels complété par $y_1 = v_q$, $y_2 = v_N$ et $\dot{l} = 0$, $\dot{Q} = 0$, soit :

$$(Sd1_N) \begin{cases} \dot{v}_1(t) = \beta v_1(t) + \gamma v_2(t) + k_1 l Q, \\ \dot{v}_i(t) = \alpha v_{i-1}(t) + \beta v_i(t) + \gamma v_{i+1}(t) + k_i l Q^i, \quad i=2, \dots, q-1, \\ \dot{v}_N(t) = \alpha' v_{N-1}(t) + \beta v_N(t) + k_N l Q^N, \\ y_1 = v_q, \quad y_2 = v_N, \\ \dot{l} = 0, \quad \dot{Q} = 0. \end{cases} \quad (6.65)$$

L'idéal différentiel généré par les équations de $(Sd1_N)$ peut-être considéré dans l'anneau différentiel

$$K\{v_1, \dots, v_N, y, l, Q\}$$

généré par le corps des constantes,

$$K = \mathbb{R}(\alpha, \beta, \gamma, \alpha', k_1, \dots, k_N)$$

les états $(v_i)_{i=1, \dots, N}$, les sorties y_1 , y_2 et les paramètres (l, Q) . Les fonctions $(v_i)_{i=1, \dots, N}$ sont différentiellement algébriques sur $K \langle l, Q \rangle$, donc les fonctions y_1 , y_2 également.

Proposition 10 Le radical de l'idéal généré par $(Sd1_N)$ muni de l'ordre d'élimination

$$[l, Q] \prec [y_1, y_2] \prec [\{v_i\}_{1 \leq i \leq N, i \neq q, i \neq N}]$$

admet une présentation caractéristique qui contient les polynômes paramètres-sorties suivants :

$$\begin{cases} f_{N-q}(y_1, y_2) + \sum_{i=q+1}^N c_{N-q,i} k_i l Q^i = 0, \\ f_N(y_1, y_2) + \sum_{i=1}^N c_{N,i} k_i l Q^i = 0, \end{cases} \quad (6.66)$$

avec $(c_{N-q,i})_{i=q+1, \dots, N}$, $(c_{N,i})_{i=1, \dots, N}$ des suites de réels, $f_{N-q}(y_1, y_2)$ et $f_N(y_1, y_2)$ des fonctions linéaires en y_1 , y_2 et leurs dérivées.

Démonstration : Pour simplifier les calculs, posons $R_i = k_i l Q^i$ pour tout entier $i \in [1, N]$. Les suites $(c_{N-q,i})_{i=q+1,\dots,N}$, $(c_{N,i})_{i=1,\dots,N}$ et les fonctions f_{N-q} et f_N sont données dans le lemme suivant qui est démontré dans l'annexe 3 :

Lemme 1 Pour tout entier $r \in [1, N]$, on a les égalités suivantes :

$$\alpha' \alpha^{r-1} v_{N-r} = f_r(v_N) + \sum_{i=N-r+1}^N c_{r,i} R_i, \quad (6.67)$$

avec $f_r(v_N)$ une fonction linéaire en v_N et ses dérivées et les constantes $c_{r,i}$ définies par :

- si $i = 1$, $c_{N,1} = -\alpha' \alpha^{N-2}$,
- si $i = 2$, $c_{N-1,2} = -\alpha' \alpha^{N-3}$, $c_{N,2} = \beta \alpha' \alpha^{N-3}$,
- si $i = 3, \dots, N$ est fixé, on peut les regrouper pour définir la suite $(c_{r,i})_{N+3-i \leq r \leq N}$ par la relation de récurrence :

$$\text{pour tout } r \in [N+3-i, N], c_{r,i} = -\beta c_{r-1,i} - \alpha \gamma c_{r-2,i}$$

avec comme conditions initiales :

- ★ si $i=N$, $c_{1,N} = -1$ et $c_{2,N} = \beta$,
- ★ si $i \in [3, N-1]$, $c_{N-i+1,i} = -\alpha' \alpha^{N-i-1}$, et $c_{N-i+2,i} = \alpha' \beta \alpha^{N-i-1}$.

En particulier, (6.67) avec $r = N - q$ donne :

$$\forall q \in [1, N-1], \alpha' \alpha^{N-q-1} v_q = f_{N-q}(v_N) + \sum_{i=q+1}^N c_{N-q,i} R_i,$$

qui est le premier polynôme paramètre-sortie. Ensuite, (6.67) avec $r = N - 2$ puis $r = N - 1$ donne :

$$\alpha' \alpha^{N-3} v_2 = f_{N-2}(v_N) + \sum_{i=3}^N c_{N-2,i} R_i, \quad (6.68)$$

$$\alpha' \alpha^{N-2} v_1 = f_{N-1}(v_N) + \sum_{i=2}^N c_{N-1,i} R_i. \quad (6.69)$$

En multipliant la première équation de $(Sd1_N)$ égale à $\dot{v}_1 = \beta v_1 + \gamma v_2 + R_1$ par $\alpha' \alpha^{N-2}$ et en remplaçant, dans celle-ci, $\alpha' \alpha^{N-3} v_2$ et $\alpha' \alpha^{N-2} v_1$ par leur expression donnée en (6.68) et (6.69) respectivement, on trouve :

$$\dot{f}_{N-1}(v_N) = \beta f_{N-1}(v_N) + \sum_{i=2}^N \beta c_{N-1,i} R_i + \alpha \gamma f_{N-2}(v_N) + \sum_{i=3}^N \alpha \gamma c_{N-2,i} R_i + \alpha' \alpha^{N-2} R_1.$$

Or d'après la preuve du lemme 1, on a défini $f_N(v_N)$ par $f_N(v_N) = \dot{f}_{N-1}(v_N) - \beta f_{N-1}(v_N) - \alpha \gamma f_{N-2}(v_N)$, d'où

$$f_N(v_N) - \sum_{i=3}^N (\beta c_{N-1,i} + \alpha \gamma c_{N-2,i}) R_i - \beta c_{N-1,2} R_2 - \alpha' \alpha^{N-2} R_1 = 0.$$

Avec $c_{N,i} = -\beta c_{N-1,i} - \alpha \gamma c_{N-2,i}$ pour $i = 3, \dots, N$, $c_{N,2} = -\beta c_{N-1,2} = \alpha' \beta \alpha^{N-3}$ et $c_{N,1} = -\alpha' \alpha^{N-2}$, nous obtenons bien le deuxième polynôme paramètre-sortie donné dans la proposition. ■

Grâce aux polynômes paramètres-sorties, nous allons pouvoir démontrer l'identifiabilité des paramètres.

Théorème 9 Quel que soit le nombre de points de discrétisation en espace et pour le choix des deux points d'observation $y_1 = v_q$, $1 \leq q < N$, $y_2 = v_N$, le modèle $(Sd1_N)$ est globalement identifiable en $(l, Q) \in (\mathbb{R}^+)^2$, donc $(\lambda, a) \in \mathbb{R}^+ \times [0, L]$ également.

Démonstration : D'après la proposition précédente, sachant que nous avons les deux points d'observation $y_1 = v_q$ et $y_2 = v_N$, les deux polynômes paramètres sorties s'écrivent :

$$\begin{cases} f_{N-q}(y_1, y_2) + \sum_{i=q+1}^N c_{N-q,i} k_i l Q^i = 0 \\ f_N(y_1, y_2) + \sum_{i=1}^N c_{N,i} k_i l Q^i = 0 \end{cases} \quad (6.70)$$

où f_{N-q} , f_N sont deux fonctions linéaires en y_1 , y_2 et leurs dérivées, et $(c_{N-q,i})_{i=q+1, \dots, N}$, $(c_{N,i})_{i=1, \dots, N}$ sont des suites de constantes indépendantes des observations. Alors, l et Q sont identifiables si et seulement si le système suivant :

$$\begin{cases} \sum_{i=q+1}^N c_{N-q,i} k_i l Q^i = \sum_{i=q+1}^N c_{N-q,i} k_i \bar{l} \bar{Q}^i \\ \sum_{i=1}^N c_{N,i} k_i l Q^i = \sum_{i=1}^N c_{N,i} k_i \bar{l} \bar{Q}^i \end{cases} \quad (6.71)$$

conduit à $l = \bar{l}$ et $Q = \bar{Q}$. La deuxième équation du système (6.71) se réécrit :

$$l = \bar{l} \frac{\sum_{i=1}^N c_{N,i} k_i \bar{Q}^i}{\sum_{i=1}^N c_{N,i} k_i Q^i}. \quad (6.72)$$

En remplaçant l par (6.72) dans la première équation de (6.71), et après simplification (\bar{l} étant non nul), il vient que :

$$\left(\sum_{i=q+1}^N c_{N-q,i} k_i Q^i \right) \left(\sum_{j=1}^N c_{N,j} k_j \bar{Q}^j \right) = \left(\sum_{i=q+1}^N c_{N-q,i} k_i \bar{Q}^i \right) \left(\sum_{j=1}^N c_{N,j} k_j Q^j \right),$$

soit encore, en notant $I_k := \{(i, j) / i + j = k, q + 1 \leq i \leq N, 1 \leq j \leq N\}$:

$$\sum_{k=q+2}^{2N} \sum_{(i,j) \in I_k} k_i k_j c_{N-q,i} c_{N,j} Q^i \bar{Q}^j - \sum_{k=q+2}^{2N} \sum_{(i,j) \in I_k} k_i k_j c_{N-q,i} c_{N,j} \bar{Q}^i Q^j = 0.$$

En regroupant les deux sommes, on trouve :

$$\sum_{k=q+2}^{2N} \sum_{(i,j) \in I_k} k_i k_j c_{N-q,i} c_{N,j} (Q^i \bar{Q}^j - \bar{Q}^i Q^j) = 0.$$

Or d'après l'égalité ensembliste suivante :

$$\begin{aligned} I_k &= \{(i, j) : i + j = k, q + 1 \leq i \leq j \leq N\} \\ &\cup \{(i, j) : i + j = k, 1 \leq j \leq i \leq N, q + 1 \leq i \leq N\} \end{aligned} \quad (6.73)$$

et le fait que les termes de la somme sur k sont nuls quand $i = j$, on peut récrire cette somme de la façon suivante :

$$\sum_{k=q+2}^{2N} \sum_{(i,j) \in I_k^1} k_i k_j c_{N-q,i} c_{N,j} (Q^i \bar{Q}^j - \bar{Q}^i Q^j) + \sum_{k=q+2}^{2N} \sum_{(i,j) \in I_k^2} k_i k_j c_{N-q,i} c_{N,j} (Q^i \bar{Q}^j - \bar{Q}^i Q^j) = 0 \quad (6.74)$$

avec

$$\begin{aligned} I_k^1 &= \{(i, j) : i + j = k, q + 1 \leq i < j \leq N\}, \\ I_k^2 &= \{(i, j) : i + j = k, 1 \leq j < i \leq N, q + 1 \leq i \leq N\}. \end{aligned}$$

On vérifie que :

$$\sum_{k=q+2}^{2N} \sum_{(i,j) \in I_k^2} k_i k_j c_{N-q,i} c_{N,j} (Q^i \bar{Q}^j - \bar{Q}^i Q^j) = - \sum_{k=q+2}^{2N} \sum_{(i,j) \in \tilde{I}_k^2} k_i k_j c_{N-q,j} c_{N,i} (Q^i \bar{Q}^j - \bar{Q}^i Q^j), \quad (6.75)$$

avec $\tilde{I}_k^2 = \{(i, j) / i + j = k, q + 1 \leq j \leq N, 1 \leq i < j \leq N\}$, d'où en reprenant (6.74) :

$$\sum_{k=q+2}^{2N} \sum_{(i,j) \in I_k^1} k_i k_j c_{N-q,i} c_{N,j} (Q^i \bar{Q}^j - \bar{Q}^i Q^j) - \sum_{k=q+2}^{2N} \sum_{(i,j) \in \tilde{I}_k^2} k_i k_j c_{N-q,j} c_{N,i} (Q^i \bar{Q}^j - \bar{Q}^i Q^j) = 0 \quad (6.76)$$

On décompose la deuxième somme sachant que :

$$\begin{aligned} \tilde{I}_k^2 &= \{(i, j) / i + j = k, q + 1 \leq j \leq N, 1 \leq i < j \leq N\} \\ &= I_k^1 \cup J_k \end{aligned} \quad (6.77)$$

où $J_k = \{(i, j) / i + j = k, 1 \leq i \leq q + 1 \leq j \leq N\}$. Ce qui fait :

$$\begin{aligned} &\sum_{k=q+2}^{2N} \left\{ \sum_{(i,j) \in I_k^1} k_i k_j c_{N-q,i} c_{N,j} (Q^i \bar{Q}^j - \bar{Q}^i Q^j) - \sum_{(i,j) \in I_k^1} k_i k_j c_{N-q,j} c_{N,i} (Q^i \bar{Q}^j - \bar{Q}^i Q^j) \right. \\ &\left. - \sum_{(i,j) \in J_k} k_i k_j c_{N-q,j} c_{N,i} (Q^i \bar{Q}^j - \bar{Q}^i Q^j) \right\} = 0, \end{aligned} \quad (6.78)$$

soit :

$$\sum_{k=q+2}^{2N} \left\{ \sum_{(i,j) \in I_k^1} k_i k_j (c_{N-q,i} c_{N,j} - c_{N-q,j} c_{N,i}) (Q^i \bar{Q}^j - \bar{Q}^i Q^j) \right. \\ \left. - \sum_{(i,j) \in J_k} k_i k_j c_{N-q,j} c_{N,i} (Q^i \bar{Q}^j - \bar{Q}^i Q^j) \right\} = 0. \quad (6.79)$$

Or, pour $i > j$, nous avons la relation suivante :

$$Q^i \bar{Q}^j - \bar{Q}^i Q^j = (Q - \bar{Q}) \sum_{r=0}^{i-1-j} Q^{i-r-1} \bar{Q}^{j+r}. \quad (6.80)$$

Ce qui fait en reprenant (6.79) :

$$(Q - \bar{Q}) \sum_{k=q+2}^{2N} \left\{ \sum_{I_k^1} k_i k_j (c_{N-q,j} c_{N,i} - c_{N-q,i} c_{N,j}) \sum_{r=0}^{i-1-j} Q^{i-r-1} \bar{Q}^{j+r} \right. \\ \left. + \sum_{J_k} k_i k_j c_{N-q,j} c_{N,i} \sum_{r=0}^{j-1-i} \bar{Q}^{j-r-1} Q^{i+r} \right\} = 0. \quad (6.81)$$

Ainsi, nous avons soit $Q = \bar{Q}$ soit le deuxième facteur du produit ci-dessus nul. Nous allons donc démontrer que ce deuxième facteur qui peut être considéré comme un polynôme en Q , \bar{Q} a tous ses coefficients positifs. Pour cela, nous allons nous appuyer sur le lemme suivant démontré dans l'annexe C, lemme 5 :

Lemme 2 La suite $(c_{r,i})_{N+3-i \leq r \leq N} = (-\beta c_{r-1,i} - \alpha \gamma c_{r-2,i})_{N+3-i \leq r \leq N}$ pour $i = 3, \dots, N$ fixé et admettant pour conditions initiales :

- pour $i=N$, $c_{1,N} = -1$ et $c_{2,N} = \beta$,
- pour $i \in [3, N-1]$, $c_{N-i+1,i} = -\alpha' \alpha^{N-i-1}$, et $c_{N-i+2,i} = \alpha' \beta \alpha^{N-i-1}$.

a pour expression :

- pour $i = N$, $c_{r,N} = \frac{1}{\sqrt{\Delta}} X_1^r - \frac{1}{\sqrt{\Delta}} X_2^r$ pour $3 \leq r \leq N$,
- pour $i \in [3, N-1]$, $c_{r,i} = \frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\sqrt{\Delta}} X_1^{r-N+i} - \frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\sqrt{\Delta}} X_2^{r-N+i}$ pour $N+3-i \leq r \leq N$.

avec $\Delta = \beta^2 - 4\alpha\gamma$, $X_1 = -\frac{\beta + \sqrt{\Delta}}{2} > 0$ et $X_2 = \frac{-\beta + \sqrt{\Delta}}{2} > 0$.

Etudions tout d'abord le signe des coefficients $c_{N-q,j} c_{N,i} - c_{N-q,i} c_{N,j}$, pour $(i, j) \in I_k^1$ fixés. Plusieurs cas sont à distinguer.

- Le premier cas est celui pour lequel $i = 2$, $3 \leq j \leq N-1$, donc $q = 1$. D'après le lemme 1, $c_{N,2}$ et $c_{N-1,2}$ sont donnés dans le cas particulier $i = 2$ et $c_{N-1,j}$, $c_{N,j}$ sont des cas

particuliers du lemme 2 pour lesquels $j \in [3, \dots, N]$. Alors, il vient :

$$\begin{aligned} c_{N-1,j}c_{N,2} - c_{N-1,2}c_{N,j} &= \left(\frac{\alpha' \alpha^{N-j-1}}{\sqrt{\Delta}} X_1^{j-1} - \frac{\alpha' \alpha^{N-j-1}}{\sqrt{\Delta}} X_2^{j-1} \right) \beta \alpha' \alpha^{N-3} \\ &\quad - (-\alpha' \alpha^{N-3}) \left(\frac{\alpha' \alpha^{N-j-1}}{\sqrt{\Delta}} X_1^j - \frac{\alpha' \alpha^{N-j-1}}{\sqrt{\Delta}} X_2^j \right) \end{aligned}$$

Après factorisation par $\frac{\alpha'^2 \alpha^{2N-j-4}}{\sqrt{\Delta}}$, nous obtenons :

$$\begin{aligned} c_{N-1,j}c_{N,2} - c_{N-1,2}c_{N,j} &= \frac{\alpha'^2 \alpha^{2N-j-4}}{\sqrt{\Delta}} \left(\beta X_1^{j-1} - \beta X_2^{j-1} + X_1^j - X_2^j \right) \\ &= \frac{\alpha'^2 \alpha^{2N-j-4}}{\sqrt{\Delta}} \left(X_1^{j-1}(\beta + X_1) - X_2^{j-1}(\beta + X_2) \right). \end{aligned}$$

Or $\beta + X_1 = -X_2$ et $\beta + X_2 = -X_1$, donc après avoir factorisé, on trouve :

$$c_{N-1,j}c_{N,2} - c_{N-1,2}c_{N,j} = \frac{\alpha'^2 \alpha^{2N-j-4}}{\sqrt{\Delta}} X_1 X_2^{j-1} \left(1 - \left(\frac{X_1}{X_2} \right)^{j-2} \right).$$

Comme $j - 2 > 0$, X_1 et X_2 sont strictement positifs et vérifient $X_2 > X_1$, $c_{N-1,j}c_{N,2} - c_{N-1,2}c_{N,j}$ est un produit de termes positifs donc est lui-même positif.

- Supposons que $i = 2$, $j = N$, alors $q = 1$. D'après le lemme 1, $c_{N,2}$ et $c_{N-1,2}$ sont donnés. En prenant respectivement les cas particuliers $i = N$, $r = N - 1$ et $i = N$, $r = N$ du lemme 2, on trouve $c_{N-1,N}$ et $c_{N,N}$, on en déduit alors la suite d'égalité suivante :

$$\begin{aligned} c_{N-1,N}c_{N,2} - c_{N-1,2}c_{N,N} &= \left(\frac{1}{\sqrt{\Delta}} X_1^{N-1} - \frac{1}{\sqrt{\Delta}} X_2^{N-1} \right) \beta \alpha' \alpha^{N-3} \\ &\quad + \alpha' \alpha^{N-3} \left(\frac{1}{\sqrt{\Delta}} X_1^N - \frac{1}{\sqrt{\Delta}} X_2^N \right) \\ &= \frac{\alpha' \alpha^{N-3}}{\Delta} \left(\beta (X_1^{N-1} - X_2^{N-1}) + (X_1^N - X_2^N) \right) \\ &= \frac{\alpha' \alpha^{N-3}}{\Delta} \left((\beta + X_1) X_1^{N-1} - (\beta + X_2) X_2^{N-1} \right). \end{aligned}$$

En reprenant $\beta + X_1 = -X_2$ et $\beta + X_2 = -X_1$, puis en factorisant par $X_1 X_2^{N-1}$, on obtient :

$$c_{N-1,N}c_{N,2} - c_{N-1,2}c_{N,N} = \frac{\alpha' \alpha^{N-3}}{\Delta} X_1 X_2^{N-1} \left(1 - \left(\frac{X_1}{X_2} \right)^{N-1} \right).$$

De même que précédemment, $c_{N-1,N}c_{N,2} - c_{N-1,2}c_{N,N}$ est positif.

- On suppose avoir le cas particulier : $2 < q + 1 \leq i \leq N - 1$, $j = N$. Le lemme précédent nous conduit aux égalités suivantes :

$$\begin{aligned} c_{N-q,N}c_{N,i} - c_{N-q,i}c_{N,N} &= \left(\frac{1}{\sqrt{\Delta}}X_1^{N-q} - \frac{1}{\sqrt{\Delta}}X_2^{N-q} \right) \left(\frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\sqrt{\Delta}}X_1^i - \frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\sqrt{\Delta}}X_2^i \right) \\ &\quad - \left(\frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\sqrt{\Delta}}X_1^{i-q} - \frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\sqrt{\Delta}}X_2^{i-q} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{\Delta}}X_1^N - \frac{1}{\sqrt{\Delta}}X_2^N \right) \end{aligned}$$

Après avoir factorisé le membre de droite par $\frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\Delta}$ puis avoir développé, on trouve :

$$\begin{aligned} c_{N-q,N}c_{N,i} - c_{N-q,i}c_{N,N} &= \frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\Delta} (-X_1^{N-q}X_2^i - X_2^{N-q}X_1^i + X_1^{i-q}X_2^N + X_2^{i-q}X_1^N) \\ &= \frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\Delta} \left((X_1^{-q}(X_1^iX_2^N - X_1^N X_2^i) + X_2^{-q}(X_1^N X_2^i - X_2^N X_1^i)) \right) \\ &= \frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\Delta} (X_1^iX_2^N - X_1^N X_2^i)(X_1^{-q} - X_2^{-q}) \\ &= \frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\Delta} X_1^{i-q}X_2^N \left(1 - \left(\frac{X_1}{X_2} \right) \right)^{N-i} \left(1 - \left(\frac{X_1}{X_2} \right)^q \right) \end{aligned}$$

$N - i$ étant positifs en reprenant les arguments du cas particulier précédent, on en déduit que $c_{N-q,N}c_{N,i} - c_{N-q,i}c_{N,N}$ est positif.

- On suppose désormais que $3 \leq i < j \leq N - 1$. D'après le lemme, on a :

$$\begin{aligned} c_{N-q,j}c_{N,i} - c_{N-q,i}c_{N,j} &= \left(\frac{\alpha' \alpha^{N-j-1}}{\sqrt{\Delta}}X_1^{j-q} - \frac{\alpha' \alpha^{N-j-1}}{\sqrt{\Delta}}X_2^{j-q} \right) \left(\frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\sqrt{\Delta}}X_1^i - \frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\sqrt{\Delta}}X_2^i \right) \\ &\quad - \left(\frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\sqrt{\Delta}}X_1^{i-q} - \frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\sqrt{\Delta}}X_2^{i-q} \right) \left(\frac{\alpha' \alpha^{N-j-1}}{\sqrt{\Delta}}X_1^j - \frac{\alpha' \alpha^{N-j-1}}{\sqrt{\Delta}}X_2^j \right). \end{aligned}$$

Factorisons chaque terme de la différence par $K_{i,j} := \frac{\alpha'^2 \alpha^{N-j-1} \alpha^{N-i-1}}{\Delta}$, ce qui fait :

$$c_{N-q,j}c_{N,i} - c_{N-q,i}c_{N,j} = K_{i,j} \left[(X_1^{j-q} - X_2^{j-q})(X_1^i - X_2^i) - (X_1^{i-q} - X_2^{i-q})(X_1^j - X_2^j) \right].$$

Développons l'expression entre crochet et regroupons les termes comme suit :

$$c_{N-q,j}c_{N,i} - c_{N-q,i}c_{N,j} = K_{i,j} \left[(X_1^{i-q}X_2^j - X_1^{j-q}X_2^i) + (X_2^{i-q}X_1^j - X_2^{j-q}X_1^i) \right],$$

c'est à dire :

$$c_{N-q,j}c_{N,i} - c_{N-q,i}c_{N,j} = K_{i,j} \left[X_1^{-q}(X_1^iX_2^j - X_1^jX_2^i) + X_2^{-q}(X_2^iX_1^j - X_2^jX_1^i) \right],$$

Après factorisation, nous obtenons alors :

$$c_{N-q,j}c_{N,i} - c_{N-q,i}c_{N,j} = K_{i,j}(X_1^iX_2^j - X_1^jX_2^i)(X_1^{-q} - X_2^{-q})$$

$$c_{N-q,j}c_{N,i} - c_{N-q,i}c_{N,j} = K_{i,j}X_1^iX_2^j \left(1 - \left(\frac{X_1}{X_2} \right)^{j-i} \right) \left(1 - \left(\frac{X_1}{X_2} \right)^q \right).$$

6.2. Identifiabilité du modèle semi-discrétisé quand le débit est indépendant du temps 69

Or $j - i > 0$ et $q > 0$ car on est dans le cas $q + 1 \leq i < j \leq N$, et X_1, X_2 sont strictement positifs et vérifient $X_1 < X_2$. Ainsi, $c_{N-q,j}c_{N,i} - c_{N-q,i}c_{N,j}$ est un produit de terme strictement positif donc est lui-même positif.

Reste à étudier le signe des $c_{N-q,j}c_{N,i}$ pour $1 \leq i < q + 1 \leq j \leq N$. Ils se récrivent encore :

$$\begin{aligned} c_{N-q,j}c_{N,i} &= \frac{\alpha' \alpha^{N-j}}{\sqrt{\Delta}} (X_1^{j-q} - X_2^{j-q}) \frac{\alpha' \alpha^{N-i}}{\sqrt{\Delta}} (X_1^i - X_2^i) \\ &= \frac{\alpha'^2 \alpha^{2N-i-j}}{\Delta} (X_2^{j-q} - X_1^{j-q})(X_2^i - X_1^i) \\ &= \frac{\alpha'^2 \alpha^{2N-i-j}}{\Delta} X_2^{i+j-q} \left(1 - \left(\frac{X_1}{X_2} \right)^{j-q} \right) \left(1 - \left(\frac{X_1}{X_2} \right)^i \right). \end{aligned} \quad (6.82)$$

Pour les mêmes raisons que précédemment, $c_{N-q,j}c_{N,i}$ est un produit de termes positifs donc est positif lui-même.

Le polynôme

$$\sum_{k=q+2}^{2N} \left\{ \sum_{I_k^1} k_i k_j (c_{N-q,j}c_{N,i} - c_{N-q,i}c_{N,j}) \sum_{r=0}^{i-1-j} Q^{i-r-1} \bar{Q}^{j+r} + \sum_{J_k} k_i k_j c_{N-q,j}c_{N,i} \sum_{r=0}^{j-1-i} \bar{Q}^{j-r-1} Q^{i+r} \right\}$$

est un polynôme en (Q, \bar{Q}) dont tous les coefficients sont positifs donc il n'admet pas de racines strictement positives. On en déduit qu'il n'y a que la solution strictement positive $Q = \bar{Q}$ à l'équation (6.81). Ainsi, le système (6.71) conduit à $Q = \bar{Q}$. Et en reprenant une des deux équations de ce système on a immédiatement $l = \bar{l}$. ■

6.2.2 La condition initiale est connue

Dans ce cas, nous n'aurons besoin que d'un point d'observation. Reprenons le système semi-discrétisé (6.4) et supposons observer $v_N = y$. Considérons alors le système :

$$(Sd1'_N) \begin{cases} \dot{v}_1(t) = \beta v_1(t) + \gamma v_2(t) + k_1 l Q, \\ \dot{v}_i(t) = \alpha v_{i-1}(t) + \beta v_i(t) + \gamma v_{i+1}(t) + k_i l Q^i, \quad i=2, \dots, q-1, \\ \dot{v}_N(t) = \alpha' v_{N-1}(t) + \beta v_N(t) + k_N l Q^N, \\ y = v_N, \\ \dot{l} = 0, \quad \dot{Q} = 0. \end{cases} \quad (6.83)$$

Théorème 10 Quel que soit le nombre de points d'observation en espace, le modèle $(Sd1'_N)$ est globalement identifiable en $(l, Q) \in (\mathbb{R}^+)^2$, donc $(\lambda, a) \in \mathbb{R}^+ \times [0, L]$ également.

Démonstration : Si la concentration du polluant est supposée connue à l'instant initial alors la dernière équation de notre système semi-discrétisé prise à l'instant $t = 0$ donne :

$$\dot{v}_N(0) = \alpha' v_{N-1}(0) + \beta v_N(0) + k_N l Q^N. \quad (6.84)$$

v_N étant connu, sa dérivée l'est également donc $l Q^N$ est connu. Q étant non nul, (6.84) peut se récrire :

$$l = \frac{z}{Q^N}, \quad (6.85)$$

avec $z = \frac{\dot{v}_N(0) - \alpha' v_{N-1}(0) - \beta v_N(0)}{k_N}$.

En reprenant les calculs faits dans le cas où la condition initiale n'est pas connue, on trouve que le polynôme paramètre-sortie vaut :

$$f_N(y) + \sum_{i=1}^N c_{N,i} k_i l Q^i = 0 \quad (6.86)$$

où f_N est une fonction linéaire en y et ses dérivées, et la suite $(c_{N,i})_{i=1,\dots,N}$ a pour expression :

$$\begin{cases} c_{N,1} = -\alpha' \alpha^{N-2}, \\ c_{N,2} = \beta \alpha' \alpha^{N-3}, \\ c_{N,i} = \frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\sqrt{\Delta}} (X_1^i - X_2^i) \text{ pour } 3 \leq i \leq N-1, \\ c_{N,N} = \frac{1}{\sqrt{\Delta}} (X_1^N - X_2^N), \end{cases} \quad (6.87)$$

avec $\Delta = \beta^2 - 4\alpha\gamma$, $X_1 = -\frac{\beta + \sqrt{\Delta}}{2} > 0$ et $X_2 = \frac{-\beta + \sqrt{\Delta}}{2} > 0$.

Le résumé exhaustif de la présentation caractéristique est alors $\sum_{i=1}^N c_{N,i} k_i l Q^i$. Pour montrer l'identifiabilité globale, nous devons démontrer que :

$$\sum_{i=1}^N c_{N,i} k_i l Q^i = \sum_{i=1}^N c_{N,i} k_i \bar{l} \bar{Q}^i \quad (6.88)$$

conduit à :

$$\begin{cases} l = \bar{l}, \\ Q = \bar{Q}. \end{cases} \quad (6.89)$$

Remplaçons l (resp. \bar{l}) dans (6.88) par son expression donnée en (6.85), ce qui donne :

$$\sum_{i=1}^N c_{N,i} k_i \frac{z}{Q^N} Q^i = \sum_{i=1}^N c_{N,i} k_i \frac{z}{\bar{Q}^N} \bar{Q}^i.$$

En regroupant les deux sommes dans un même membre, il vient :

$$\sum_{i=1}^N c_{N,i} k_i (Q^N \bar{Q}^i - Q^i \bar{Q}^N) = 0.$$

D'après l'égalité (6.80), on peut factoriser $Q - \bar{Q}$. Il reste alors le polynôme :

$$\sum_{i=1}^N \sum_{r=0}^{i-1-N} c_{N,i} k_i Q^{N-r-1} \bar{Q}^{i+r}.$$

Or, dans la démonstration du lemme 2, nous avons vu que $X_2 > X_1$. Donc tous les coefficients de ce dernier polynôme en Q, \bar{Q} sont négatifs. On en déduit que l'on ne peut avoir que $Q = \bar{Q}$

(car on ne regarde que les solutions strictement positives) et $l = \frac{z}{Q^N} = \frac{z}{\bar{Q}^N} = \bar{l}$. Le modèle est donc bien globalement identifiable. ■

Remarque : Le point d'observation choisi en le dernier point de discrétisation et pour lequel on suppose avoir une condition de Neuman peut, dans certains cas, sembler un peu loin mais, dans nos estimations numériques, nous supposons ne rien savoir à propos de la source de pollution. Bien sûr, si on supposait mieux connaître la localisation de la source de pollution, il serait tout à fait possible de reprendre la démarche précédente en plaçant le point d'observation plus en amont.

6.3 Identifiabilité du modèle semi-discrétisé quand le débit est une fonction régulière du temps

Nous allons supposer que la fonction λ appartient à un espace suffisamment régulier \mathcal{L} ($\mathcal{L} = C^k([0, T])$, $k \in \mathbb{N}$ ou $\mathcal{L} = C^\infty([0, T])$).

Comme précédemment, deux cas vont apparaître. Le premier est celui où la condition initiale n'est pas prise en compte, il nécessitera deux points d'observation pour avoir l'identifiabilité. Le deuxième est celui pour lequel les conditions initiales sont prises en compte ; il suffira alors de disposer d'un point d'observation.

6.3.1 La condition initiale n'est pas connue

Après avoir étudié quelques cas particuliers grâce à maple, nous avons conclu qu'il fallait deux points d'observation pour que le système soit globalement identifiable. Toutefois, nous n'avons pas été en mesure de le prouver pour un nombre quelconque de points de discrétisation en espace. Nous n'avons traité qu'un cas particulier, celui où nous disposons de 5 points $v_0 < \dots < v_4$ et nous avons supposé observer $v_1 = y_1$ et $v_4 = y_2$. Les limites de l'ordinateur ne nous ont pas permis de prendre plus de points. Reprenons le système (6.4) complété des équations $v_1 = y_1$, $v_4 = y_2$, $\dot{Q} = 0$, soit :

$$(Sd_{2N}) \begin{cases} \dot{v}_1(t) = \beta v_1(t) + \gamma v_2(t) + k_1 l(t) Q, \\ \dot{v}_i(t) = \alpha v_{i-1}(t) + \beta v_i(t) + \gamma v_{i+1}(t) + k_i l(t) Q^i, \quad i=2, \dots, N-1, \\ \dot{v}_N(t) = \alpha' v_{N-1}(t) + \beta v_N(t) + k_N l(t) Q^N, \\ y_1 = v_1, \quad y_2 = v_4, \\ \dot{Q} = 0. \end{cases} \quad (6.90)$$

Pour déterminer les polynômes paramètres-sorties de la présentation caractéristique obtenue à partir du radical de l'idéal engendré par (Sd_{2N}) et muni de l'ordre d'élimination

$$[Q, l] < [y_1, y_2] < [v_1, v_3],$$

l'algorithme de Rosenfeld-Groebner implémenté dans maple a été utilisé. Rappelons que ce logiciel note $f[]$ la fonction f , $f[t]$, la dérivée première de f , $f[\underbrace{t, \dots, t}_n]$ la dérivée n-ième de f . Il nous a

donné :

$$\begin{aligned}
p_1 &= -\alpha' * y_1[t, t] + (2 * \beta * y_1[t] * \alpha' + k_1 * Q * l[t] * \alpha' - \beta^2 * y_1[]) * \alpha' \\
&\quad - \gamma^2 * \beta * y_2[] + \alpha * y_1[] * \alpha' * \gamma + \gamma^2 * y_2[t] - \beta * k_1 * Q * l[] * \alpha' \\
&\quad - \gamma^2 * k_4 * Q^4 * l[] + k_2 * Q^2 * l[] * \alpha' * \gamma)
\end{aligned} \tag{6.91}$$

et

$$\begin{aligned}
p_2 &= -\gamma * y_2[t, t] - (-y_1[t] * \alpha * \alpha' + \beta * y_1[] * \alpha * \alpha' + \gamma * \beta * k_4 * Q^4 * l[]) \\
&\quad - 2 * \gamma * \beta * y_2[t] - \gamma * k_4 * Q^4 * l[t] + \gamma * \beta^2 * y_2[] - \gamma^2 * y_2[] * \alpha' \\
&\quad - \gamma * k_3 * Q^3 * l[] * \alpha' + k_1 * Q * l[] * \alpha * \alpha').
\end{aligned} \tag{6.92}$$

Nous avons ensuite réutilisé l'algorithme de Rosenfeld-Groebner pour obtenir à partir de p_1 et p_2 une équation ne dépendant que de Q et des observations mais également une équation donnant l en fonction de Q . Pour cela, nous avons introduit Q dans le corps des constantes et pris l'ordre d'élimination :

$$[l] \prec [y_1, y_2]. \tag{6.93}$$

C'est cette élimination qui a vite montré ses limites quand on augmentait le nombre de points de discrétisation. Nous avons obtenu :

$$\begin{aligned}
\tilde{p}_1 &= (-\gamma^3 * y_2[] + y_1[t, t, t] - \beta^3 * y_1[] - 3 * \beta * y_1[t, t] + 3 * \beta^2 * y_1[t] + 2 * \alpha * \gamma * \beta * y_1[]) \\
&\quad - 2 * \alpha * \gamma * y_1[t] * k_4^2 * \gamma^2 * \alpha' * Q^8 + (\alpha' * \beta^2 * y_1[] + \alpha' * y_1[t, t] - \alpha * \alpha' * \gamma * y_1[]) \\
&\quad - 2 * \alpha' * \beta * y_1[t] + \gamma^2 * \beta * y_2[] - \gamma^2 * y_2[t] * k_3 * k_4 * \gamma^2 * \alpha' * Q^7 + (\alpha * \alpha' * y_1[t] \\
&\quad - \gamma * \beta^2 * y_2[] + 2 * \gamma * \beta * y_2[t] + \alpha' * \gamma^2 * y_2[] - \gamma * y_2[t, t] - \alpha * \alpha' * \beta * y_1[]) * k_2 * k_4 * \gamma^2 * \alpha' * Q^6 \\
&\quad + (y_1[] * \alpha' * \alpha^2 - 3 * \beta^2 * y_2[t] + 3 * \beta * y_2[t, t] - \alpha' * \gamma * \beta y_2[]) \\
&\quad + \alpha' * \gamma * y_2[t] + \alpha * \gamma * y_2[t] + \beta^3 * y_2[] - y_2[t, t, t] - \alpha * \gamma * \beta * y_2[]) * k_1 * k_4 * \gamma^2 * \alpha' * Q^5 \\
&= 0
\end{aligned} \tag{6.94}$$

et

$$\begin{aligned}
 \tilde{p}_2 &= -(\gamma^3 * k_4^2 * Q^7 - \gamma^2 * k_4 * Q^5 * k_2 * \alpha' + \gamma * k_3 * Q^3 * \alpha'^2 * k_1 - k_1^2 * \alpha * \alpha'^2) * l[] \\
 &+ \gamma * y_2[t, t] * k_1 * \alpha' - y_1[t] * \alpha * \alpha'^2 * k_1 + \beta * y_1[] * \alpha * \alpha'^2 * k_1 - 2 * \gamma * \beta * y_2[t] * k_1 * \alpha' \\
 &- \gamma * k_4 * Q^3 * y_1[t, t] * \alpha' + \gamma^2 * k_4 * Q^3 * y_1[] * \alpha' * \alpha + 2 * \gamma * k_4 * Q^3 * \beta * y_1[t] * \alpha' \\
 &- \gamma * k_4 * Q^3 * \beta^2 * y_1[] * \alpha' - \gamma^3 * k_4 * Q^3 * y_2[] * \beta + \gamma^3 * k_4 * Q^3 * y_2[t] \\
 &+ \gamma * \beta^2 * y_2[] * k_1 * \alpha' - \gamma^2 * y_2[] * \alpha'^2 * k_1 \\
 &= 0.
 \end{aligned} \tag{6.95}$$

Le polynôme (6.94) est simplifiable par Q^5 et k_4 , d'où

$$\begin{aligned}
 \tilde{p}_1 &= (-\gamma^3 * y_2[] + y_1[t, t, t] - \beta^3 * y_1[] - 3 * \beta * y_1[t, t] + 3 * \beta^2 * y_1[t] \\
 &+ 2 * \alpha * \gamma \beta * y_1[] - 2 * \alpha * \gamma * y_1[t]) * \gamma^2 * \alpha' * Q^3 + (\alpha' * \beta^2 * y_1[] + \alpha' * y_1[t, t] \\
 &- \alpha * \alpha' * \gamma * y_1[] - 2 * \alpha' * \beta * y_1[t] + \gamma^2 * \beta * y_2[] - \gamma^2 * y_2[t]) * k_3 * \gamma^2 * \alpha' * Q^2 \\
 &+ (\alpha * \alpha' * y_1[t] - \gamma * \beta^2 * y_2[] + 2 * \gamma * \beta * y_2[t] + \alpha' * \gamma^2 * y_2[] - \gamma * y_2[t, t] \\
 &- \alpha * \alpha' * \beta * y_1[]) * k_2 * \gamma^2 * \alpha' * Q + (y_1[] * \alpha' * \alpha^2 - 3 * \beta^2 * y_2[t] + 3 * \beta * y_2[t, t] \\
 &- \alpha' * \gamma * \beta y_2[] + \alpha' * \gamma * y_2[t] + \alpha * \gamma * y_2[t] + \beta^3 * y_2[] - y_2[t, t, t] - \alpha * \gamma * \beta * y_2[]) * k_1 * \gamma^2 * \alpha' \\
 &= 0.
 \end{aligned} \tag{6.96}$$

Pour prouver l'identifiabilité de Q , il suffit de montrer l'indépendance des coefficients se trouvant devant les puissances de Q , c'est à dire que le déterminant formé à partir de ces coefficients au sens de l'algèbre différentielle n'appartient pas à l'idéal I_θ^{es} . Pour ce faire, la fonction `belong_to` se trouvant dans le package `difalg` nous a permis de vérifier cette indépendance, donc Q est globalement identifiable. Enfin, de (6.95), on déduit l'identifiabilité de l , soit :

$$\begin{aligned}
 l &= -(\gamma * y_2[t, t] * k_1 * \alpha' - y_1[t] * \alpha * \alpha'^2 * k_1 + \beta * y_1[] * \alpha * \alpha'^2 * k_1 - 2 * \gamma * \beta * y_2[t] * k_1 * \alpha' \\
 &- \gamma * k_4 * Q^3 * y_1[t, t] * \alpha' + \gamma^2 * k_4 * Q^3 * \alpha * y_1[] * \alpha' + 2 * \gamma * k_4 * Q^3 * \beta * y_1[t] * \alpha' \\
 &- \gamma * k_4 * Q^3 * y_1[t, t] * \alpha' + \gamma^2 * k_4 * Q^3 * y_1[] * \alpha' * \alpha + 2 * \gamma * k_4 * Q^3 * \beta * y_1[t] * \alpha' \\
 &- \gamma * k_4 * Q^3 * \beta^2 * y_1[] * \alpha' - \gamma^3 * k_4 * Q^3 * y_2[] * \beta + \gamma^3 * k_4 * Q^3 * y_2[t] \\
 &+ \gamma * \beta^2 * y_2[] * k_1 * \alpha' - \gamma^2 * y_2[] * \alpha'^2 * k_1) / (\gamma^3 * k_4^2 * Q^7 - \gamma^2 * k_4 * Q^5 * k_2 * \alpha' \\
 &+ \gamma * k_3 * Q^3 * \alpha'^2 * k_1 - k_1^2 * \alpha * \alpha'^2). \blacksquare
 \end{aligned} \tag{6.97}$$

6.3.2 La condition initiale est connue

Dans ce cas, nous avons prouvé que quel que soit le nombre de points de discrétisation en espace, un seul point d'observation était nécessaire pour prouver l'identifiabilité de λ et a . Pour cela, nous avons tout d'abord établi la proposition suivante :

Proposition 11 Soit $N > 1$ un entier donné et le système :

$$(Sd2'_N) \begin{cases} \dot{v}_1(t) = \beta v_1(t) + \gamma v_2(t) + k_1 l(t) Q, \\ \dot{v}_i(t) = \alpha v_{i-1}(t) + \beta v_i(t) + \gamma v_{i+1}(t) + k_i l(t) Q^i, \quad i=2, \dots, N-1, \\ \dot{v}_N(t) = \alpha' v_{N-1}(t) + \beta v_N(t) + k_N l(t) Q^N, \\ y = v_N, \\ \dot{Q} = 0 \end{cases} \quad (6.98)$$

tel que $\alpha, \alpha', \beta, \gamma$ soient non nuls et l une fonction suffisamment régulière. Si on suppose avoir le point d'observation $y = v_N$, le polynôme paramètre-sortie de la présentation caractéristique obtenue à partir du radical de l'idéal engendré par $(Sd2'_N)$ et muni de l'ordre d'élimination

$$[Q] \prec [l, y] \prec [\{v_i\}_{1 \leq i \leq N-1}]$$

est de la forme :

$$f_N(t) + \sum_{i=0}^{N-1} c_{N,i} l^{(i)}(t) = 0, \quad (6.99)$$

avec $(c_{N,i})_{i=0, \dots, N-1}$ une suite de réels dépendant de Q ; $f_N(t)$ une fonction linéaire en y et ses dérivées.

Démonstration : Pour simplifier les calculs, posons $R_i = k_i Q^i$ pour tout entier $i \in [1, N]$. La suite de réels $c_{N,i}$ et la fonction f_N sont définis dans le lemme suivant démontrés dans l'annexe 4, lemme 6 :

Lemme 3

Pour tout entier $r \in [1, N]$, on a les égalités suivantes :

$$\alpha' \alpha^{r-1} v_{N-r} = g_{r,N}(t) + \sum_{i=0}^{r-1} c_{r,i} l^{(i)}(t), \quad (6.100)$$

avec $g_{r,N}(t)$ une fonction linéaire en v_N et ses dérivées définie par la relation de récurrence

$$\begin{cases} g_{1,N} = \dot{v}_N - \beta v_N, \\ g_{2,N} = \ddot{v}_N - 2\beta \dot{v}_N + (\beta^2 - \alpha' \gamma) v_N, \\ g_{r+1,N} = \dot{g}_{r,N} - \beta g_{r,N} - \alpha \gamma g_{r-1,N}. \end{cases} \quad (6.101)$$

et les suites $(c_{r,i})$ définies par :

★ pour $r = 1$:

$$c_{1,0} = -R_N, \quad (6.102)$$

★ pour $r = 2$:

$$\begin{cases} c_{2,0} = \beta R_N - \alpha' R_{N-1}, \\ c_{2,1} = -R_N. \end{cases} \quad (6.103)$$

★ pour $r \in [3, N]$:

$$c_{r,r-1} = -R_N, \quad (6.104)$$

$$c_{r,0} = -\gamma\alpha c_{r-2,0} - \beta c_{r-1,0} - \alpha' \alpha^{r-2} R_{N-r+1}, \quad (6.105)$$

$$c_{r,i} = -\alpha\gamma c_{r-2,i} - \beta c_{r-1,i} + c_{r-1,i-1}, \text{ pour } i = 1, \dots, r-3, \quad (6.106)$$

$$c_{r,r-2} = c_{r-1,r-3} - \beta c_{r-1,r-2}, \quad (6.107)$$

★ pour $r \in [3, N]$:

$$c_{r,r-2} = c_{2,0} - (r-2)\beta c_{2,1}. \quad (6.108)$$

Comme $v_0 = 0$, pour $r = N$, (6.100) se récrit :

$$0 = g_{N,N}(t) + \sum_{i=0}^{N-1} c_{N,i} l^{(i)}(t), \quad (6.109)$$

Ainsi, en posant $f_N(t) = g_{N,N}(t)$, on obtient le polynôme paramètre-sortie (6.99). ■

Le théorème suivant peut alors être démontré :

Théorème 11 Supposons que $\dot{v}_N(0) - \alpha' v_{N-1}(0) - \beta v_N(0) > 0$ et que $\lambda(0) = \lambda_0 > 0$, $v_i(0) \geq 0$ pour $i = 1, \dots, N$ soient connus. Alors, si on observe $y = v_N$, le modèle $(Sd2'_N)$ est identifiable en $(l, Q) \in \mathcal{L} \times \mathbb{R}^+$, donc $\lambda \in \mathcal{L}$ et $a \in \mathbb{R}$ également.

Les hypothèses faites signifient que l'on suppose connaître la pollution et le débit au temps initial, ce temps initial étant choisi pour que l'hypothèse $\dot{v}_N(0) - \alpha' v_{N-1}(0) - \beta v_N(0) > 0$ soit vérifiée. En fait, lorsque la concentration de polluant augmente dans la rivière, on peut considérer qu'elle est toujours vraie. En effet, d'après la condition de Neumann, on peut dire que $v_{N-1}(0) \simeq v_N(0)$, d'où :

$$\dot{v}_N(0) - \alpha' v_{N-1}(0) - \beta v_N(0) \simeq \dot{v}_N(0) + \left(\frac{D}{h^2} + R\right)v_N(0) > 0. \quad (6.110)$$

Démonstration : En reprenant la proposition 11 et le lemme 3, on trouve que le polynôme paramètre-sortie trouvé avec l'ordre d'élimination $[Q] \prec [l, y] \prec [\{v_i\}_{1 \leq i \leq N-1}]$ est de la forme :

$$f_N(t) + \sum_{i=0}^{N-1} c_{N,i} l^{(i)}(t) = 0. \quad (6.111)$$

L'équation (6.111) est une équation différentielle linéaire d'ordre $N-1$ ($c_{N,N-1} \neq 0$) dont nous avons vérifié, dans la proposition 14 de l'annexe 4, que les coefficients $c_{N,i}$ ne dépendent que des constantes du système et de Q .

Nous allons voir qu'il est possible de déterminer a et $(l(0), l'(0), \dots, l^{(N-1)}(0))$ à partir des

conditions initiales et de l'observation. Pour cela, nous allons reprendre la dernière équation prise en 0 :

$$\dot{v}_N(0) = \alpha' v_{N-1}(0) + \beta v_N(0) + k_N l(0) Q^N. \quad (6.112)$$

Rappelons que $l(0) = c\lambda(0)e^{-\frac{a^2}{\sigma^2}}$ avec $c = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}}$ et que $Q = e^{\frac{2ah}{\sigma^2}}$, $k_N = e^{-\frac{L^2}{\sigma^2}}$, d'où :

$$e^{-\frac{(a-L)^2}{\sigma^2}} = \frac{\dot{v}_N(0) - \alpha' v_{N-1}(0) - \beta v_N(0)}{c\lambda(0)}, \quad (6.113)$$

car $\lambda(0) > 0$. Ceci implique que a est solution de :

$$(a-L)^2 + \sigma^2 \log \left(\frac{\dot{v}_N(0) - \alpha' v_{N-1}(0) - \beta v_N(0)}{c\lambda(0)} \right) = 0. \quad (6.114)$$

a étant réel et $0 < \frac{\dot{v}_N(0) - \alpha' v_{N-1}(0) - \beta v_N(0)}{c\lambda(0)} \leq 1$ d'après l'équation (6.113), nous en déduisons que le discriminant de cette équation est positif ou nul. Ainsi, si $\dot{v}_N(0) - \alpha' v_{N-1}(0) - \beta v_N(0) = c\lambda(0)$, la seule solution est $a = L = x_N$, c'est à dire que la source polluante est située en le point d'observation. Autrement, il y a deux solutions :

$$a_1 = L - \sqrt{\sigma^2 \left| \log \left(\frac{c\lambda(0)}{\dot{v}_N(0) - \alpha' v_{N-1}(0) - \beta v_N(0)} \right) \right|}, \quad (6.115)$$

et

$$a_2 = L + \sqrt{\sigma^2 \left| \log \left(\frac{c\lambda(0)}{\dot{v}_N(0) - \alpha' v_{N-1}(0) - \beta v_N(0)} \right) \right|}. \quad (6.116)$$

Ces deux solutions sont symétriques par rapport à x_N , ce qui s'explique par le fait qu'en théorie, on ne sait pas a priori si la pollution vient d'en amont ou d'en aval. De toute façon, on peut vérifier qu'au moins l'une des deux est dans notre intervalle d'étude et il faudra s'assurer en pratique qu'il n'y a pas de sources susceptibles de polluer en aval trop près de notre point d'observation. On déduit de cette étude que la position de la source de pollution ne dépend que de l'observation et du débit à l'instant initial. Ainsi, comme les $(c_{N,i})_{i=0,\dots,N-1}$ ne dépendent que des $(R_i)_{i \in [1,N]}$, donc de Q et des constantes du système, ces coefficients sont connus.

Il reste maintenant à établir que la condition initiale $(l(0), \dot{l}(0), \dots, l^{(N-1)}(0))$ peut se déterminer à partir de la condition initiale $v_i(0)$ pour $i = 1, \dots, N$ et de l'observation. Remarquons déjà que la connaissance de la position et du débit à l'instant initial donnent $l(0)$ puisque $l(0) = c\lambda(0)e^{-\frac{a^2}{\sigma^2}}$. Montrons alors la propriété suivante par récurrence :

P(i) : " $l^{(i-1)}(0)$ et $(v_{N-j-1}^{(i-j-1)}(0))_{j=-1,0,\dots,i-2}$ sont connus" pour $i \in [2, N]$.

- Pour montrer P(2), nous allons reprendre la dérivée de la Nème équation et la (N-1)ème équation toutes les deux prises en 0. Cela donne :

$$\begin{cases} \ddot{v}_N(0) &= \alpha' \dot{v}_{N-1}(0) + \beta \dot{v}_N(0) + k_N l'(0) Q^N, \\ \dot{v}_{N-1}(0) &= \alpha v_{N-2}(0) + \beta v_{N-1}(0) + \gamma v_N(0) + k_{N-1} l(0) Q^{N-1}. \end{cases} \quad (6.117)$$

Ces deux équations conduisent alors à :

$$\ddot{v}_N(0) = \alpha' \alpha v_{N-2}(0) + \alpha' \beta v_{N-1}(0) + \alpha' \gamma v_N(0) + \beta \dot{v}_N(0) + \alpha' k_{N-1} l(0) Q^{N-1} + k_N l'(0) Q^N \quad (6.118)$$

soit

$$l'(0) = \frac{\ddot{v}_N(0) - \alpha' \alpha v_{N-2}(0) - \alpha' \beta v_{N-1}(0) - \alpha' \gamma v_N(0) - \beta \dot{v}_N(0) - \alpha' k_{N-1} l(0) Q^{N-1}}{k_N Q^N} \quad (6.119)$$

Comme la fonction v_N est la fonction d'observation, ses dérivées sont bien déterminées. Donc $l'(0)$ est connu de façon explicite et d'après la deuxième équation de (6.117), $\dot{v}_{N-1}(0)$ est fonction de l'observation, $l(0)$, Q et des conditions initiales, donc est bien connu.

- Supposons maintenant la propriété vraie jusqu'au rang $i_0 \in [2, N-1]$, i.e $l^{(i_0-1)}(0)$ ainsi que $v_{N-j-1}^{(i_0-j-1)}(0)$ pour $j = -1, 0, \dots, i_0 - 2$ sont connus. Montrons que l'on peut en déduire $l^{(i_0)}(0)$, $v_{N-j-1}^{(i_0-j)}(0)$ pour $j = -1, \dots, i_0 - 1$.

La dérivée i_0 ème de la dernière équation prise en 0 est égale à :

$$v_{N-1}^{(i_0+1)}(0) = \alpha' v_{N-1}^{(i_0)}(0) + \beta v_N^{(i_0)}(0) + k_N l^{(i_0)}(0) Q^N, \quad (6.120)$$

On en déduit que si $v_{N-1}^{(i_0)}(0)$ est connu, $l^{(i_0)}(0)$ le sera également, c'est ce que nous allons prouver. La démonstration va consister à partir de la dernière équation, qui sera dérivée i_0 fois, puis de remonter dans le système $(Sd2_N)$ en dérivant chacune des équations une fois de moins par rapport à la précédente, chacune d'elle étant prise en 0. L'hypothèse de récurrence permettra de conclure que toutes les dérivées intervenant dans ce processus sont connues. On a donc le système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{v}_{N-i_0}(0) = \alpha v_{N-i_0-1}(0) + \beta v_{N-i_0}(0) + \gamma v_{i_0}(0) + k_{N-i_0} l(0) Q^{N-i_0}. \\ \ddot{v}_{N-i_0+1}(0) = \alpha \dot{v}_{N-i_0}(0) + \beta \dot{v}_{N-i_0+1}(0) + \gamma \dot{v}_{N-i_0+2} + k_{N-i_0+1} \dot{l}(0) Q^{N-i_0+1} \\ \dots \\ v_{N-1}^{(i_0)}(0) = \alpha v_{N-2}^{(i_0-1)}(0) + \beta v_{N-1}^{(i_0-1)}(0) + \gamma v_{i_0}^{(i_0-1)}(0) + k_{N-1} l^{(i_0-1)}(0) Q^{N-1}, \end{array} \right. \quad (6.121)$$

Ces expressions ont pour forme générale :

$$v_{N-k+1}^{(i_0-k+2)}(0) = \alpha v_{N-k}^{(i_0-k+1)}(0) + \beta v_{N-k+1}^{(i_0-k+1)}(0) + \gamma v_{N-k+2}^{(i_0-k+1)}(0) + k_{N-k+1} l^{(i_0-k+1)}(0) Q^{N-k+1}. \quad (6.122)$$

Or les termes $v_{N-k+2}^{(i_0-k+1)}(0)$ (resp. $v_{N-k+1}^{(i_0-k+1)}(0)$ et $l^{(i_0-k+1)}(0)$) sont connus d'après l'hypothèse de récurrence appliquée au rang $i_0 - 1$ pour $j = k - 3 \in [-1, i_0 - 3]$ (resp. i_0 pour $j = k - 2 \in [0, i_0 - 2]$ et $1 \leq i_0 - k + 1 \leq i_0 - 1$).

Il reste à vérifier que $v_{N-k}^{(i_0-k+1)}(0)$ pour $k \in [2, i_0]$ est connu. Or, par hypothèse les $v_i(0)$ sont connus pour $i = 0, \dots, N$, donc d'après la première équation de (6.121), $\dot{v}_{N-i_0}(0)$ est connu. Puis, d'après la deuxième équation, on en déduit que $\ddot{v}_{N-i_0+1}(0)$ est connu. En arrivant à l'avant dernière équation il vient que $v_{N-2}^{(i_0-1)}(0)$ est bien déterminé. Ainsi, $v_{N-1}^{(i_0)}(0)$ est connu et donc $l^{(i_0)}(0)$ également. La propriété est donc bien vérifiée au rang $i_0 + 1$.

On en déduit que les dérivées de l en 0 sont connues donc $(l(0), l'(0), \dots, l^{(N-1)}(0))$ est entièrement déterminé.

Ainsi, on déduit l'identifiabilité de l de la résolution de l'équation différentielle (6.111) dont on connaît les conditions initiales. ■

Chapitre 7

Estimation d'une source de pollution

Dans ce chapitre, nous allons reprendre les deux cas étudiés dans le chapitre 6 : celui où le débit est constant et celui où il dépend du temps. A partir des études théoriques, nous allons chercher à faire une première estimation de la localisation et du débit d'une source de pollution accidentelle.

Dans le cas stationnaire, nous avons vu que pour avoir l'identifiabilité quel que soit le nombre de points de discrétisation, il fallait deux points d'observation lorsque les conditions initiales n'étaient pas prises en compte et un point d'observation sinon. Pour ce qui est du débit dépendant du temps, nous avons démontré l'identifiabilité du modèle quand les conditions initiales étaient connues, ceci quel que soit le nombre de points de discrétisation. Etant donné l'ordre important des dérivées qui intervient dans ce dernier cas, nous avons cherché une méthode performante pour les calculer. Nous avons opté pour une méthode proposée par M. Fliess et H. Sira-Ramirez. Celle-ci ne demande pas la connaissance des propriétés statistiques des signaux et des bruits. De plus, l'estimation des dérivées repose sur des formules explicites, ce qui conduit à des calculs très rapides.

7.1 Un problème de simulation

Rappelons que dans le chapitre précédent, nous avons établi la solution de l'équation parabolique qui s'écrit :

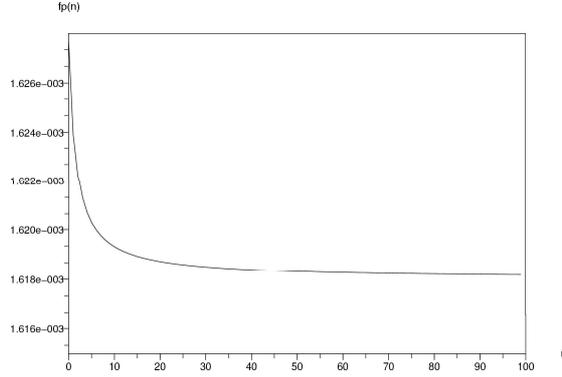
$$u(t, x) = e^{-\nu x} \left(\sum_{n \geq 0} (g, w_n) e^{-\mu_n t} w_n(x) + w_n(a) w_n(x) e^{\nu a} \int_0^t \lambda(s) e^{-\mu_n(t-s)} ds \right). \quad (7.1)$$

Prenons par exemple, le cas particulier $g \equiv 0$, $\lambda \equiv 1$ et calculons la concentration en $x = L$ quand $a = 600m$. Prenons $L = 1000m$, $V = 0.66m/s$, $R = 10^{-5}/s$, $D = 5m^2/s$. (7.1) se récrit :

$$u(t, L) = \sum_{n \geq 0} e^{\nu(a-L)} w_n(a) w_n(L) \frac{1 - e^{-\mu_n t}}{\mu_n}, \quad (7.2)$$

Or, comme les premiers termes de la somme sont positifs et de l'ordre de $4 \cdot 10^6$, il faudrait pouvoir les compenser avec des termes négatifs provenant du produit $f(n) = w_n(L)w_n(a)$. Mais, étant donné la faible décroissance de cette fonction (cf graphe 7.1), nous n'avons pas pu prendre suffisamment de termes.

Nous avons donc décidé de reprendre le système semi-discrétisé pour lequel nous avons fait une étude d'identifiabilité dans le chapitre précédent. Rappelons qu'il avait été obtenu à partir

FIG. 7.1 – Graphe du produit $w_n(a)w_n(x)$

du système

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t, \cdot) + V \frac{\partial u}{\partial x}(t, \cdot) - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, \cdot) + Ru(t, \cdot) = f(t, \cdot) \text{ dans } [0, T] \times]0, L[, \\ u(0, x) = g(x) \text{ dans }]0, L[, \\ u(t, 0) = 0, \\ \frac{\partial u}{\partial x}(t, L) = 0, \end{cases} \quad (7.3)$$

où $f(t, x) = \frac{\lambda(t)}{\sigma\sqrt{\pi}} e^{-\frac{(x-a)^2}{\sigma^2}}$ que nous avons discrétisé en espace par un schéma aux différences finies centrées, d'où

$$\begin{cases} u_h'(t, \theta) = A_h u_h(t, \theta) + b_h(t, \theta) + h\epsilon_h(u)(t, \theta), \text{ pour tout } t \in [0, T], \\ u_h(0, \theta) = g_h, \end{cases} \quad (7.4)$$

où $\theta = (l, Q)$,

$$A_h = \begin{pmatrix} \beta & \gamma & 0 & \dots & 0 \\ \alpha & \beta & \gamma & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \alpha & \beta & \gamma \\ 0 & \dots & 0 & \alpha' & \beta \end{pmatrix}, \quad b_h(t, \theta) = \begin{pmatrix} k_1 l Q \\ \vdots \\ k_N l Q^N \end{pmatrix}, \quad u_h(t, \theta) = \begin{pmatrix} u_{h,1}(t) \\ \vdots \\ u_{h,N}(t) \end{pmatrix},$$

$$\epsilon_h(u)(t, \theta) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x_1 + \varphi_{1,1}h) - \frac{h}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(t, x_1 + \varphi_{2,1}h) \\ \vdots \\ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x_N + \varphi_{1,N}h) - \frac{h}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(t, x_N + \varphi_{2,N}h) \end{pmatrix}.$$

En négligeant les termes d'ordre plus grand que 2, nous avons alors obtenu :

$$\begin{cases} v_h'(t, \theta) = A_h v_h(t, \theta) + b_h(t, \theta), \text{ pour tout } t \in [0, T], \\ v_h(0, \theta) = g_h. \end{cases} \quad (7.5)$$

7.2 Erreur commise lors de la semi-discrétisation du système

Dans cette partie, nous allons comparer l'erreur entre les systèmes (7.4) et (7.5). Pour cela, nous allons supposer la solution u du problème (7.4) suffisamment régulière. Cette hypothèse est justifiée par le choix d'utiliser l'algèbre différentielle pour étudier l'identifiabilité du problème. Nous avons obtenu le théorème suivant :

Théorème 12 Soient u_h (resp. v_h) la solution du système (7.4) (resp. (7.5)). Si A_h est diagonalisable et si ses valeurs propres $(\lambda_i)_{i=1,\dots,N}$ ont toutes une partie réelle négative alors :

$$\exists C > 0, \exists K_h > 0, \|u_h(t) - v_h(t)\|_\infty \leq \frac{|h| CK_h}{R}, \quad (7.6)$$

Démonstration : Les solutions u_h et v_h sont égales à :

$$u_h(t) = e^{tA_h} g_h + \int_0^t e^{(t-\xi)A_h} (b_h(\xi) + h\epsilon_h(u)(\xi)) d\xi, \quad (7.7)$$

et

$$v_h(t) = e^{tA_h} g_h + \int_0^t e^{(t-\xi)A_h} b_h(\xi) d\xi. \quad (7.8)$$

En soustrayant (7.7) et (7.8), nous obtenons :

$$\begin{aligned} \|u_h(t) - v_h(t)\|_\infty &\leq \left\| \int_0^t e^{(t-\xi)A_h} h\epsilon_h(u)(\xi) d\xi \right\|_\infty, \\ &\leq |h| \int_0^t \|e^{(t-\xi)A_h}\|_\infty \|\epsilon_h(u)(\xi)\|_\infty d\xi. \end{aligned} \quad (7.9)$$

Comme u est supposée suffisamment régulière, en particulier, elle est supposée 4 fois continûment dérivable par rapport à la variable x et chacune de ces dérivées est supposée continue par rapport au temps,

$$\|\epsilon_h(u)(t)\|_\infty = \max_{i \in [0, N]} \left| \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x_i + \theta_{1,i}) + \frac{h}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(t, x_i + \theta_{2,i}) \right|$$

peut alors être majoré par

$$\frac{1}{2} \max_{x \in [0, L]} \left| \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) \right| + \frac{|h|}{12} \max_{x \in [0, L]} \left| \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(t, x) \right|,$$

d'où

$$\|\epsilon_h(u)(t)\|_\infty \leq \frac{1}{2} \max_{t \in [0, T]} \max_{x \in [0, L]} \left| \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) \right| + \frac{|h|}{12} \max_{t \in [0, T]} \max_{x \in [0, L]} \left| \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(t, x) \right|. \quad (7.10)$$

Notons C le membre de droite.

De plus, comme toutes les valeurs propres $(\lambda_i)_{i=1,\dots,N}$ de A_h ont une partie réelle négative, nous avons :

$$\|e^{tA_h}\|_\infty \leq K_h e^{-\alpha_h t}, \quad (7.11)$$

où $\alpha_h = -\frac{\max(\operatorname{Re}(\lambda_i))}{2} > 0$ et $K_h = \|P_h\|_\infty \|P_h^{-1}\|_\infty$, P_h étant la matrice de vecteurs propres associée à la matrice A_h .

Ce qui donne :

$$\begin{aligned} \|u_h(t) - v_h(t)\|_\infty &\leq |h| CK_h \int_0^t e^{-(t-\xi)\alpha_h} d\xi, \\ &\leq \frac{|h| CK_h}{\alpha_h}. \end{aligned} \quad (7.12)$$

Or, d'après le théorème de Gershgorin

$$\sigma(A_h) \subseteq \cup_{i=1}^N R_i \text{ avec } R_i = \{z \in \mathcal{C} : |z - a_{ii}| \leq \sum_{j=1, j \neq i}^N |a_{ij}|\}.$$

Ici, nous avons deux disques :

$$R_1 = \{z \in \mathcal{C} : |z - \beta| \leq \alpha + \gamma\},$$

$$R_2 = \{z \in \mathcal{C} : |z - \beta| \leq \alpha' + \gamma\}.$$

Donc, si λ_i est valeur propre de A_h , elle vérifie : soit

$$\frac{D}{h^2} + R \leq |\operatorname{Re}(\lambda_i)|,$$

soit

$$R \leq |\operatorname{Re}(\lambda_i)|.$$

Comme

$$\alpha_h = -\max_i(\operatorname{Re}(\lambda_i)) = \min_i(-\operatorname{Re}(\lambda_i)) = \min_i |\operatorname{Re}(\lambda_i)|,$$

soit

$$\alpha_h \geq \frac{D}{h^2} + R,$$

soit

$$\alpha_h \geq R.$$

Ainsi, la majoration (7.12) se récrit :

$$\|u_h(t) - v_h(t)\|_\infty \leq \frac{|h| CK_h}{R}. \blacksquare \quad (7.13)$$

La constante K_h n'est autre que le conditionnement de la matrice P_h de vecteurs propres de A_h . Numériquement, nous avons travaillé avec le système adimensionné et nous avons constaté que le conditionnement était inférieur à 100 quand $N + 1 < 160$. En particulier, il valait 2 lorsque $N + 1 = 150$, ce que nous avons pris dans nos applications numériques. De plus, nous avons constaté que les valeurs propres de A_h avaient toutes une partie réelle négative.

7.3 Le modèle dont le débit est indépendant du temps

Dans cette partie, nous allons supposer le débit constant. Dans le but de faire une première estimation du débit et de la source de pollution, nous allons utiliser l'étude théorique de 6.2.

7.3.1 Données

Nous avons supposé observer une rivière d'une longueur de $1000m$ et ayant les caractéristiques suivantes : $L = 1000m$, $V = 0.66m/s$, $R = 10^{-5}/s$, $D = 5m^2/s$, $\lambda = 1g/m^2/s$. Pour la simulation des observations, nous avons repris le système (7.5) avec $N + 1 = 150$ et $\sigma < 0.1$. Puis, nous avons résolu ce système d'équations aux dérivées ordinaires avec la fonction ode de scilab qui nous a fourni le signal \bar{y} . Celui-ci a été bruité, le bruit suivant une loi aléatoire de moyenne \bar{y} et de variance $(s\bar{y})^2$. Le coefficient s est calculé de telle sorte que l'erreur relative soit au maximum égale à 0.01 (resp. 0.05) avec une erreur de probabilité inférieure à 0.03 : il sera noté s_1 (resp. s_2). Nous supposons qu'une pollution accidentelle a lieu et qu'on l'étudie pendant $25mn$, soit $1500s$. Les prélèvements d'eau sont faits toutes les $75s$ c'est à dire que les mesures sont supposées être faites aux instants $(t_j)_{1 \leq j \leq M}$; où $M = 20$. Pour la résolution numérique, nous avons considéré le système adimensionné suivant :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(s, y) + \tilde{V} \frac{\partial u}{\partial x}(s, y) - \tilde{D} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(s, y) + \tilde{R}u(s, y) = T\lambda\delta_{\tilde{a}}(y) \text{ dans } [0, 1] \times [0, 1], \quad (7.14)$$

$$\begin{aligned} u(s, 0) &= 0, \\ \frac{\partial u}{\partial x}(s, 1) &= 0, \end{aligned} \quad (7.15)$$

avec $\tilde{V} = \frac{VT}{L}$, $\tilde{D} = \frac{DT}{L^2}$, $\tilde{R} = RT$, $\tilde{a} = \frac{a}{L}$.

Comme nous l'avons vu dans la partie théorique, des dérivées d'ordre très important des observations sont présentes dans les polynômes paramètres-sorties. Après plusieurs calculs de dérivées utilisant les B-splines jusqu'à l'ordre 5 nous avons constaté numériquement que les dérivées d'ordre compris entre 3 et 5 étaient presque nulles. Nous avons donc décidé de négliger les dérivées à partir de l'ordre 3.

7.3.2 La condition initiale n'est pas connue

2 points d'observation :

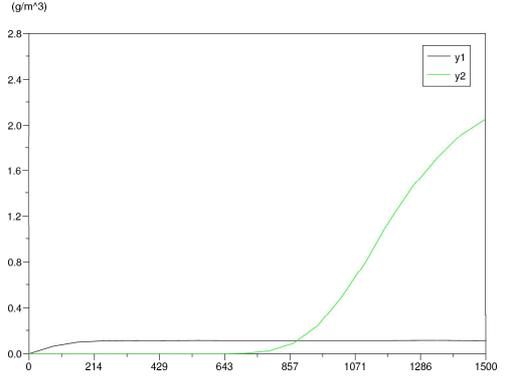
Nous avons pris 30 points de discrétisation et les observations sont données par $y_1 = u(x(5))$ qui correspond à 200m et $y_2 = u(x(N+1))$. De plus, nous supposons que les entreprises polluantes sont situées entre 200m et 800m. Nous observons par exemple les courbes 7.2 lorsque le bruit a pour variance $(s_2\bar{y})^2$ et si la source de pollution est localisée en $a = 230m$.

En étudiant les courbes, il apparaît que la pente traduit le temps qu'il faut pour que la pollution arrive jusqu'au point d'observation. Nous utiliserons cette remarque par la suite pour l'estimation de a .

Tout d'abord, étant donné les deux polynômes (6.66) de la présentation caractéristique, nous obtenons après simplification :

$$\left\{ \begin{aligned} l &= \frac{f_{N-q}(y_1(t), y_2(t))}{\sum_{i=1}^N c_{N,i} k_i Q^i} \\ \sum_{i=1}^N (c_{N,i} k_i f_N(y_1(t), y_2(t)) - c_{N-q,i} k_i f_{N-q}(y_1(t), y_2(t))) Q^{i-1} &= 0. \end{aligned} \right. \quad (7.16)$$

Pour estimer la position de la source de pollution, nous allons utiliser la seconde équation, dont le membre de gauche est un polynôme en Q et tel que ses coefficients dépendent de y_1 , y_2 et de leurs

FIG. 7.2 – Concentrations observées quand $a = 230m$.

dérivées. En théorie, nous devrions avoir un polynôme à coefficients constants puisque d'après (6.66), $f_N(y_1, y_2)$, $f_{N-q}(y_1, y_2)$ sont constants, mais les bruits introduits lors de la simulation font que ce n'est pas le cas. Aussi, nous avons d'abord résolu les deux problèmes de minimisation par moindres carrés suivants :

$$\min_c J_1(c) = \min_c \sum_{i=M_1}^{M_2} (f_{N-q}(y_1(t_i), y_2(t_i)) - c)^2, \quad (7.17)$$

et

$$\min_c J_2(c) = \min_c \sum_{i=M_1}^{M_2} (f_N(y_1(t_i), y_2(t_i)) - c)^2, \quad (7.18)$$

avec $4 \leq M_1 < M_2 \leq M$ et tels que M_1 et M_2 encadrent les pentes des courbes. Nous obtenons alors deux minima s_1 , s_2 respectivement, qui nous amènent à résoudre le polynôme suivant :

$$\sum_{i=1}^N (c_{N,i} k_i s_2 - c_{N-q,i} k_i s_1) Q^{i-1} = 0. \quad (7.19)$$

Les racines de ce dernier sont trouvées par scilab. A chaque simulation, nous avons obtenu une seule racine réelle Q . Ceci est dû à l'identifiabilité des paramètres. Cette racine réelle Q nous permet alors d'estimer la position $a = \frac{\sigma^2}{2h} \log(Q)$. Pour calculer l , nous avons repris la première équation de (7.16), soit

$$l = \frac{f_{N-q}(y_1(t), y_2(t))}{\sum_{i=1}^N c_{N,i} k_i Q^i}. \quad (7.20)$$

l étant constant, le terme de droite de (7.20) devrait l'être également. Toutefois, les erreurs numériques font que ce n'est pas le cas. Nous avons alors résolu le problème (7.17) avec $M_1 = 4$ et $M_2 = M$. Nous en déduisons alors $\lambda = \sigma \sqrt{\pi} l \exp(\frac{a^2}{\sigma^2})$.

Avant de donner les résultats numériques, remarquons que les expressions (7.19) et (7.20) dépendent du paramètre σ qu'il faut déterminer. Rappelons que son choix détermine l'approximation du Dirac donc, en théorie, il faudrait le prendre le plus petit possible, ce qui n'est pas possible étant donné les erreurs numériques introduites, par exemple, lors de l'estimation des dérivées ou lorsque l'on a choisi de négliger celles dont d'ordre était supérieur à 3. Par contre, nous avons remarqué que ceux qui donnaient les meilleurs résultats par rapport à l'erreur relative entre les observations simulées et les observations reconstruites se trouvaient dans l'intervalle $[10^{-2}; 10^{-1}]$. Soit alors $\tilde{\sigma}$ donné et $(a_{\tilde{\sigma}}, \lambda_{\tilde{\sigma}})$ la position et le débit calculés à partir de celui-ci. Pour déterminer les approximations $a_{\tilde{\sigma}}, \lambda_{\tilde{\sigma}}$ à garder quand $\tilde{\sigma} \in [10^{-2}; 10^{-1}]$, nous avons calculé $0.5 \left(\frac{\text{norm}(y_1 - y_{1\tilde{\sigma}})}{\text{norm}(y_1)} + \frac{\text{norm}(y_2 - y_{2\tilde{\sigma}})}{\text{norm}(y_2)} \right)$ où y_i (resp. $\tilde{y}_{i\tilde{\sigma}}$) est la concentration observée (resp. la concentration calculée à partir du système (7.5) avec σ remplacé par $\tilde{\sigma}$ et a, λ remplacés respectivement par $a_{\tilde{\sigma}}, \lambda_{\tilde{\sigma}}$). Finalement, nous proposons l'algorithme suivant :

Pour $\tilde{\sigma}$ de 0.01 à 0.1 faire

Calcul de $a_{\tilde{\sigma}}, \lambda_{\tilde{\sigma}}$ à partir de (7.19) et (7.20),

Calcul de $y_{1\tilde{\sigma}}, y_{2\tilde{\sigma}}$ à partir de (7.5),

Calcul de l'erreur relative $e_{\tilde{\sigma}} = 0.5 \left(\frac{\text{norm}(y_1 - y_{1\tilde{\sigma}})}{\text{norm}(y_1)} + \frac{\text{norm}(y_2 - y_{2\tilde{\sigma}})}{\text{norm}(y_2)} \right)$

Fin Pour

Recherche du minimum parmi les $e_{\tilde{\sigma}}$ d'où $\tilde{a}, \tilde{\lambda}$.

Cette méthode nous a permis d'obtenir une première estimation $(\tilde{\lambda}_1, \tilde{a}_1)$ (resp. $(\tilde{\lambda}_2, \tilde{a}_2)$) des paramètres à identifier pour s_1 (resp. s_2). L'algorithme de Levenberg-Marquardt, implémenté sous scilab sous le nom de lsqrsolve a été utilisé pour améliorer les résultats, d'où une deuxième valeur approchée de nos paramètres $(\bar{\lambda}, \bar{a})$. Etant donné la faible sensibilité des résultats aux bruits, nous avons utilisé comme valeur initiale pour l'algorithme de Levenberg-Marquardt $(\tilde{\lambda}_2, \tilde{a}_2)$. Les résultats sont présentés dans le tableau 7.1 ainsi que l'erreur relative commise sur la reconstruction des vecteurs d'observation, c'est à dire $0.5 \left(\frac{\text{norm}(y_1 - y_{1\tilde{\sigma}})}{\text{norm}(y_1)} + \frac{\text{norm}(y_2 - y_{2\tilde{\sigma}})}{\text{norm}(y_2)} \right)$.

(λ, a)	$(\tilde{\lambda}_1, \tilde{a}_1)$	$(\tilde{\lambda}_2, \tilde{a}_2)$	$(\bar{\lambda}, \bar{a})$	erreur relative sur l'observation
(1;254)	(0.2;254.5)	(0.2;254.6)	(1.06;254.01)	0.06
(1;308)	(0.39;301.66)	(0.39;301.65)	(0.98;309)	0.063
(1;325)	(0.49;331.8)	(0.48;331.69)	(0.96;323)	0.09
(1;333)	(0.491;329)	(0.486;331.69)	(1.1;332)	0.15
(1;403)	(0.16;391.3)	(0.159;391.23)	(0.95;401)	0.01
(1;445)	(0.43;431.36)	(0.43;431.28)	(0.97;443.9)	0.054
(1;523)	(0.45;524.53)	(0.449;525.55)	(0.88;521)	0.094
(1;566)	(6.5;796.8)	(6.5;796.9)	(0.96;568)	0.12
(1;597)	Pas de résultat	-	-	-
(1;634)	Pas de résultat	-	-	-

TAB. 7.1 - $(\lambda = 1, a \in [250, 650])$.

Une nette dégradation des résultats a lieu quand la source de pollution se rapproche de x_N . En effet, quand on regarde les courbes de concentrations de D.B.O quand $a = 566m$ (figure 7.3), on remarque que la première observation est trop loin de la source de pollution pour donner la moindre information. Ceci est du au coefficient R , lequel traduit la vitesse de dégradation.

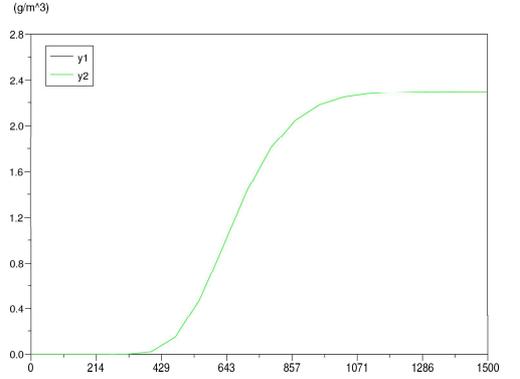


FIG. 7.3 – Concentrations observées quand $a = 566m$.

7.3.3 La condition initiale est connue

Le logiciel nous a donné le polynôme paramètre-sortie qui est de la forme (6.86). En prenant la dernière équation du système semi-discrétisé (7.5) en 0, il vient :

$$\dot{v}_N(0) = \alpha' v_{N-1}(0) + \beta v_N(0) + k_N l Q^N. \quad (7.21)$$

soit

$$l = \frac{\dot{v}_N(0) - \alpha' v_{N-1}(0) - \beta v_N(0)}{k_N Q^N}. \quad (7.22)$$

Posons $z = \frac{\dot{v}_N(0) - \alpha' v_{N-1}(0) - \beta v_N(0)}{k_N}$ et remplaçons l par $l = \frac{z}{Q^N}$ dans le polynôme paramètre sortie (6.86). Cette substitution donne un polynôme en Q dont l'un des coefficients dépend du temps :

$$\sum_{i=0}^{N-2} c_{N,i+1} k_{i+1} z Q^i + (f_N(y(t)) + c_{N,N} k_N z) Q^{N-1} = 0. \quad (7.23)$$

Pour nous ramener à un polynôme à coefficients constants, nous allons résoudre le problème de minimisation suivant :

$$\min_c J_1(c) = \min_c \sum_{i=M_1}^{M_2} (f_N(y(t_i)) - c)^2, \quad (7.24)$$

avec M_1, M_2 encadrant la pente de la courbe, d'où le minimum s . Il reste alors à trouver sous scilab les racines du polynôme :

$$\sum_{i=0}^{N-2} c_{N,i+1} k_{i+1} z Q^i + (s + c_{N,N} k_N z) Q^{N-1} = 0. \quad (7.25)$$

Puis l'expression (7.22) permet de déterminer l .

Comme dans le cas précédent, les expressions (7.22) et (7.25) dépendent du paramètre σ , inconnu et qu'il faut approcher. Notons le $\tilde{\sigma}$. Cette fois-ci, nous le faisons varier dans l'intervalle $[10^{-3}; 10^{-2}]$, et notons $(a_{\tilde{\sigma}}, \lambda_{\tilde{\sigma}})$ la position et le débit calculés à partir de $\tilde{\sigma}$. L'erreur relative utilisée dans cette section est égale à $\frac{norm(y - y_{\tilde{\sigma}})}{norm(y)}$ où y (resp. $y_{\tilde{\sigma}}$) est la concentration observée (resp. la concentration calculée à partir du système (7.5) et de $\tilde{\sigma}$). Finalement, nous proposons l'algorithme suivant :

Pour $\tilde{\sigma}$ de 0.001 à 0.01 faire

Calcul de $a_{\tilde{\sigma}}, \lambda_{\tilde{\sigma}}$ à partir de (7.19) et (7.20),

Calcul de $y_{\tilde{\sigma}}$ à partir de (7.5),

Calcul de l'erreur relative $e_{\tilde{\sigma}} = \left(\frac{norm(y - y_{\tilde{\sigma}})}{norm(y)} \right)$

Fin Pour

Recherche du minimum parmi les $e_{\tilde{\sigma}}$ d'où $\tilde{a}, \tilde{\lambda}$.

Cette méthode nous a permis d'obtenir une première estimation $(\tilde{\lambda}_1, \tilde{a}_1)$ (resp. $(\tilde{\lambda}_2, \tilde{a}_2)$) des paramètres à identifier pour s_1 (resp. s_2). L'algorithme de Levenberg-Marquardt a de nouveau été utilisé pour améliorer les résultats, d'où une deuxième valeur approchée de nos paramètres $(\bar{\lambda}, \bar{a})$. Comme précédemment, étant donné la faible sensibilité des résultats aux bruits, nous avons utilisé comme valeur initiale pour cet algorithme, $(\tilde{\lambda}_2, \tilde{a}_2)$. L'erreur relative est quant à elle calculée par rapport au vecteur d'observation, c'est à dire que l'on calcule $\frac{\|y - y_{\tilde{\sigma}}\|_2}{\|y\|_2}$. Les résultats sont présentés dans le tableau 7.2.

(λ, a)	$(\tilde{\lambda}_1, \tilde{a}_1)$	$(\tilde{\lambda}_2, \tilde{a}_2)$	$(\bar{\lambda}, \bar{a})$	erreur relative sur l'observation
(1;254)	(0.37;261.2)	(0.36;261.3)	(0,99;249)	0.01
(1;308)	(0.36;314)	(0.35;314.2)	(0,996;308)	0.004
(1;325)	(0.23;327)	(0.23;327.6)	(1,02;325)	0.02
(1;333)	(0.23;341.3)	(0.23;341)	(0,89;333)	0.11
(1;403)	(0.6;399)	(0.6;399)	(0.98;403)	0.02
(1;445)	(0.19;444)	(0.18;444.3)	(1.02;445)	0.02
(1;523)	(0.25;521)	(0.25;521)	(1.05;523)	0.01
(1;566)	(0.229;563.8)	(0.226;563.7)	(1.01;565)	0.01
(1;597)	(0.82;595.9)	(0.8;596)	(0.98;597)	0.02
(1;634)	(0.59;631.2)	(0.59;631.4)	(1.01;632)	0.01
(1;706)	(0.37;714.02)	(0.32;714.2)	(0.99;706)	0.01
(1;729)	(0.3;727.23)	(0.3;727.1)	(0.9;728)	0.1
(1;753)	(0.66;752.06)	(0.62;752.9)	(1.01;770)	0.0157

TAB. 7.2 - $(\lambda = 1, a \in [250, 760])$.

Les résultats sont bien meilleurs quand les conditions initiales sont prises en compte puisque la perte d'information est moins importante.

Conclusion : Le choix d'ajouter la condition initiale plutôt qu'un point d'observation en amont de la source de pollution a donné de bien meilleurs résultats. En effet, on est très vite limité dans le second cas puisque l'on perd énormément d'information lorsque l'on se trouve trop loin de la première observation.

7.4 Le modèle dont le débit est dépendant du temps

7.4.1 Données

Pour les simulations numériques, nous avons repris les données du début du paragraphe précédent soit $L = 1000m$, $V = 0.66m/s$, $R = 10^{-5}/s$, $D = 5m^2/s$, $\lambda = 1g/m^2/s$. Pour la simulation des observations, nous avons repris le système (7.5) avec $N + 1 = 150$ et $\sigma < 0.1$. Puis, nous avons résolu ce système d'équations aux dérivées ordinaires avec la fonction ode de scilab qui nous a donné fourni le signal \bar{y} . Celui-ci a été bruité, le bruit suivant une loi aléatoire de moyenne \bar{y} et de variance $(s\bar{y})^2$. Le coefficient s est calculé de telle sorte que l'erreur relative soit au maximum égale à 0.01 (resp. 0.05) avec une erreur de probabilité inférieure à 0.03 : il sera noté s_1 (resp. s_2).

Les mesures sont supposées être faites en les temps discrets $(t_i)_{1 \leq i \leq M}$; où M vaut 200 quand la durée d'étude est égale à 4 heures correspondant au modèle de pollution choisi. Le débit a été construit à partir de la fonction suivante :

$$\lambda(t) = \sum_{i=1}^3 3\alpha_i e^{-\beta_i(t-\tau_i)^2}, \quad (7.26)$$

avec $\alpha_1 = 1.2$, $\alpha_2 = 0.4$, $\alpha_3 = 0.6$, $\beta_1 = 10^{-6}$, $\beta_2 = 5.10^{-6}$, $\beta_3 = 10^{-6}$, $\tau_1 = 4500s$, $\tau_2 = 6500s$, $\tau_3 = 9000s$ et est représentée à la figure FIG. 7.4.

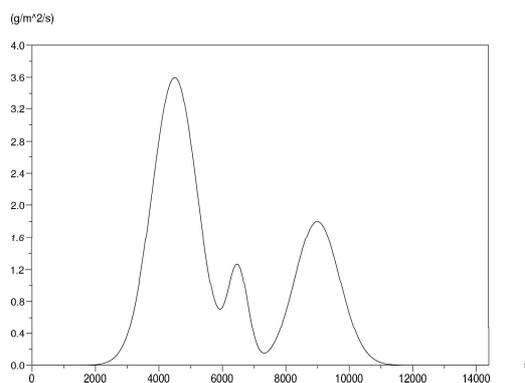


FIG. 7.4 – débit utilisé

7.4.2 La condition initiale n'est pas connue

Cette fois-ci, la discrétisation est très grossière (5 points) mais rappelons que pour prouver l'identifiabilité du système nous étions limité numériquement avec maple.

La position de la source de pollution, donnée par Q va être déterminée grâce au polynôme (6.96)

qui peut se récrire sous la forme :

$$p(y_1, y_2, \theta) = \sum_{j=1}^3 g_j(y_1, y_2) Q^j + g_0(y_1, y_2) = 0, \theta = (Q, Q^2, Q^3) \quad (7.27)$$

Considérons alors le critère :

$$J(Q) = \sum_{i=1}^M (p(y_1(t_i), y_2(t_i), \theta))^2, \quad (7.28)$$

qui se récrit sous la forme matricielle :

$$J(Q) = \| A\theta + b \|^2, \quad (7.29)$$

avec $A = (g_j(y_1(t_i), y_2(t_i)))_{i=1, \dots, M; j=1, \dots, 3}$, M étant le nombre de points de discrétisation en temps, $b = (g_0(y_1(t_1), y_2(t_1)), \dots, g_0(y_1(t_M), y_2(t_M)))$. Ce problème de minimisation est résolu grâce à l'algorithme QR.

Nous avons simulé différentes positions de la source de pollution et nous avons supposé que les courbes observées étaient bruitées en utilisant s_1 et s_2 à partir des courbes 7.5, 7.6, 7.7, 7.8, quand $a = 273m$, $a = 442m$, $a = 547m$, $a = 621m$ respectivement. Pour les courbes 7.6, 7.7, 7.8, nous ne voyons plus que la deuxième courbe d'observation y_2 . En effet, la première est quasiment nulle.

Pour résoudre numériquement le problème de minimisation associé à (7.29), il a fallu choisir σ , qui intervient dans les coefficients k_i en considérant $\tilde{\sigma}$ de façon décroissante jusqu'à ce que notre algorithme ne marche plus, c'est à dire lorsque nous avons une division par un infiniment petit quand nous utilisons l'algorithme QR.

Les résultats trouvés pour l'estimation de la position de la source de pollution sont donnés dans les tableaux 7.3, 7.4.

a	\tilde{a} évalués
273	312.15
442	442.96
547	471.08
621	471.08

TAB. 7.3 – estimation de la position pour s_1 .

a	\tilde{a} évalués
273	312.26
442	443
547	471.35
621	471.35

TAB. 7.4 – estimation de la position pour s_2 .

Ils sont loin d'être suffisants. Seules les deux premières estimations se trouvent dans le bon intervalle de discrétisation, soit $[250, 500]$. Cela est justifié par le peu de points de discrétisation en espace que nous avons pris au départ, et pour ce qui est des résultats de $a = 547$ et $a = 621$, ils s'expliquent par le fait que le premier point d'observation est situé trop loin de la source de pollution et il y a donc une importante perte d'information. Comme il ne paraît pas raisonnable de partir de ces estimations pour calculer le débit, nous allons nous placer dans la situation suivante : étant donné une source de pollution dont on connaît la position a et les observations y_1, y_2 observées, est-il possible de reconstruire le débit à partir du polynôme (6.97) ?

Dans cette expression intervient le choix $\tilde{\sigma}$ de σ . Pour l'estimer au mieux, nous sommes partis de l'expression (6.97), qui permet de calculer l . Nous avons fait varier $\tilde{\sigma}$ entre 0.01 et 0.1 tout en reconstruisant les observations, notées $y_{1\tilde{\sigma}}, y_{2\tilde{\sigma}}$. Puis, nous les avons comparées avec les

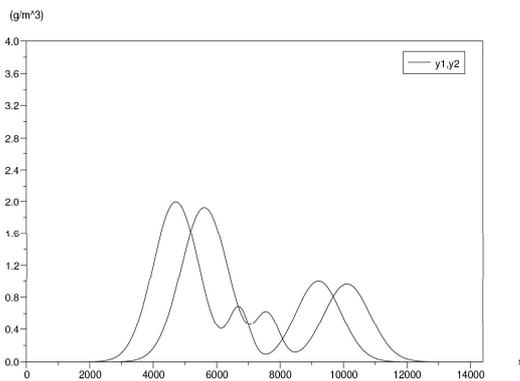


FIG. 7.5 – concentrations observées non bruitées quand $a = 273m$

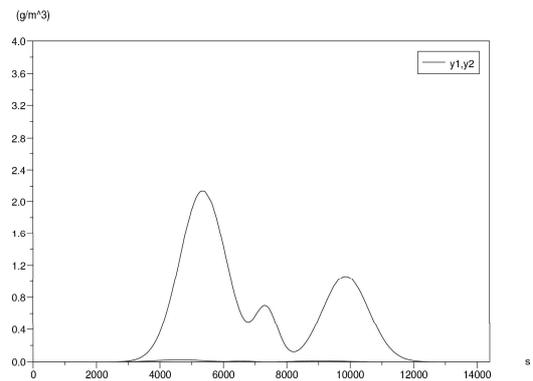


FIG. 7.6 – concentrations observées non bruitées quand $a = 442m$

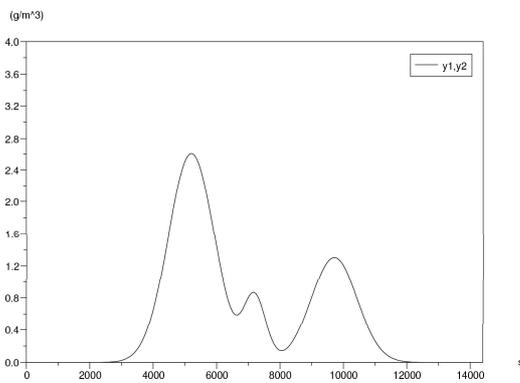


FIG. 7.7 – concentrations observées non bruitées quand $a = 547m$

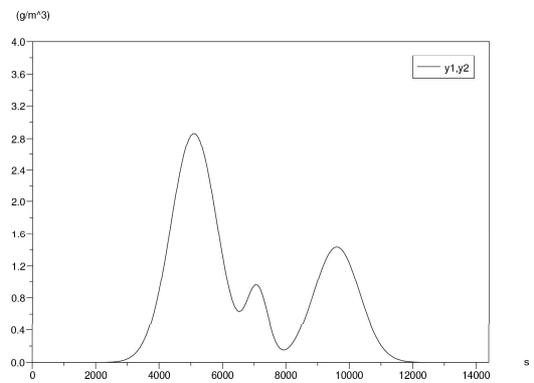
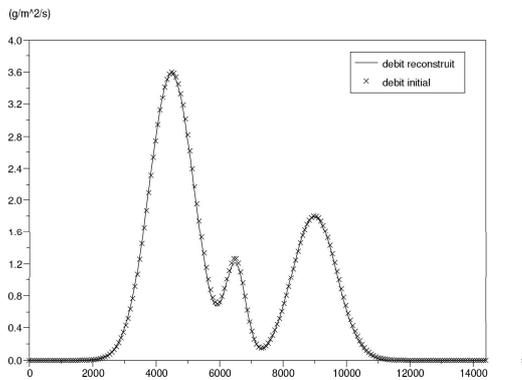
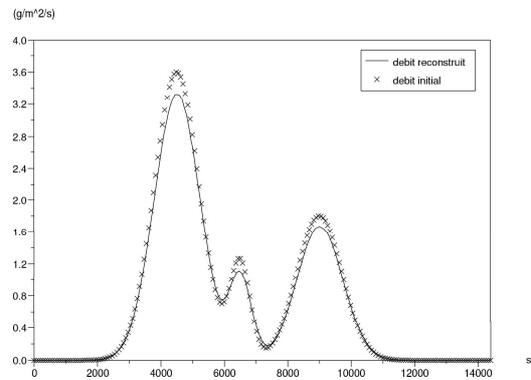
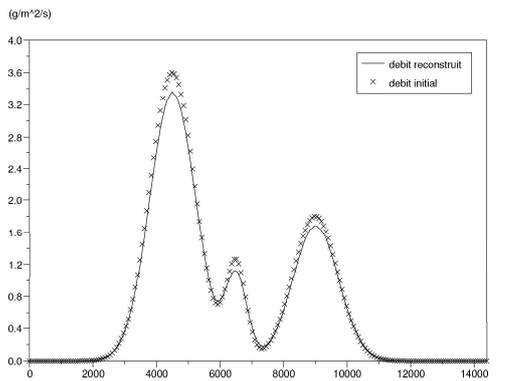


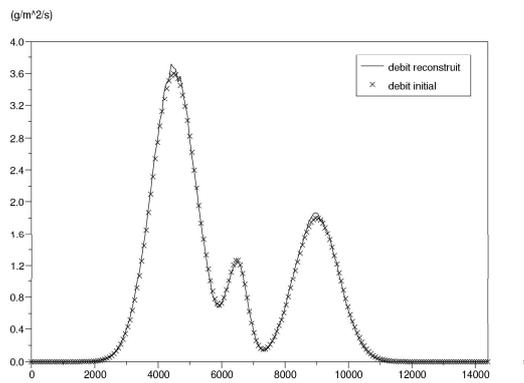
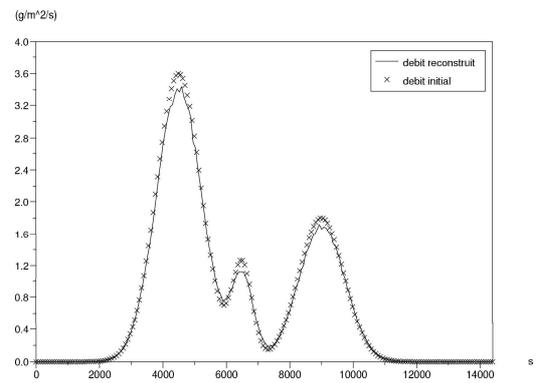
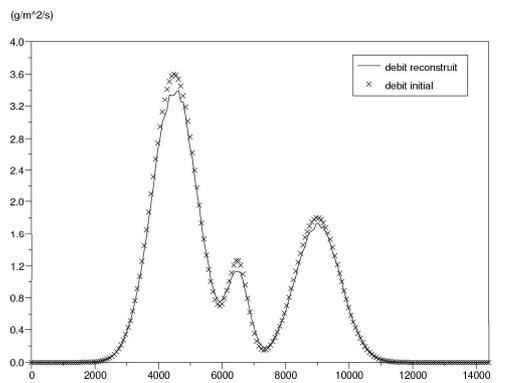
FIG. 7.8 – concentrations observées non bruitées quand $a = 621m$

observations y_1, y_2 en regardant la norme $1/2 \left(\frac{\|y_1 - y_{1\tilde{\sigma}}\|}{\|y_1\|} + \frac{\|y_2 - y_{2\tilde{\sigma}}\|}{\|y_2\|} \right)$. Les courbes débits obtenues ont été retracées, la courbe en pointillée représentant la courbe initiale et la courbe en trait plein, la courbe reconstruite :

- Pour $a = 273m$, nous avons obtenu la courbe 7.9 pour s_1 (resp. 7.12 pour s_2) avec $\tilde{\sigma} = 0.0582$ et avec une erreur relative sur les observations égale à 0.395 (resp. 0.403).
- Pour $a = 442m$, nous n'avons pas trouvé de $\tilde{\sigma}$ donnant de résultat. En faisant varier a entre $430m$ et $450m$, nous avons été confrontés au même problème. En fait, la première courbe de concentration apparaît encore mais est très faible par rapport à la seconde. Il semblerait qu'elle perturbe plus les résultats qu'elle ne les améliore.
- Pour $a = 547$, nous avons obtenu la courbe 7.10 (resp. 7.13) avec $\tilde{\sigma} = 0.072$ et avec une erreur relative sur les observations égale à 0.223 (resp. 0.233).
- Pour $a = 621$, nous avons obtenu la courbe 7.11 (resp. 7.14) avec $\tilde{\sigma} = 0.0682$ et avec une erreur relative sur les observations égale à 0.125 (resp. 0.133).

FIG. 7.9 – débit obtenu quand $a = 273m$ FIG. 7.10 – débit obtenu quand $a = 547m$ FIG. 7.11 – débit obtenu quand $a = 621m$

Conclusion : L'estimation de la position de la source de pollution est très mauvaise dès que la source se situe trop loin du premier point d'observation. Par contre, une fois connue, le débit est bien estimé. Ceci est dû à la liberté de choix $\tilde{\sigma}$ de la valeur du paramètre σ . En fait, dans ce cas, on étudie l'identification du débit quand on dispose de deux points d'observation alors qu'un seul suffirait puisqu'on dispose déjà de la localisation. D'ailleurs, on peut remarquer que

FIG. 7.12 – débit obtenu quand $a = 273m$ FIG. 7.13 – débit obtenu quand $a = 547m$ FIG. 7.14 – débit obtenu quand $a = 621m$

l'erreur relative sur la construction du débit semble moins importante lorsque la source polluante se rapproche du deuxième point d'observation. En effet, il y a moins de perte de polluant. Nous aurions pu, comme dans le cas où le débit est constant rechercher en même temps a et λ . Toutefois, étant donné la discrétisation très grossière, cela ne nous a pas paru très raisonnable. Etudions maintenant le cas où on intègre les conditions initiales dans notre étude.

7.4.3 La condition initiale est connue

Pour cette application numérique, nous allons prendre 11 points de discrétisation en espace. La position de la source de pollution est alors donnée par l'expression (6.115) qui est :

$$a_1 = L - \sqrt{\sigma^2 \left| \log \left(\frac{\lambda(0)}{\sigma\sqrt{\pi}(\dot{v}_N(0) - \alpha'v_{N-1}(0) - \beta v_N(0))} \right) \right|}, \quad (7.30)$$

Le débit va quant à lui être tiré de la résolution de l'équation différentielle (6.111) que l'on réécrit sous forme de système d'équations différentielles du premier ordre :

$$\begin{cases} \dot{Y}(t) &= AY(t) + b(t), \\ Y(0) &= Y_0 \end{cases} \quad (7.31)$$

où $Y(t) = (l(t), l'(t), \dots, l^{(N-2)}(t))$, Y_0 sera déterminé de façon plus explicite par la suite et

$$A = -\frac{1}{c_{N,N-1}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ c_{N,0} & c_{N,1} & c_{N,2} & \dots & c_{N,N-2} \end{pmatrix},$$

et

$$b(t) = -\frac{1}{c_{N,N-1}} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ f_N(t) \end{pmatrix}.$$

Ce système linéaire va être résolu par diagonalisation. En effet, les racines du polynôme caractéristique de A étaient numériquement clairement distinctes pour chacun des cas étudiés. Notons $D = P^{-1}AP$, $Y = PZ$. Ce qui donne :

$$\dot{Y}(t) = AY(t) + b(t) \iff \dot{Z}(t) = DZ(t) + P^{-1}b(t). \quad (7.32)$$

Notons $(d_{i,j})_{1 \leq i \leq N-1, 1 \leq j \leq N-1}$ les coefficients de la matrice D ; $(\tilde{b}_1(t), \dots, \tilde{b}_{N-1}(t))$ (resp. $(z_i)_{i=1, \dots, N-1}$) ceux du vecteur $\tilde{b}(t) = P^{-1}b(t)$ (resp. Z). On est donc ramené à résoudre le système différentiel :

$$\begin{cases} \dot{z}_1(t) &= d_{1,1}z_1 + \tilde{b}_1(t), \\ &\vdots \\ \dot{z}_{N-1}(t) &= d_{N-1,N-1}z_{N-1} + \tilde{b}_{N-1}(t), \end{cases} \quad (7.33)$$

$f_N(t)$ étant une fonction linéaire de l'observation et de ses dérivées, elle est de la forme :

$$\sum_{j=0}^{N-1} u_j y^{(j)}$$

où les coefficients u_j sont donnés par maple et dépendent des constantes du système, ce qui nous permet de récrire les coordonnées de $\tilde{b}(t)$ de la façon suivante :

$$\tilde{b}_i(t) = P^{-1}(i, N-1) \sum_{j=0}^{N-1} u_j y^{(j)}(t). \quad (7.34)$$

Posons $\tilde{u}_{i,j} = P^{-1}(i, N-1)u_j$.

La solution de $\dot{z}_i(t) = d_{i,i}z_i + \tilde{b}_i(t)$, $i = 1, \dots, N-1$, est :

$$z_i(t) = z_i(0)e^{d_{i,i}t} + \int_0^t \tilde{b}_i(s)e^{d_{i,i}(t-s)} ds \quad (7.35)$$

En utilisant (7.34) et (7.35), on obtient :

$$z_i(t) = z_i(0)e^{d_{i,i}t} + \sum_{j=0}^{N-1} \tilde{u}_{i,j} \int_0^t y^{(j)}(s)e^{d_{i,i}(t-s)} ds. \quad (7.36)$$

En effectuant successivement des intégrations par parties, on établit l'égalité suivante :

$$\int_0^t y^{(j)}(s)e^{d_{i,i}(t-s)} ds = \sum_{l=0}^{j-1} d_{i,i}^{j-1-l} (y^{(l)}(t) - y^{(l)}(0)e^{d_{i,i}t}) + d_{i,i}^j I_i(t), \quad (7.37)$$

avec $I_i(t) = \int_0^t y(s)e^{-d_{i,i}(t-s)} ds$, d'où

$$z_i(t) = z_i(0)e^{d_{i,i}t} + \sum_{j=0}^{N-1} \left[\tilde{u}_{i,j} \sum_{l=0}^{j-1} \left(d_{i,i}^{j-1-l} (y^{(l)}(t) - y^{(l)}(0)e^{d_{i,i}t}) \right) + d_{i,i}^j I_i(t) \right], \quad (7.38)$$

Ce qui nous intéresse est le calcul de $z_i(t_k)$, pour $k = 1, \dots, M$, M étant le nombre de points de discrétisation en temps, ce qui fait :

$$z_i(t_k) = z_i(0)e^{d_{i,i}k\Delta t} + \sum_{j=0}^{N-1} \left[\tilde{u}_{i,j} \sum_{l=0}^{j-1} \left(d_{i,i}^{j-1-l} (y^{(l)}(t_k) - y^{(l)}(0)e^{d_{i,i}k\Delta t}) \right) + d_{i,i}^j I_i(t_k) \right], \quad (7.39)$$

où Δt , le pas de discrétisation en temps est constant et où pour le calcul numérique, l'intégrale $I_i(t_k)$ a été approchée par la méthode des trapèzes.

Ainsi, on obtient :

$$l(t_k) = P(1, 1)z_1(t_k) + \dots + P(1, N-1)z_{N-1}(t_k). \quad (7.40)$$

d'où

$$\lambda(t_k) = l(t_k)e^{\frac{\alpha^2}{\sigma^2} \sigma \sqrt{\pi}}. \quad (7.41)$$

Reste à déterminer $z_i(0)$, ce qui revient à déterminer Y_0 puisque $Z(0) = P^{-1}Y_0$. Pour cela, nous nous sommes inspirés de la dernière démonstration du chapitre 6 qui consistait à démontrer que la connaissance de $l(0)$ et de la condition initiale impliquait la connaissance des dérivées de l en 0. Nous avons utilisé le package `diffalg` de maple qui permet d'exprimer les variables d'un

système différentiel par rapport à d'autres variables. Pour avoir l'expression de l' qui est notée $l[t]$, nous avons tout d'abord donné l'ordre d'élimination $[l[t]] \prec [l[], v_{10}, v_9, v_8]$ que nous avons appliqué sur les deux dernières équations

$$p1 := -v_{10}[t, t] + \alpha' * v_9[t] + \beta * v_{10}[t] + k_{10} * Q^{10} * l[t]$$

et

$$p2 := -v_9[t] + \alpha * v_8[] + \beta * v_9[] + \gamma * v_{10}[] + k_9 * Q^9 * l[].$$

Ce qui nous a donné comme résultat :

$$l[t] = (v_{10}[t, t] - \alpha' * \alpha * v_8[] - \alpha' * \beta * v_9[] - \alpha' * \gamma * v_{10}[] - \alpha' * k_9 * Q^9 * l[] - \beta * v_{10}[t]) / k_{10} / Q^{10}. \quad (7.42)$$

En prenant en compte les conditions initiales ainsi que les notations initiales, on obtient :

$$l'(0) = (\ddot{y}(0) - \alpha' \alpha v_8(0) - \alpha' \beta v_9(0) - \alpha' \gamma v_{10}(0) - \alpha' k_9 Q^9 l(0) - \beta \dot{y}(0)) / k_{10} / Q^{10}. \quad (7.43)$$

Pour l'' , l'ordre d'élimination introduit est $[l[t, t]] \prec [l[t], l[], v_{10}, v_9, v_8, v_7]$ et il est appliqué sur les équations

$$p1 := -v_{10}[t, t, t] + \alpha' * v_9[t, t] + \beta * v_{10}[t, t] + k_{10} * Q^{10} * l[t, t],$$

$$p2 := -v_9[t, t] + \alpha * v_8[t] + \beta * v_9[t] + \gamma * v_{10}[t] + k_9 * Q^9 * l[t]$$

et

$$p3 := -v_8[t] + \alpha * v_7[] + \beta * v_8[] + \gamma * v_9[] + k_8 * Q^8 * l[].$$

Ce qui nous a permis d'obtenir :

$$l[t, t] = (v_{10}[t, t, t] * Q * k_{10} - \alpha' * \alpha^2 * v_7[] * Q * k_{10} - 2 * \alpha' * \beta * \alpha * v_8[] * Q * k_{10} - \alpha' * \alpha * \gamma * v_9[] * Q * k_{10} - \alpha' * \alpha * k_8 * Q^9 * l[] * k_{10} - \alpha' * \beta^2 * v_9[] * Q * k_{10} - \alpha' * \beta * \gamma * v_{10}[] * Q * k_{10} - \alpha' * \beta * k_9 * Q^{10} * l[] * k_{10} - \alpha' * \gamma * v_{10}[t] * Q * k_{10} - \alpha' * k_9 * v_{10}[t, t] + \alpha'^2 * k_9 * \alpha * v_8[] + \alpha'^2 * k_9 * \beta * v_9[] + \alpha'^2 * k_9 * \gamma * v_{10}[] + \alpha'^2 * k_9^2 * Q^9 * l[] + \alpha' * k_9 * \beta * v_{10}[t] - \beta * v_{10}[t, t] * Q * k_{10}) / Q^{11} / k_{10}^2. \quad (7.44)$$

Remplaçons alors l'expression de $l'(0)$ par (7.43) dans (7.44) prise en 0, il vient que :

$$l''(0) = (y^{(3)}(0) Q k_{10} - \alpha' \alpha^2 v_7(0) Q k_{10} - 2 \alpha' \beta \alpha v_8(0) Q k_{10} - \alpha' \alpha \gamma v_9(0) Q k_{10} - \alpha' \alpha k_8 Q^9 l(0) k_{10} - \alpha' \beta^2 v_9(0) Q k_{10} - \alpha' \beta \gamma v_{10}(0) Q k_{10} - \alpha' \beta k_9 Q^{10} l(0) k_{10} - \alpha' \gamma \dot{y}(0) Q k_{10} - \alpha' k_9 \ddot{y}(0) + \alpha'^2 k_9 \alpha v_8(0) + \alpha'^2 k_9 \beta v_9(0) + \alpha'^2 k_9 \gamma y(0) + \alpha'^2 k_9^2 Q^9 l(0) + \alpha' k_9 \beta \dot{y}(0) - \beta \ddot{y}(0) Q k_{10}) / Q^{11} / k_{10}^2. \quad (7.45)$$

En itérant le procédé jusqu'à la dérivée huitième, on trouve ainsi Y_0 , d'où $Z_0 = (z_i(0))_i = P^{-1} Y_0$. Remarquons que grâce à ce procédé, on peut exprimer les dérivées successives de l prises en 0 en fonction de $y(0)$, $\dot{y}(0)$, Q et $l(0)$.

Comme nous l'avons vu dans la partie théorique, des dérivées d'ordre très important vont intervenir dans nos estimations numériques. Le choix de négliger les dérivées d'ordre plus grand que 2 ne nous a pas permis d'obtenir des résultats suffisants. Nous avons donc décidé d'inclure les dérivées d'ordre supérieur. Comme les B-splines ne nous le permettaient pas, nous avons opté pour une théorie développée par M. Fliess et H. Sira-Ramirez [19], [20], [21]. Elle présente

également l'avantage de ne demander aucune connaissance *à priori* des propriétés statistiques des signaux et des bruits. Les estimateurs présentent une excellente robustesse à une large variété de bruits additifs. Ils reposent sur des formules explicites, ce qui conduit à des calculs très rapides. La théorie est rappelée dans l'annexe E.

Rappelons l'idée principale. Soit l'ensemble C des fonctions continues $f : [0, \infty) \rightarrow \mathcal{C}$ muni d'une structure d'anneau commutatif par rapport à l'addition

$$(f + g)(t) = f(t) + g(t)$$

et au produit de convolution

$$(f \star g)(t) = (g \star f)(t) = \int_0^t f(\tau)g(t - \tau)d\tau = \int_0^t g(\tau)f(t - \tau)d\tau.$$

Le corps M des fractions de C est le corps de *Mikusinski*.

Chaque élément de M est un *opérateur*. Toute fonction $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{C}$ peut aussi s'écrire comme $\{f\}$ en tant qu'élément de M .

Lorsque l'on passera dans le corps M , nous dirons que nous passons dans le domaine opérationnel. Les règles qui nous seront utiles pour la suite et permettant de passer du domaine temporel au domaine opérationnel et réciproquement sont :

$$\begin{aligned} \frac{c}{s^n} &\Leftrightarrow c \frac{t^{n-1}}{(n-1)!}, \\ s^{i-j} \frac{d^i x}{ds^i} &\Leftrightarrow \begin{cases} \frac{d^{i-j}}{dt^{i-j}}((-t)^i x(t)) \text{ si } i \geq j \\ \int^{(j-i)} (-t)^i x(t) \text{ si } i < j. \end{cases} \end{aligned} \quad (7.46)$$

où $\int^{(j-i)} = \int_0^t \int_0^{\tau_{j-1}} \dots \int_0^{\tau_1}$. Rappelons que l'on a :

$$\begin{aligned} \int^{(j-i)} (-t)^i x(t) &= \int_0^t \int_0^{\tau_1} \dots \int_0^{\tau_{j-i-1}} (-\tau_{j-i})^i x(\tau_{j-i}) d\tau_{j-i} \dots d\tau_2 d\tau_1, \\ &= \frac{(-1)^i}{(j-i-1)!} \int_0^t (t-\tau)^{j-i-1} \tau^i x(\tau) d\tau. \end{aligned} \quad (7.47)$$

Tout d'abord, nous allons étudier le cas particulier du calcul des dérivées en 0. Nous généralisons ensuite l'estimation des dérivées en un autre point.

Soit x une fonction réelle du temps, analytique autour de 0. En utilisant le développement de Taylor en 0, elle s'écrit :

$$x(t) = \sum_{n \geq 0} x^{(n)}(0) \frac{t^n}{n!}. \quad (7.48)$$

Elle peut alors être approchée sur un intervalle $(0, \epsilon)$ par $x_N(t) = \sum_{n=0}^N x^{(n)}(0) \frac{t^n}{n!}$ qui vérifie :

$$\frac{d^{N+1}}{dt^{N+1}} x_N = 0. \quad (7.49)$$

Dans le domaine opérationnel, on obtient alors :

$$s^{N+1}x_N - s^N x_N(0) - s^{N-1}\dot{x}_N(0) \dots - x_N^{(N)}(0) = 0. \quad (7.50)$$

Les dérivées à l'origine $x_N^{(i)}(0) = \frac{d^i}{dt^i}x_N(t) |_{t=0}$ sont ainsi obtenues à partir du système d'équations linéaires

$$s^{-\nu} \frac{d^m}{ds^m} \left\{ x_N^{(N)}(0) + x_N^{(N-1)}(0)s + \dots + x_N(0)s^N \right\} = s^{-\nu} \frac{d^m}{ds^m} \left\{ s^{N+1}x_N \right\} \quad (7.51)$$

$m = 0, \dots, N, \nu \geq N + 1$.

Remarque : Pour ceux qui connaissent ou ont lu l'annexe E, l'opérateur $s^{-\nu} \frac{d^m}{ds^m}$ joue le rôle d'estimateur. Cette opération permet donc de "détruire" les bruits structurés.

Ce système étant triangulaire avec des éléments diagonaux non nul, les paramètres $x_N^{(i)}(0), i = 0, \dots, N$ sont linéairement identifiables.

Notons I_m (resp. J_m) le membre de gauche (resp. droite) de (7.51). I_m s'écrit encore :

$$I_m = s^{-\nu} \sum_{j=0}^N x_N^{(j)}(0) \frac{d^m}{ds^m} s^{N-j}.$$

Or, on a :

$$\frac{d^m}{ds^m} s^{N-j} = \begin{cases} \frac{(N-j)!}{(N-j-m)!} s^{N-j-m}, & \text{si } m \leq N-j, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (7.52)$$

Ainsi, I_m vaut :

$$I_m = \sum_{j=0}^{N-m} x_N^{(j)}(0) \frac{(N-j)!}{(N-j-m)!} s^{N-j-m-\nu}. \quad (7.53)$$

De même, en appliquant la formule sur le produit des dérivées et en appliquant (7.52) à J_m , on trouve :

$$J_m = \sum_{i=0}^m C_m^i \frac{(N+1)!}{(N+1-m+i)!} s^{i+N+1-m-\nu} \frac{d^i x_N}{ds^i}. \quad (7.54)$$

Ce qui donne finalement pour $m = 0, \dots, N, \nu \geq N + 1$ ($i < m + \nu - N - 1$) :

$$\sum_{j=0}^{N-m} x_N^{(j)}(0) \frac{(N-j)!}{(N-j-m)!} s^{N-j-m-\nu} = \sum_{i=0}^m C_m^i \frac{(N+1)!}{(N+1-m+i)!} s^{N+1-m+i-\nu} \frac{d^i x_N}{ds^i}. \quad (7.55)$$

En remplaçant x_N par x dans (7.55), on obtient l'estimée opérationnelle $[x^{(i)}(0)]_{e_N}$ de $x^{(i)}(0)$. Pour le passage au numérique, il suffit, selon les règles du calcul opérationnel d'appliquer (7.46).

Ce qui fait :

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{N-m} x_N^{(j)}(0) \frac{(N-j)!}{(N-j-m)!(j+m+\nu-N-1)!} t^{j+m+\nu-N-1} \\ &= \sum_{i=0}^m C_m^i \frac{(N+1)!}{(N+1-m+i)!} \int^{(m+\nu-i-N-1)} (-t)^i x(t). \end{aligned} \quad (7.56)$$

Notons

$$a(j, m, \nu) = \frac{(N-j)!}{(N-j-m)!(j+m+\nu-N-1)!},$$

$$b(i, m, \nu) = C_m^i \frac{(N+1)!}{(N+1-m+i)!}.$$

Ainsi, pour $m = N$, nous obtenons :

$$x(0) = \frac{1}{a(0, N, \nu)t^{\nu-1}} \sum_{i=0}^N b(i, N, \nu) \int^{(\nu-i-1)} (-t)^i x(t).$$

Puis, pour m variant de $N-1$ à 0 :

$$x^{(N-m)}(0) = \frac{1}{a(N-m, m, \nu)t^{\nu-1}} \left[\sum_{i=0}^m b(i, m, \nu) \int^{(m+\nu-i-N-1)} (-t)^i x(t) \right. \\ \left. - \sum_{j=0}^{N-m-1} x^{(j)}(0) a(j, m, \nu) t^{j+m+\nu-N-1} \right]. \quad (7.57)$$

Les itérations des intégrales permettent d'atténuer l'effet du bruit non structuré. Pour calculer les dérivées en un autre point, il suffit de partir de

$$x(t) = \sum_{n \geq 0} a_n \frac{t^n}{n!}$$

qui peut-être approchée par $x_N(t) = \sum_{n=0}^N a_n \frac{t^n}{n!}$. En remplaçant $x^{(n)}(0)$ par $[a_n]_{e_N}$ dans les calculs précédents, nous obtenons l'estimée opérationnelle $[a_n]_{e_N}$ de a_n . Ceux-ci étant obtenus, on en déduit une approximation polynômiale au voisinage de t de $x(t)$. Pour calculer les dérivées, il suffit alors de dériver cette approximation polynômiale. Notons $[a_n]_{e_N}(t)$, si elle est définie, l'estimée numérique ainsi obtenue de $[a_n]_{e_N}$. Le résultat suivant est essentiel pour la mise en pratique, qui repose sur un compromis entre t et N .

Proposition 12 Il existe un voisinage ouvert \mathcal{V} de 0 tel que, pour tout $t \in \mathcal{V}$, $[a_n]_{e_N}(t)$ soit définie. Alors,

$$\lim_{t \searrow 0} [a_n]_{e_N}(t) = \lim_{N \rightarrow +\infty} [a_n]_{e_N}(t) = a_n.$$

Numériquement, nous avons, comme précédemment travaillé avec le système adimensionné et nous avons utilisé l'algorithme suivant :

Pour $\tilde{\sigma}$ de 0.01 à 0.5 faire

Calcul de $a_{\tilde{\sigma}}$, $\lambda_{\tilde{\sigma}}$ à partir de (7.30) et (7.41),

Calcul de $y_{\tilde{\sigma}}$ à partir de (7.5),

Calcul de l'erreur relative $e_{\tilde{\sigma}} = 0.5 \frac{\text{norm}(y - y_{\tilde{\sigma}})}{\text{norm}(y)}$

Fin Pour

Recherche du minimum parmi les $e_{\tilde{\sigma}}$ d'où \tilde{a} , $\tilde{\lambda}$.

Nous avons supposé, dans cette partie, que le bruit suivait une loi aléatoire de moyenne \bar{y} et de variance $(s_2\bar{y})^2$. Etant donné l'importance de l'estimation de la dérivée et du débit en 0, nous avons travaillé sur l'intervalle [2000, 14400]. Donc 2000 est pris comme point initial. Nous avons simulé différentes positions de la source de pollution. Nous supposons alors observer les courbes 7.15 quand $a = 442m$, 7.16 quand $a = 547m$, 7.17 quand $a = 621m$, 7.18 quand $a = 853m$.

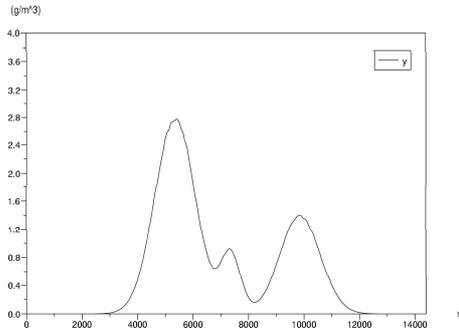


FIG. 7.15 – Concentrations observées quand $a = 442m$

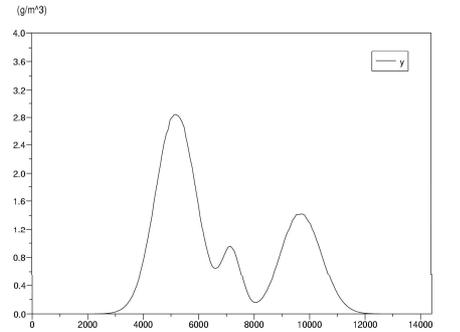


FIG. 7.16 – Concentrations observées quand $a = 547m$

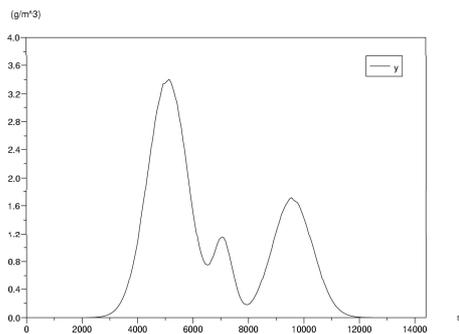


FIG. 7.17 – Concentrations observées quand $a = 621m$

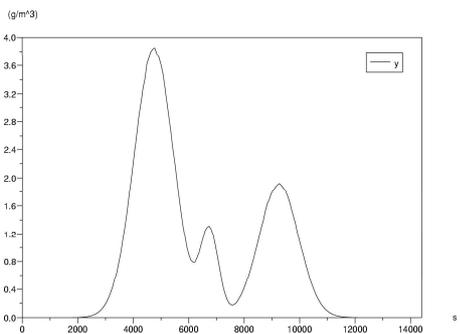


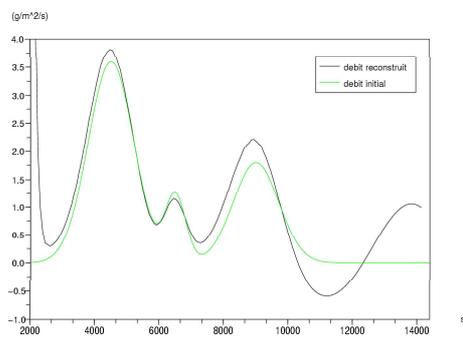
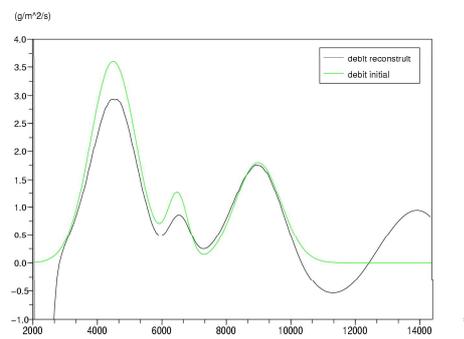
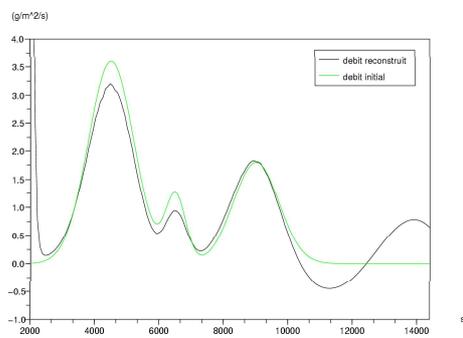
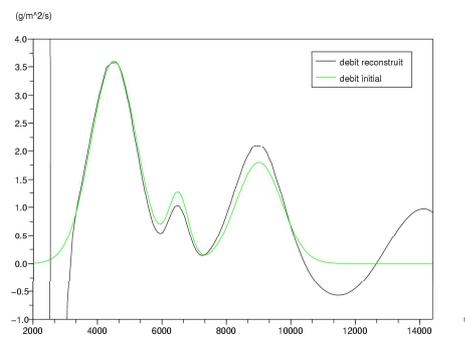
FIG. 7.18 – Concentrations observées quand $a = 873m$

Nous avons trouvé comme résultats :

- ★ Pour $a = 442m$, $\tilde{\sigma} = 0.280$, $\tilde{a} = 465m$, $e_{\tilde{\sigma}} = 0.837$ et la courbe débit 7.19.
- ★ Pour $a = 547m$, $\tilde{\sigma} = 0.335$, $\tilde{a} = 571m$, $e_{\tilde{\sigma}} = 0.846$ et la courbe débit 7.20.
- ★ Pour $a = 621m$, $\tilde{\sigma} = 0.359$, $\tilde{a} = 671m$, $e_{\tilde{\sigma}} = 0.866$ et la courbe débit 7.21.
- ★ Pour $a = 853m$, $\tilde{\sigma} = 0.436$, $\tilde{a} = 835m$, $e_{\tilde{\sigma}} = 0.95$ et la courbe débit 7.22.

Remarque : Nous avons pris $\nu = 14$ pour calculer les dérivées et le calcul des erreurs relatives a été fait sur l'intervalle [3000, 14400].

Conclusion : Ce chapitre est consacré à l'estimation d'une source de pollution. Le fait d'introduire le paramètre σ dans l'approximation de mon équation initiale m'a permis d'obtenir des résultats très satisfaisants. Toutefois, si j'ai pu dans le cas où le débit était constant négliger les dérivées d'ordre plus grand que trois, il a fallu que je trouve une méthode efficace pour les calculer quand le débit dépendait du temps. Il s'est avéré que celle proposée par M. Fliess et H.Sira-Ramirez était la plus appropriée : aucune connaissance à priori du bruit, expression explicite des dérivées....

FIG. 7.19 – débit obtenu quand $a = 442m$ FIG. 7.20 – débit obtenu quand $a = 547m$ FIG. 7.21 – débit obtenu quand $a = 621m$ FIG. 7.22 – débit obtenu quand $a = 853m$

Conclusion

Dans un premier temps, nous avons traité l'identifiabilité de trois modèles non linéaires : les deux premiers étant en pharmacocinétique, le troisième concernait un problème de pollution. Pour cela, nous avons utilisé des outils d'algèbre différentielle implémentés par F. Boulier dans maple et que C. Noiret avait repris dans le développement de son logiciel.

Si le premier modèle en pharmacocinétique a pu être traité grâce à son logiciel, le deuxième, beaucoup plus complexe a demandé une étude plus poussée. En particulier, il a fallu extraire des informations supplémentaires à partir des équations.

Le troisième qui est une équation parabolique dont le second membre représente la source de pollution a été approché. En effet, la solution de l'équation initiale s'est révélée difficilement utilisable en pratique comme nous l'avons souligné dans le chapitre 7. Nous avons tout d'abord choisi d'approcher la masse de Dirac par une fonction gaussienne, puis nous avons discrétisé en espace cette équation approchée. Nous avons alors obtenu un système d'équations différentielles et c'est celui-ci que nous avons étudié. Pour montrer l'identifiabilité des paramètres, ceci quel que soit le nombre de points de discrétisation en espace, nous nous sommes inspirés de l'algorithme de Rosenfeld-Groebner.

Dans un second temps, nous avons cherché à estimer les paramètres. Pour cela, nous avons tout d'abord fait le lien entre l'étape du test d'identifiabilité et celle de l'estimation paramétrique. Dans le cas des modèles en pharmacocinétique, nous avons utilisé un critère intégral permettant de diminuer l'ordre des dérivées. L'estimation de celles-ci s'est révélée importante pour les résultats numériques du second modèle, surtout lorsque les observations étaient bruitées. Nous avons dû utiliser une méthode plus sophistiquée qu'une méthode d'interpolation polynomiale pour les calculer. Nous avons opté pour celle proposée par S. Ibrir et Diop dans [27] basée sur un problème de régularisation. L'avantage de cette méthode est qu'elle ne demande aucune connaissance statistique sur l'incertitude des mesures. Ensuite, pour améliorer l'estimation des paramètres, nous avons utilisé une méthode d'optimisation spécialisée dans l'étude de problèmes mal posés : la régularisation de Tikhonov qui a conduit à l'algorithme de Levenberg-Marquardt.

Pour le problème de pollution, nous avons directement travaillé sur les polynômes paramètres-sorties. Quand le débit était constant, nous avons montré l'identifiabilité du modèle avec deux points d'observation. En ajoutant les conditions initiales, nous avons pu réduire le nombre d'observation à un. C'est ce dernier cas qui a donné les meilleurs résultats numériques. En effet, lorsque l'on avait deux points d'observation encadrant la source de pollution, on perdait trop d'information par rapport à la source en amont. Quand le débit dépendait du temps, nous nous sommes attachés au cas où les conditions initiales étaient connues. Nous avons alors été amenés à résoudre un système d'équations différentielles du premier ordre. Celui-ci faisait intervenir des dérivées d'ordre très important qu'il a fallu estimer. Nous avons opté pour une méthode proposée par M. Fliess et H. Sira. Ramirez car elle présente, d'une part, l'avantage de ne demander aucune connaissance a priori des propriétés statistiques des signaux et des bruits, d'autre part, l'expression explicite des dérivées d'où des calculs très rapides.

Une suite possible à ce travail serait de reprendre l'étude effectuée sur la troisième application dans un cadre plus général, i.e étudier l'identifiabilité et l'estimation paramétrique d'un système semi-discrétisé mais cette fois-ci non linéaire.

ANNEXES

Annexe A

Contrôlabilité, Observabilité

A.1 Contrôlabilité

Les systèmes considérés sont les systèmes contrôlés dynamiques de forme générale :

$$\Gamma \begin{cases} \dot{x} &= f(x) + \sum_{j=1}^l g_j(x)u_j, \quad u = (u_1, \dots, u_l) \in U \subset \mathbb{R}^l, \\ y_i &= h_i(x), \quad i = 1, \dots, m, \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

où $x = (x_1, \dots, x_n)$ sont les coordonnées locales de M , une variété connexe analytique (i.e. un espace connexe de dimension n localement isomorphe à \mathbb{R}^n). Les champs de vecteurs f, g_1, \dots, g_l sont analytiques, linéaires ou non, définis sur M . Le champ de vecteur f est appelé la *dérivée* et les champs de vecteurs g_i les *entrées*.

Nous supposons que pour tout $T > 0$, pour tout contrôle mesurable borné $u(t) = (u_1(t), \dots, u_l(t))$ défini sur $[0, T]$ et tout $x_0 \in M$, il existe une solution unique au système d'équations différentielles défini par Γ . Cette solution est notée $x(t)$. Elle est telle que $x(0) = x_0$ et $x(t) \in M$ pour $t \in [0, T]$, $x(t)$ est la solution du système noté $\Gamma_{(x_0, u)}$.

Dans cette section, $\nu^\infty(M)$ représente l'ensemble des champs de vecteurs analytiques définis sur M . C'est un espace vectoriel de dimension infinie mais aussi une algèbre de Lie pour la multiplication définie par le crochet de Lie $[f_1, f_2]$ avec f_1, f_2 des éléments de $\nu^\infty(M)$. Rappelons que le crochet de Lie est défini par :

$$[f_1, f_2](x) = \frac{\partial f_2}{\partial x} f_1(x) - \frac{\partial f_1}{\partial x} f_2(x). \quad (\text{A.2})$$

Pour ν un voisinage de x_0 , nous introduisons les deux ensembles $R^\nu(x_0, T)$ et $R_T^\nu(x_0)$. Le premier est l'ensemble des points atteignables à partir de x_0 exactement au temps $T > 0$, suivant des trajectoires restant dans ν , ce qui se réécrit pour $t \leq T$:

$$R^\nu(x_0, T) = \{\zeta \in M / \exists u : [0, T] \rightarrow U \text{ tel que la solution } x \text{ de } \Gamma_{(x_0, u)} \text{ vérifie } x(T) = \zeta \text{ où } \zeta(t) \in \nu \text{ pour tout } t \in [0, T]\}. \quad (\text{A.3})$$

L'ensemble $R_T^\nu(x_0)$ représente tous les points atteignables à partir de x_0 exactement en un temps τ , $0 < \tau \leq T$, suivant une trajectoire restant dans le voisinage ν de x_0 , ou encore pour $t \leq \tau$:

$$R_T^\nu(x_0) = \cup_{\tau \leq T} R^\nu(x_0, \tau). \quad (\text{A.4})$$

Définition 34 Le système Γ est dit *contrôlable* si pour chaque paire $(x_1, x_2) \in M$, il existe un temps fini T et un contrôle $u : [0, T] \rightarrow U$ tels que $x(T) = x_2$ où x est l'unique solution de $\Gamma_{(x_1, u)}$ pour le contrôle particulier u .

A.1.1 Les systèmes linéaires

Les systèmes dynamiques linéaires contrôlés sont de la forme ;

$$\begin{cases} \dot{x} &= Ax + Bu, \\ y &= Cx. \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

La matrice de contrôlabilité, $Q_C = [B, AB, A^2B, \dots, A^{n-1}B]$ permet d'établir la contrôlabilité du système linéaire. En effet, ce dernier est contrôlable si et seulement si le rang de Q_C est égal à n . Ce critère s'appelle *critère du rang de Kalman* pour la contrôlabilité.

A.1.2 Les systèmes non linéaires

Si la structure du modèle est non linéaire, la notion de contrôlabilité est plus difficile à vérifier car il n'existe pas de critère algébrique aussi simple. Pour disposer d'un critère analogue, des notions plus faibles ont été introduites dans [25], [47].

Contrôlabilité locale faible

Définition 35 Le système Γ est dit *localement faiblement contrôlable* en $x_0 \in M$ si $R_T^\nu(x_0)$ contient au moins un sous-ensemble ouvert non vide de M pour tout voisinage ν de x_0 et tout temps $T > 0$.

Définition 36 Γ est dit *localement faiblement contrôlable* sur M s'il est localement faiblement contrôlable en tout x_0 appartenant à M .

L'intérêt de cette définition est qu'elle permet d'introduire un test algébrique simple appelé *critère du rang de contrôlabilité* (CRC). Pour définir le critère, nous allons associer à la dérivée f et aux entrées g_1, \dots, g_l l'algèbre de Lie de contrôle qui est la plus petite sous-algèbre de $\nu^\infty(M)$ qui contient f, g_1, \dots, g_l . Elle sera notée par la suite \mathcal{A} . Un élément caractéristique de \mathcal{A} est une combinaison linéaire d'éléments de la forme :

$$[X^1, [X^2, [\dots, [X^{k-1}, X^k] \dots]]] \quad (\text{A.6})$$

où $X^i \in \{f, g_1, \dots, g_l\}$.

A l'algèbre de Lie de contrôle \mathcal{A} , nous associons la distribution :

$$\mathcal{A}(x) = \text{vect} \langle X(x) / X \in \mathcal{A} \rangle, \quad x \in M. \quad (\text{A.7})$$

Définition 37 Le système contrôlé Γ satisfait le *critère de rang de contrôlabilité* (CRC) en x_0 si

$$\dim(\mathcal{A}(x_0)) = n. \quad (\text{A.8})$$

Le système contrôlé Γ satisfait le *critère de rang de contrôlabilité* si

$$\forall x \in M, \dim(\mathcal{A}(x)) = n. \quad (\text{A.9})$$

Pour des systèmes analytiques, la faible contrôlabilité locale et le CRC en tout point $x \in M$ sont des notions équivalentes [25].

Contrôlabilité locale forte

Définition 38 Le système Γ est dit localement fortement contrôlable sur M en $x_0 \in M$ si pour tout voisinage ν de x_0 , l'ensemble $R^\nu(x_0, T)$ contient au moins un sous-ensemble ouvert non vide de M pour tout $T > 0$ suffisamment petit.

Définition 39 Γ est dit fortement localement contrôlable sur M s'il est localement fortement contrôlable en tout point x_0 appartenant à M .

Remarque 9 La contrôlabilité locale forte implique la contrôlabilité locale faible.

Comme dans le cas linéaire, il est possible de définir un test algébrique. Pour cela, nous associons à la dérive f et aux entrées g_1, \dots, g_l l'algèbre de Lie de contrôle fort, noté \mathcal{A}_0 , qui est la plus petite sous-algèbre de $V^\infty(M)$ qui contient g_1, \dots, g_l et stable par crochet de Lie avec la dérive (i.e. $[f, X] \in \mathcal{A}_0, X \in \mathcal{A}_0$).

Un élément caractéristique de \mathcal{A} est une combinaison linéaire d'éléments de la forme :

$$[X^k, [X^{k-1}, [\dots, [X^1, g_j] \dots]]], \quad j = 1, \dots, l, \quad k = 2, 3, \dots \quad (\text{A.10})$$

où $X^j \in \{f, g_1, \dots, g_l\}$.

A l'algèbre de Lie de contrôle fort \mathcal{A}_0 , nous associons la distribution :

$$\mathcal{A}_0(x) = \text{vect} \langle X(x) / X \in \mathcal{A} \rangle, \quad x \in M. \quad (\text{A.11})$$

Définition 40 On dit que Γ satisfait le critère du rang de contrôlabilité fort (CRCF) en x_0 si :

$$\dim(\mathcal{A}_0(x)) = n \quad (\text{A.12})$$

Γ satisfait le critère du rang de contrôlabilité fort si :

$$\forall x \in M, \dim(\mathcal{A}_0(x)) = n. \quad (\text{A.13})$$

Remarque 10 La contrôlabilité locale forte et le CRCF en tout point $x \in M$, où M est une variété connexe, sont des notions équivalentes pour des systèmes analytiques.

A.2 Observabilité

Nous notons $\Gamma_{x_0}(u)(\cdot)$ la fonction du temps qui, pour tout $t \in [0, T]$ associe la sortie de Γ correspondant à un contrôle $u(\cdot)$ et un état initial x_0 .

Définition 41 Le système Γ est dit observable si pour toute paire $(x_1, x_2) \in M$, nous avons :

$$\{\forall u, \Gamma_{x_1}(u) \equiv \Gamma_{x_2}(u)\} \Rightarrow x_1 = x_2. \quad (\text{A.14})$$

Comme précédemment, nous allons traiter les systèmes linéaires puis les non linéaires.

A.2.1 Les systèmes linéaires

Pour prouver l'observabilité d'un système nous disposons comme pour la contrôlabilité d'un critère de rang. Pour cela, introduisons la matrice d'observabilité :

$$Q_0 = \begin{bmatrix} C \\ CA \\ CA^2 \\ \vdots \\ CA^{n-1} \end{bmatrix} \quad (\text{A.15})$$

Le critère est alors le suivant : le système est observable si et seulement si le rang de Q_0 est égal à n . C'est le *critère du rang de Kalman* d'observabilité.

A.2.2 Les systèmes non-linéaires

Dans ce cas, une autre définition, plus faible est introduite pour pouvoir remplacer le critère de Kalman.

Définition 42 Deux états x_1 et x_2 d'un sous-ensemble ν de M sont ν -indistinguables si pour tout contrôle

$$u(\cdot) : [0, T] \rightarrow U, T > 0,$$

tel que les trajectoires solutions de Γ_{x_1} et Γ_{x_2} restent dans ν pour $0 \leq t \leq T$ alors les sorties associées $\Gamma_{x_1}(u)$ et $\Gamma_{x_2}(u)$ sont identiques pour $0 < t \leq T$.

Définition 43 Le système Γ est dit *localement faiblement observable* en x_0 appartenant à M s'il existe un voisinage W de x_0 tel que pour tout voisinage $\nu \subset W$, la relation x_0 et x_1 ν -indistinguables implique $x_1 = x_0$.

Définition 44 Le système Γ sera dit *localement faiblement observable* sur M s'il est localement faiblement observable en tout $x_0 \in M$.

Intuitivement, un système sera localement faiblement observable si nous pouvons distinguer instantanément chacun de ses "voisins".

Pour introduire le *critère du rang d'observabilité* (ORC), la notion d'algèbre de Lie va de nouveau être utilisée.

Critère du rang d'observabilité

Introduisons tout d'abord l'espace d'observation \mathcal{O} , l'espace linéaire sur \mathbb{R} des fonctions sur M contenant h_1, \dots, h_m et toutes les dérivées de Lie successives de la forme :

$$L_{X_1} \dots L_{X_i} \dots L_{X_k} h_j, j \in \{1, \dots, m\}, k = 1, 2, \dots \quad (\text{A.16})$$

avec $X_i \in \{f, g_1, \dots, g_l\}$ et $L_{\phi_i}(h_j)(x) = \frac{\partial h_j}{\partial x}(x) \phi_i(x)$.

L'espace d'observation \mathcal{O} définit la *codistribution d'observabilité*, notée $d\mathcal{O}$ et telle que :

$$d\mathcal{O}(q) = \text{vect} \langle dH(q)/H \in \mathcal{O} \rangle, q \in M. \quad (\text{A.17})$$

Définition 45 Le système Γ_{x_0} satisfait le *critère du rang d'observabilité* (ORC) en x_0 si :

$$\dim(d\mathcal{O}(x_0)) = n. \quad (\text{A.18})$$

Le système Γ_{x_0} satisfait le *critère du rang d'observabilité* si :

$$\forall x \in M, \dim(d\mathcal{O}(x)) = n. \quad (\text{A.19})$$

Remarque 11 Un système analytique faiblement contrôlable sur une variété M connexe est localement faiblement observable si et seulement s'il satisfait l'ORC.

Annexe B

Compléments sur le problème spectral

B.1 Rappel des théorèmes de [10]

Dans la suite, H désigne un espace de Hilbert.

Définition 46 Soit $A : D(A) \subset H \rightarrow H$ un opérateur linéaire non-borné (un opérateur linéaire non-borné de E dans F est une application linéaire définie sur le sous-espace vectoriel $D(A) \subset E$ à valeurs dans F). On dit que A est maximal monotone si

- a) $(Av, v) \geq 0, \forall v \in D(A)$,
- b) $\forall g \in H, \exists u \in D(A)$ tel que $u + Au = g$.

Proposition 13 Soit $A : D(A) \subset H \rightarrow H$ un opérateur maximal monotone. Alors

- a) $D(A)$ est dense dans H .
- b) A est fermé.
- c) Pour tout $\lambda > 0$, $(I + \lambda A)$ est bijectif de $D(A)$ sur H , $(I + \lambda A)^{-1}$ est un opérateur borné (i.e il existe une constante $c \geq 0$ telle que $\| Au \| \leq c \| u \|, \forall u \in D(A)$) et $\| (I + \lambda A)^{-1} \| \leq 1$.

Considérons le problème

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} + Au(t) = g(t) \text{ sur } [0, T] \\ u(0) = 0. \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

Le théorème VII.10 dit :

Théorème 13 On suppose que A vérifie $D(\bar{A}) = H$ et $\forall \lambda > 0, I + \lambda A$ est bijectif de $D(A)$ sur H avec $\| (I + \lambda A)^{-1} \| \leq 1$. Alors pour tout $u_0 \in D(A)$ et tout $g \in C^1([0, T]; H)$, il existe une fonction

$$u \in C^1([0, T]; H) \cap C([0, T]; D(A)).$$

B.2 Problème spectral

Dans cette partie, nous allons résoudre le problème spectral : *Pour $D > 0, \rho > 0, \nu < 0$ donnés, trouver les valeurs μ pour lesquelles il existe une fonction $w :]0, L[\rightarrow \mathbb{R}$ non identiquement nulle vérifiant*

$$-Dw''(x) + \rho w(x) = \mu w(x), x \in [0, L] \quad (\text{B.2})$$

$$w(0) = w'(L) - \nu w(L) = 0. \quad (\text{B.3})$$

Ce problème peut se récrire au sens des distributions. En effet, si $v \in \mathcal{V} := \{v \in H^1(]0, L[) / v(0) = 0\}$, on déduit de (B.2) et de la formule de Green que :

$$-D \int_0^L w'' v dx + \rho \int_0^L w v dx = D \int_0^L \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + \rho \int_0^L w v dx - D\nu w(L)v(L) = \mu \int_0^L w v dx, \quad (\text{B.4})$$

soit

$$D \int_0^L \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + \rho \int_0^L w v dx - D\nu w(L)v(L) = \mu \int_0^L w v dx. \quad (\text{B.5})$$

Posons $\bar{a}(w, v) = D \int_0^L \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} dx + \rho \int_0^L w v dx - D\nu w(L)v(L)$. Ainsi résoudre le problème spectral précédent revient à résoudre le problème spectral suivant :
trouver les valeurs $\mu \in \mathbb{R}$ pour lesquelles il existe une solution $w \in \mathcal{V}$, $w \neq 0$ de l'équation :

$$\forall v \in \mathcal{V}, \bar{a}(w, v) = \mu(w, v). \quad (\text{B.6})$$

Précisons μ et w .

En prenant $v = w$ dans (B.6), on en déduit que les valeurs propres μ de ce problème spectral sont strictement positives.
(B.2) se récrit

$$w''(x) + \frac{\mu - \rho}{D} w(x) = 0 \quad (\text{B.7})$$

qui est une équation différentielle du second ordre admettant des solutions de la forme

$$w(x) = A \cos(\xi x) + B \sin(\xi x)$$

où $\xi^2 = \frac{\mu - \rho}{D}$.

Des conditions (B.3), on déduit la valeur de la constante A , soit $A = 0$. De plus, ξ qui est solution de l'équation $\xi L \cot(\xi L) = \nu L$ et vérifie $\xi_n = (2n + 1)\frac{\pi}{2} + \varepsilon_n$ avec $0 < \varepsilon_n < \pi/2$ et $\lim_{n \rightarrow \infty} \varepsilon_n = 0$, d'où $\mu = \rho + D\xi^2$. Comme nous allons le voir dans la suite, les différentes valeurs de μ , que nous allons noter μ_n définissent une suite croissante tendant vers $+\infty$ et en choisissant les B_n correctement, les vecteurs propres associés, w_n une base orthonormale de $L^2(\Omega)$. Pour cela, nous allons appliquer le théorème 6.2-1 de [50] qui dit :

Théorème 14 On se donne

(i) deux espaces de Hilbert \mathcal{V} et H sur \mathbb{R} de dimensions infinies vérifiant

$$\mathcal{V} \subset H \text{ avec injection continue et compacte,} \quad (\text{B.8})$$

$$\mathcal{V} \text{ est dense dans } H, \quad (\text{B.9})$$

(ii) une forme bilinéaire $(u, v) \mapsto a(u, v)$ symétrique, continue sur $\mathcal{V} \times \mathcal{V}$ et \mathcal{V} -elliptique.

Considérons le problème spectral :

trouver les valeurs $\lambda \in \mathbb{R}$ pour lesquelles il existe une solution $u \in V$, $u \neq 0$ de l'équation

$$\forall v \in \mathcal{V}, a(u, v) = \lambda(u, v). \quad (\text{B.10})$$

Alors les valeurs propres du problème (B.10) forment une suite croissante tendant vers $+\infty$

$$0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_m \leq \dots, \quad (\text{B.11})$$

et il existe une base hilbertienne orthonormale de H formée de vecteurs propres w_m tels que :

$$\forall v \in \mathcal{V}, a(w_m, v) = \lambda_m(w_m, v), \quad m = 1, 2, \dots \quad (\text{B.12})$$

Démonstration : Posons $H = L^2(]0, L])$ et reprenons l'espace \mathcal{V} défini précédemment par $\mathcal{V} := \{v \in H^1(]0, L]) / v(0) = 0\}$. Munissons le de la norme de $H^1(]0, L])$.

Nous allons maintenant vérifier les hypothèses du théorème avec la forme bilinéaire \bar{a} telle que $\bar{a} : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R} : (w, v) \mapsto D \int_0^L \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} dx + \rho \int_0^L w v dx - D \nu v(L) w(L)$ et le problème spectral défini en (B.6).

1. H étant un espace de Hilbert, montrons que \mathcal{V} l'est également.

Considérons la fonction $\varphi : H^1(]0, L]) \rightarrow L^2(\{0\}) : v \mapsto v(0)$. Elle est linéaire, continue, et d'après le théorème sur les traces, $\varphi^{-1}(\{0\})$ est un fermé de $H^1(\Omega)$. Donc, \mathcal{V} est un espace de Hilbert pour la norme de $H^1(]0, L])$. La continuité de l'injection provient de celle de $H^1(]0, L])$ dans $L^2(]0, L])$. Pour ce qui est de la compacité, elle vient des inclusions $H^2(]0, L]) \subset \mathcal{V} \subset L^2(]0, L])$ et de l'injection compacte de $H^2(]0, L])$ dans $L^2(]0, L])$.

2. $\bar{a}(\cdot, \cdot)$ est clairement une forme bilinéaire, symétrique. De plus, on a :

$$|\bar{a}(w, v)| \leq D \left| \int_0^L \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} dx \right| + \rho \left| \int_0^L w v dx \right| + D |\nu| |w(L)v(L)|. \quad (\text{B.13})$$

Or pour w, v dans \mathcal{V} , on peut écrire :

$$|w(L)v(L)|^2 = |w(L) - w(0)|^2 |v(L) - v(0)|^2 = \left(\int_0^L \frac{\partial w}{\partial x} dx \right)^2 \left(\int_0^L \frac{\partial v}{\partial x} dx \right)^2$$

et en vertu du théorème de Cauchy-Schwartz, il vient

$$\begin{aligned} |w(L)v(L)|^2 &\leq L^2 \int_0^L \left| \frac{\partial w}{\partial x} \right|^2 dx \int_0^L \left| \frac{\partial v}{\partial x} \right|^2 dx \\ &\leq L^2 \|w\|_{H^1(\Omega)}^2 \|v\|_{H^1(\Omega)}^2. \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

En appliquant Cauchy-Schwartz aux deux premières intégrales du membre de droite puis la définition de la norme H^1 , on obtient :

$$|\bar{a}(w, v)| \leq \max(D, \rho, D|\nu|L) \|w\|_{H^1} \|v\|_{H^1}. \quad (\text{B.15})$$

Donc \bar{a} est continue.

2. De plus, \bar{a} vérifie l'hypothèse de \mathcal{V} -ellipticité. En effet, d'après le lemme de Poincaré, il existe une constante C telle que :

$$\forall w \in \mathcal{V}, \bar{a}(w, w) \geq D \left\| \frac{\partial w}{\partial x} \right\|_{L^2}^2 \geq DC \|w\|_{H^1}^2. \quad (\text{B.16})$$

Ainsi, d'après le théorème 6.2-1, les valeurs propres du problème (B.6) forment une suite croissante $0 < \mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots \leq \mu_m \leq \dots$ et les vecteurs propres associés (w_n) une base hilbertienne orthonormale de $H = L^2(0, L)$ telles que :

$$\forall v \in \mathcal{V}, \bar{a}(w_n, v) = \mu_n(w_n, v). \blacksquare \quad (\text{B.17})$$

Annexe C

Compléments de démonstrations dans le cas où le débit est constant

Lemme 4 Pour tout entier $r \in [1, N]$, on a les égalités suivantes :

$$\alpha' \alpha^{r-1} v_{N-r} = f_r(v_N) + \sum_{i=N-r+1}^N c_{r,i} R_i, \quad (\text{C.1})$$

avec $f_r(v_N)$ une fonction linéaire en v_N et ses dérivées et les constantes $c_{r,i}$ définies par :

- si $i = 1$, $c_{N,1} = -\alpha' \alpha^{N-2}$,
- si $i = 2$, $c_{N-1,2} = -\alpha' \alpha^{N-3}$, $c_{N,2} = \beta \alpha' \alpha^{N-3}$,
- si $i = 3, \dots, N$ est fixé, on peut les regrouper pour définir la suite $(c_{r,i})_{N+3-i \leq r \leq N}$ par la relation de récurrence :

$$\text{pour tout } r \in [N + 3 - i, N], c_{r,i} = -\beta c_{r-1,i} - \alpha \gamma c_{r-2,i}$$

avec comme conditions initiales :

- si $i=N$, $c_{1,N} = -1$ et $c_{2,N} = \beta$,
- si $i \in [3, N - 1]$, $c_{N-i+1,i} = -\alpha' \alpha^{N-i-1}$, et $c_{N-i+2,i} = \alpha' \beta \alpha^{N-i-1}$.

Démonstration : Pour mieux se représenter les étapes de la démonstrations, nous allons nous appuyer sur le tableau (C.1) qui regroupe tous les coefficients $c_{r,i}$ présents dans l'équation (C.1). Tout d'abord, l'idée de la démonstration de ce lemme consiste à partir de la dernière ligne de (S_N) .

$r \backslash i$	1	2	3	...	$N - 1$	N
N	$c_{N,1}$	$c_{N,2}$	$c_{N,3}$...	$c_{N,N-1}$	$c_{N,N}$
$N - 1$		$c_{N-1,2}$	$c_{N-1,3}$...	$c_{N-1,N-1}$	$c_{N-1,N}$
$N - 2$			$c_{N-2,3}$...	$c_{N-2,N-1}$	$c_{N-2,N}$
\vdots				\ddots	\vdots	\vdots
2					$c_{2,N-1}$	$c_{2,N}$
1						$c_{1,N}$

TAB. C.1 – $(c_{r,i})$.

v_N étant observé, nous pourrions définir v_{N-1} en fonction de l'observation et de R_N , le coefficient

devant R_N sera noté $c_{1,N}$. Celui-ci est alors placé dans la dernière ligne du tableau. Puis en reprenant l'avant dernière ligne de (S_N) , nous obtiendrons v_{N-2} en fonction de l'observation v_N , de R_{N-1} dont le coefficient sera noté $c_{2,N-1}$ et de R_N de coefficient $c_{2,N}$. Ces coefficients sont alors placés dans l'avant dernière ligne du tableau C.1. On remontera ainsi jusqu'à la première ligne, ce qui permettra de compléter le tableau C.1 et d'obtenir (C.1) pour tout $r \in [1, N]$. Les coefficients $c_{r,i}$ seront alors définis par :

– pour $r=1$,

$$c_{1,N} = -1, \quad (\text{C.2})$$

– pour $r=2$,

$$c_{2,N} = \beta, c_{2,N-1} = -\alpha' \quad (\text{C.3})$$

– pour $r \in [3, N]$,

★ pour $i = N - r + 1$,

$$c_{r,N-r+1} = -\alpha' \alpha^{r-2}, \quad (\text{C.4})$$

★ pour $i = N - r + 2$,

$$c_{r,N-r+2} = \beta \alpha' \alpha^{r-3}, \quad (\text{C.5})$$

★ pour $i \in [N - r + 3, N]$,

$$c_{r,i} = -\alpha \gamma c_{r-2,i} - \beta c_{r-1,i}. \quad (\text{C.6})$$

La deuxième étape de la démonstration va consister à récrire la suite $(c_{r,i})$ en la définissant de la première colonne du tableau C.1 à la dernière. Cette réécriture nous permettra d'utiliser les propriétés sur les suites pour donner leur expression.

Première étape : Démontrons par récurrence sur r (C.1)-(C.6). Remarquons qu'il faudra initialiser la récurrence jusqu'à l'ordre 3 étant donné la définition des coefficients.

– De la dernière équation de (S_N) , il vient que :

$$\alpha' v_{N-1} = \dot{v}_N - \beta v_N - R_N. \quad (\text{C.7})$$

En posant $f_1(v_N) = \dot{v}_N - \beta v_N$, $c_{1,N} = -1$, (C.2) est vérifié ainsi que (C.1) pour $r = 1$. D'après l'avant dernière équation de (S_N) , on peut exprimer v_{N-2} en fonction de v_{N-1} et v_N , c'est à dire :

$$\alpha v_{N-2} = \dot{v}_{N-1} - \beta v_{N-1} - \gamma v_N - R_{N-1}.$$

En multipliant cette dernière équation par α' et en remplaçant $\alpha' v_{N-1}$ et $\alpha' \dot{v}_{N-1}$ par leur expression tirée de (C.7), on trouve :

$$\alpha' \alpha v_{N-2} = f_2(v_N) - \alpha' R_{N-1} + \beta R_N, \quad (\text{C.8})$$

avec $f_2(v_N) = \ddot{v}_N - 2\beta \dot{v}_N + (\beta^2 - \alpha' \gamma) v_N$. Donc en posant $c_{2,N-1} = -\alpha'$ et $c_{2,N} = \beta$, le lemme est démontré pour $r=2$.

Pour démontrer (C.1), (C.4), (C.5), (C.6), nous allons effectuer une récurrence sur $r \in [3, N]$.

Vérifions le cas $r=3$. Du système (S_N) , on tire :

$$\alpha v_{N-3} = \dot{v}_{N-2} - \beta v_{N-2} - \gamma v_{N-1} - R_{N-2}.$$

En multipliant cette équation par $\alpha' \alpha$ et en remplaçant $\alpha' v_{N-1}$ par son expression tirée de (C.7) et $\alpha' \alpha \dot{v}_{N-2}$, $\alpha' \alpha v_{N-2}$ tirés de (C.8), il vient que :

$$\begin{aligned} \alpha' \alpha^2 v_{N-3} &= \dot{f}_2(v_N) - \beta f_2(v_N) - \alpha \gamma \dot{v}_N + \alpha \beta \gamma v_N \\ &\quad - \alpha' \alpha R_{N-2} + \alpha' \beta R_{N-1} - (\beta^2 - \alpha \gamma) R_N. \end{aligned}$$

D'où, en posant $f_3(v_N) = \dot{f}_2(v_N) - \beta f_2(v_N) - \alpha \gamma \dot{v}_N + \alpha \beta \gamma v_N$, $c_{3,N-2} = -\alpha' \alpha$, $c_{3,N-1} = \alpha' \beta$, $c_{3,N} = \alpha \gamma - \beta^2$, la propriété est vérifiée au rang $r = 3$.

– Supposons désormais la propriété vraie jusqu'au rang $r - 1 < N$. Nous disposons en particulier des relations :

$$\alpha' \alpha^{r-2} v_{N-r+1} = f_{r-1}(v_N) + \sum_{i=N-r+2}^N c_{r-1,i} R_i, \quad (\text{C.9})$$

et

$$\alpha' \alpha^{r-3} v_{N-r+2} = f_{r-2}(v_N) + \sum_{i=N-r+3}^N c_{r-2,i} R_i, \quad (\text{C.10})$$

avec $f_{r-1}(v_N)$ et $f_{r-2}(v_N)$ des fonctions linéaires en v_N et ses dérivées. Or d'après (S_N) , on a :

$$\dot{v}_{N-r+1} = \alpha v_{N-r} + \beta v_{N-r+1} + \gamma v_{N-r+2} + R_{N-r+1}, \quad (\text{C.11})$$

soit encore,

$$\alpha v_{N-r} = \dot{v}_{N-r+1} - \beta v_{N-r+1} - \gamma v_{N-r+2} - R_{N-r+1}. \quad (\text{C.12})$$

En multipliant cette dernière équation par $\alpha' \alpha^{r-2}$ et en remplaçant $\alpha' \alpha^{r-2} v_{N-r+1}$, $\alpha' \alpha^{r-2} \dot{v}_{N-r+1}$ tirés de (C.9) et $\alpha' \alpha^{r-3} v_{N-r+2}$ tirée de (C.10), on trouve :

$$\alpha' \alpha^{r-1} v_{N-r} = \dot{f}_{r-1}(v_N) - \beta f_{r-1}(v_N) - \gamma \alpha f_{r-2}(v_N)$$

$$+ \sum_{i=N-r+3}^N (-\alpha \gamma c_{r-2,i} - \beta c_{r-1,i}) R_i$$

$$- \beta c_{r-1,N-r+2} R_{N-r+2} - \alpha' \alpha^{r-2} R_{N-r+1}.$$

Posons alors $f_r(v_N) = \dot{f}_{r-1}(v_N) - \beta f_{r-1}(v_N) - \gamma \alpha f_{r-2}(v_N)$,

$$c_{r,i} = -\alpha \gamma c_{r-2,i} - \beta c_{r-1,i} \text{ pour } N - r + 3 \leq i \leq N,$$

$$c_{r,N-r+1} = -\alpha' \alpha^{r-2} \text{ et } c_{r,N-r+2} = -\beta c_{r-1,N-r+2}.$$

Or, par hypothèse de récurrence sur les conditions initiales, on déduit de (C.5) appliqué au rang $r-1$ que $c_{r-1,N-r+2} = -\alpha' \alpha^{r-3}$, d'où $c_{r,N-r+2} = \beta \alpha' \alpha^{r-3}$. La propriété est donc démontrée au rang r , elle est donc vraie pour tout $r \leq N$.

Deuxième étape : Récrivons la suite $(c_{r,i})_{i=N-r+1,\dots,N}$ définie précédemment de la façon suivante :

– pour $i = 1$, $c_{N,1} = -\alpha' \alpha^{N-2}$,

- pour $i = 2$, $c_{N-1,2} = -\alpha' \alpha^{N-3}$, $c_{N,2} = \beta \alpha' \alpha^{N-3}$,
- pour $i = 3, \dots, N$ fixé, comme la suite $(c_{r,i})_{N+3-i \leq r \leq N}$ définie par la relation de récurrence :

$$\text{pour tout } r \in [N+3-i, N], c_{r,i} = -\beta c_{r-1,i} - \alpha \gamma c_{r-2,i}$$

et qui admet pour conditions initiales :

- ★ pour $i=N$, $c_{1,N} = -1$ et $c_{2,N} = \beta$,
- ★ pour $i \in [3, N-1]$, $c_{N-i+1,i} = -\alpha' \alpha^{N-i-1}$, et $c_{N-i+2,i} = \alpha' \beta \alpha^{N-i-1}$.

Pour le montrer, nous allons distinguer plusieurs cas selon les valeurs de i .

- Le cas $i = 1$, est tiré de (C.4) en prenant $r = N$, alors $i = N - r + 1 = 1$ et $c_{N,1} = -\alpha' \alpha^{N-2}$.
- Le cas $i = 2$ provient de (C.4) (resp. (C.5)) en prenant $r = N - 1$, (respectivement $r = N$) car alors $i = N - r + 1 = 2$ (resp. $i = N - r + 2 = 2$) d'où $c_{N-1,2} = -\alpha' \alpha^{N-3}$ (resp. $c_{N,2} = \beta \alpha' \alpha^{N-3}$).
- Pour le cas $i = N$, les conditions initiales sont vérifiées grâce à (C.2) et (C.3). De plus, $(c_{r,N})_{3 \leq r \leq N} = (-\beta c_{r-1,N} - \alpha \gamma c_{r-2,N})_{3 \leq r \leq N}$ est vrai d'après (C.6) pour le cas particulier $r \in [3, N]$, $i = N \in [3, N]$.
- Le cas $i = N$ étant fait, pour traiter le cas $i \in [3, N-1]$, nous allons faire une démonstration par récurrence sur i .
Notons $P(i)$ la propriété : "Pour $i \in [3, N-1]$, la suite $(c_{r,i})_{N+3-i \leq r \leq N}$ est définie par la relation de récurrence linéaire d'ordre 2 suivante :

$$\text{pour tout } r \in [N+3-i, N] \quad c_{r,i} = -\beta c_{r-1,i} - \alpha \gamma c_{r-2,i}$$

avec pour conditions initiales :

$$c_{N-i+1,i} = -\alpha' \alpha^{N-i-1}, \quad c_{N-i+2,i} = \alpha' \beta \alpha^{N-i-1}.$$

- ★ Montrons qu'elle est vraie au rang 3. Les conditions initiales proviennent de (C.4) et (C.5) appliqués aux cas particuliers $r = N - 2$, $i = 3$ (resp. $r = N - 1$ et $i = 3$).

La relation

$$\forall r \in [N+3-i, N], \quad c_{r,i} = -\beta c_{r-1,i} - \alpha \gamma c_{r-2,i}$$

vient du cas particulier $r = N$ de (C.6). En effet, on vérifie bien que $i \in [3, N]$.

- ★ Supposons la propriété vraie jusqu'au rang $i_0 - 1 \in [3, N-2]$. Montrons $P(i_0)$. Les conditions initiales proviennent de (C.4) et (C.5) appliqués aux cas particuliers $r = N - i_0 + 1$, $i = i_0 - 1$ (resp. $r = N - i_0 + 2$ et $i = i_0$).

Puis la relation

$$\forall r \in [N+3-i_0, N], \quad c_{r,i_0} = -\beta c_{r-1,i_0} - \alpha \gamma c_{r-2,i_0}$$

vient de (C.6) avec $r \in [N - i_0 + 3, N]$. En effet, on vérifie facilement que dans ce cas $r \in [4, N]$ et $i_0 \in [N - r + 3, N]$. ■

Lemme 5 La suite $(c_{r,i})_{N+3-i \leq r \leq N} = (-\beta c_{r-1,i} - \alpha \gamma c_{r-2,i})_{N+3-i \leq r \leq N}$ pour $i = 3, \dots, N$ et admettant pour conditions initiales :

- pour $i=N$, $c_{1,N} = -1$ et $c_{2,N} = \beta$,
- pour $i \in [3, N-1]$, $c_{N-i+1,i} = -\alpha' \alpha^{N-i-1}$, et $c_{N-i+2,i} = \alpha' \beta \alpha^{N-i-1}$.

a pour expression :

- pour $i = N$, $c_{r,N} = \frac{1}{\sqrt{\Delta}} X_1^r - \frac{1}{\sqrt{\Delta}} X_2^r$ pour $3 \leq r \leq N$,

– pour $i \in [3, N-1]$, $c_{r,i} = \frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\sqrt{\Delta}} X_1^{r-N+i} - \frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\sqrt{\Delta}} X_2^{r-N+i}$
pour $N+3-i \leq r \leq N$.
avec $\Delta = \beta^2 - 4\alpha\gamma$, $X_1 = -\frac{\beta+\sqrt{\Delta}}{2} > 0$ et $X_2 = \frac{-\beta+\sqrt{\Delta}}{2} > 0$.

Démonstration : Considérons tout d'abord la suite (u_r) suivante, j étant un entier fixé plus grand ou égal à 0 :

$$\begin{cases} u_r + \beta u_{r-1} + \alpha\gamma u_{r-2} = 0, \text{ pour } r \geq j+3, \\ u_{j+1}, u_{j+2} \text{ donnés} \end{cases} \quad (\text{C.13})$$

Cette suite est une suite récurrente linéaire d'ordre 2 à coefficients constants. Le discriminant du polynôme caractéristique vaut $\Delta = \beta^2 - 4\alpha\gamma$ car α, β, γ étant strictement positifs, on a :

$$\begin{aligned} \beta^2 = (\alpha + \gamma + R)^2 > 4\alpha\gamma &\Leftrightarrow (\alpha + \gamma)^2 + R^2 + 2(\alpha + \gamma)R > 4\alpha\gamma \\ &\Leftrightarrow (\alpha - \gamma)^2 + R^2 + 2(\alpha + \gamma)R > 0. \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

Donc il admet deux racines distinctes $X_1 = -\frac{\beta+\sqrt{\Delta}}{2} > 0$ et $X_2 = \frac{-\beta+\sqrt{\Delta}}{2} > 0$; toutes deux positives car β est négatif. Ainsi, u_r est de la forme

$$u_r = AX_1^r + BX_2^r$$

et en prenant en compte les conditions initiales, il s'écrit :

$$u_r = \frac{X_2 u_{j+1} - u_{j+2}}{X_1^{j+1}(X_2 - X_1)} X_1^r - \frac{X_1 u_{j+1} - u_{j+2}}{X_2^{j+1}(X_2 - X_1)} X_2^r,$$

soit encore :

$$u_r = \frac{X_2 u_{j+1} - u_{j+2}}{\sqrt{\Delta}} X_1^{r-j-1} - \frac{X_1 u_{j+1} - u_{j+2}}{\sqrt{\Delta}} X_2^{r-j-1}.$$

Revenons à notre suite initiale. D'après ce qu'il précède, en prenant $c_{r,i} = u_r$ pour i fixé, et comme $X_2 + \beta = -X_1$ et $X_1 + \beta = -X_2$, elle s'écrit :

– pour $i = N, j = 0$ fixés :

$$\begin{aligned} \forall r \geq 1, c_{r,N} &= \frac{-X_2 - \beta}{\sqrt{\Delta}} X_1^{r-1} - \frac{-X_1 - \beta}{\sqrt{\Delta}} X_2^{r-1}, \\ &= \frac{1}{\sqrt{\Delta}} X_1^r - \frac{1}{\sqrt{\Delta}} X_2^r. \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

– pour $i \in [3, N-1], j = N-i$ fixés

$$\begin{aligned} \forall r \in [N-i+3, N], c_{r,i} &= \frac{X_2(-\alpha' \alpha^{N-i-1}) - \alpha' \beta \alpha^{N-i-1}}{\sqrt{\Delta}} X_1^{r-N+i-1} \\ &\quad - \frac{X_1(-\alpha' \alpha^{N-i-1}) - \alpha' \beta \alpha^{N-i-1}}{\sqrt{\Delta}} X_2^{r-N+i-1} \\ &= -\frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\sqrt{\Delta}} (X_2 + \beta) X_1^{r-N+i-1} + \frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\sqrt{\Delta}} (X_1 + \beta) X_2^{r-N+i-1} \\ &= \frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\sqrt{\Delta}} X_1^{N-i-j} - \frac{\alpha' \alpha^{N-i-1}}{\sqrt{\Delta}} X_2^{r-N+i}, \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

Ce qu'il fallait démontrer. ■

Annexe D

Compléments de démonstrations dans le cas où le débit est une fonction dépendant du temps

Lemme 6

Pour tout entier $r \in [1, N]$, on a les égalités suivantes :

$$\alpha' \alpha^{r-1} v_{N-r} = g_{r,N}(t) + \sum_{i=0}^{r-1} c_{r,i} l^{(i)}(t), \quad (\text{D.1})$$

avec $g_{r,N}(t)$ une fonction linéaire en v_N et ses dérivées définie par la relation de récurrence

$$\begin{cases} g_{1,N} = \dot{v}_N - \beta v_N, \\ g_{2,N} = \ddot{v}_N - 2\beta \dot{v}_N + (\beta^2 - \alpha' \gamma) v_N, \\ g_{r+1,N} = \dot{g}_{r,N}(t) - \beta g_{r,N}(t) - \alpha \gamma g_{r-1,N}(t), \text{ pour } r \in [3, N]. \end{cases} \quad (\text{D.2})$$

et les suites $(c_{r,i})$ définies par :

★ pour $r = 1$:

$$c_{1,0} = -R_N, \quad (\text{D.3})$$

★ pour $r = 2$:

$$\begin{cases} c_{2,0} = \beta R_N - \alpha' R_{N-1}, \\ c_{2,1} = -R_N. \end{cases} \quad (\text{D.4})$$

★ pour $r \in [3, N]$:

$$c_{r,r-1} = -R_N, \quad (\text{D.5})$$

$$c_{r,0} = -\gamma \alpha c_{r-2,0} - \beta c_{r-1,0} - \alpha' \alpha^{r-2} R_{N-r+1}, \quad (\text{D.6})$$

$$c_{r,i} = c_{r-1,i-1} - \beta c_{r-1,i} - \alpha \gamma c_{r-2,i}, \text{ pour } i = 1, \dots, r-3, \quad (\text{D.7})$$

$$c_{r,r-2} = c_{r-1,r-3} - \beta c_{r-1,r-2}, \quad (\text{D.8})$$

★ pour $r \in [3, N]$:

$$c_{r,r-2} = c_{2,0} - (r-2)\beta c_{2,1}. \quad (\text{D.9})$$

Démonstration : Nous allons démontrer (D.1) par récurrence sur r . L'expression des suites $(c_{r,i})$, données par (D.4), (D.5), (D.6), (D.7), (D.8) découleront de cette démonstration. Comme les expressions (D.5), (D.6), (D.7) et (D.8) sont vraies à partir de $r = 3$, nous démontrerons (D.1) jusqu'à $r = 3$ pour amorcer la démonstration par récurrence. Puis, une autre démonstration par récurrence sera faite pour prouver (D.9).

Montrons (D.1) par récurrence sur r .

– $r=1$: nous devons établir les relations suivantes :

$$\begin{cases} \alpha' v_{N-1}(t) = g_{1,N}(t) + c_{1,0}l(t), \\ c_{1,0} = -R_N. \end{cases} \quad (\text{D.10})$$

La dernière équation du système se récrit :

$$\alpha' v_{N-1} = \dot{v}_N - \beta v_N - lR_N. \quad (\text{D.11})$$

Ainsi, en posant $g_{1,N} := \dot{v}_N - \beta v_N$ et $c_{1,0} := -R_N$, (D.1) et (D.3) sont vérifiés au rang 1.

– $r=2$: il faut démontrer :

$$\begin{cases} \alpha' \alpha v_{N-2}(t) = g_{2,N}(t) + (\beta R_N - \alpha' R_{N-1})l(t) - R_N l'(t), \\ c_{2,0} = \beta R_N - \alpha' R_{N-1}, \\ c_{2,1} = -R_N. \end{cases} \quad (\text{D.12})$$

D'après l'avant dernière équation du système, on peut exprimer v_{N-2} en fonction de v_{N-1} et v_N , c'est à dire :

$$\alpha v_{N-2} = \dot{v}_{N-1} - \beta v_{N-1} - \gamma v_N - lR_{N-1}.$$

En multipliant cette dernière équation par α' et en remplaçant $\alpha' v_{N-1}$ et $\alpha' \dot{v}_{N-1}$ par leur expression tirée de (D.11), on trouve :

$$\alpha' \alpha v_{N-2} = g_{2,N} + (\beta R_N - \alpha' R_{N-1})l - R_N l', \quad (\text{D.13})$$

avec $g_{2,N} := \ddot{v}_N - 2\beta \dot{v}_N + (\beta^2 - \alpha' \gamma)v_N$. Donc en posant $c_{2,0} := \beta R_N - \alpha' R_{N-1} = -\beta c_{1,0} - \alpha' R_{N-1}$ et $c_{2,1} := -R_N$, le lemme est démontré pour $r=2$.

– Pour démontrer la propriété au rang $r = 3$, nous devons établir :

$$\begin{cases} \alpha' \alpha^2 v_{N-3}(t) = g_{3,N}(t) + \sum_{i=0}^2 c_{3,i} l^{(i)}(t), \\ c_{3,0} = -\beta c_{2,0} - \alpha \gamma c_{1,0} - \alpha' \alpha R_{N-2}, \\ c_{3,1} = c_{2,0} - \beta c_{2,1}, \\ c_{3,2} = -R_N. \end{cases} \quad (\text{D.14})$$

Reprenons la (N-2)ème équation. Multipliée par $\alpha' \alpha$, elle donne :

$$\alpha' \alpha^2 v_{N-3} = \alpha' \alpha \dot{v}_{N-2} - \alpha' \alpha \beta v_{N-2} - \alpha' \alpha \gamma v_{N-1} - \alpha' \alpha l R_{N-2}.$$

En reprenant les expressions (D.10) et (D.13) et remplacées dans l'équation ci-dessus, nous obtenons :

$$\alpha' \alpha^2 v_{N-3} = g_{3,N} + \sum_{i=0}^2 c_{3,i} l^{(i)}, \quad (\text{D.15})$$

avec $g_{3,N} := \dot{g}_{2,N} - \beta g_{2,N} - \alpha \gamma g_{1,N}$, $c_{3,0} := -\beta c_{2,0} - \alpha \gamma c_{1,0} - \alpha' \alpha R_{N-2}$, $c_{3,1} := c_{2,0} - \beta c_{2,1}$, $c_{3,2} := c_{2,1} = -R_N$. Ainsi, le lemme est démontré au rang 3.

- Supposons que (D.1), (D.5)-(D.8) sont vérifiés jusqu'au rang $r \in [1, N-1]$. Alors la (N-r)ème équation qui est égale à :

$$\dot{v}_{N-r} = \alpha v_{N-r-1} + \beta v_{N-r} + \gamma v_{N-r+1} + l R_{N-r} \quad (\text{D.16})$$

se récrit, après l'avoir multipliée par $\alpha' \alpha^{r-1}$:

$$\alpha' \alpha^r v_{N-r-1} = \alpha' \alpha^{r-1} \dot{v}_{N-r} - \alpha' \alpha^{r-1} \beta v_{N-r} - \alpha' \alpha^{r-1} \gamma v_{N-r+1} - \alpha' \alpha^{r-1} l R_{N-r}. \quad (\text{D.17})$$

Or, d'après l'hypothèse de récurrence appliquée aux rangs $r-1$ et r , on a :

$$\begin{cases} \alpha' \alpha^{r-2} v_{N-r+1} = g_{r-1,N} + \sum_{i=0}^{r-2} c_{r-1,i} l^{(i)}, \\ \alpha' \alpha^{r-1} v_{N-r} = g_{r,N} + \sum_{i=0}^{r-1} c_{r,i} l^{(i)}. \end{cases} \quad (\text{D.18})$$

Donc en reprenant (D.17) et en remplaçant $\alpha' \alpha^{r-2} v_{N-r+1}$, $\alpha' \alpha^{r-1} v_{N-r}$ et $\alpha' \alpha^{r-1} \dot{v}_{N-r}$ par les expressions données par (D.18), on obtient :

$$\begin{aligned} \alpha' \alpha^r v_{N-r-1} &= (\dot{g}_{r,N} - \beta g_{r,N} - \alpha \gamma g_{r-1,N}) + (-\beta c_{r,0} - \alpha \gamma c_{r-1,0} - \alpha' \alpha^{r-1} R_{N-r}) l \\ &+ \sum_{i=1}^{r-2} (c_{r,i-1} - \beta c_{r,i} - \alpha \gamma c_{r-1,i}) l^{(i)} + (c_{r,r-2} - \beta c_{r,r-1}) l^{(r-1)} + c_{r,r-1} l^{(r)}. \end{aligned} \quad (\text{D.19})$$

En posant $g_{r+1,N}(t) := \dot{g}_{r,N}(t) - \beta g_{r,N}(t) - \alpha \gamma g_{r-1,N}(t)$, $c_{r+1,0} := -\beta c_{r,0} - \alpha \gamma c_{0,N-r+1} - \alpha' \alpha^{r-1} R_{N-r}$, $c_{r+1,i} := c_{r,i-1} - \beta c_{r,i} - \alpha \gamma c_{r-1,i}$, pour $i = 1, \dots, r-2$, $c_{r+1,r-1} := c_{r,r-2} - \beta c_{r,r-1}$ et $c_{r+1,r} := c_{r,r-1} = -R_N$, la propriété est vérifiée au rang $r+1$.

Ainsi, le lemme est vrai pour tout $r \in [1, N-1]$.

Reste à vérifier l'égalité (D.9), c'est à dire $c_{r,r-2} = c_{2,0} - (r-2)\beta c_{2,1}$. Pour cela, nous allons refaire une démonstration par récurrence sur r .

- $r=1, 2, 3$: Cette propriété a été démontrée dans la preuve précédente.

- Supposons qu'elle soit vraie jusqu'au rang $r \in [3, N-1]$, c'est à dire que l'on ait $c_{r,r-2} = c_{2,0} - (r-2)\beta c_{2,1}$, et montrons que $c_{r+1,r-1} = c_{2,0} - (r-1)\beta c_{2,1}$.

De (D.8), on tire :

$$c_{r+1,r-1} = c_{r,r-2} - \beta c_{r,r-1}. \quad (\text{D.20})$$

Mais par hypothèse de récurrence, on connaît $c_{r,r-2}$ et d'après (D.5) et la deuxième équation de (D.4), $c_{r,r-1} = c_{2,1}$, d'où :

$$\begin{aligned} c_{r+1,r-1} &= c_{2,0} - (r-2)\beta c_{2,1} - \beta c_{2,1} \\ &= c_{2,0} - (r-1)\beta c_{2,1}. \blacksquare \end{aligned} \quad (\text{D.21})$$

Proposition 14 Les coefficients $(c_{r,i})_{i \in [0, r-3]}$ pour $r \in [1, N]$ fixé définis dans le lemme 6 ne dépendent que des constantes du système et des $(R_i)_{i \in [1, N]}$.

Démonstration : Rappelons ce que l'on a :

★ pour $r = 1$:

$$c_{1,0} = -R_N, \quad (\text{D.22})$$

★ pour $r = 2$:

$$\begin{cases} c_{2,0} = \beta R_N - \alpha' R_{N-1}, \\ c_{2,1} = -R_N. \end{cases} \quad (\text{D.23})$$

★ pour $r \in [3, N]$:

$$c_{r,r-1} = -R_N, \quad (\text{D.24})$$

$$c_{r,0} = -\gamma \alpha c_{r-2,0} - \beta c_{r-1,0} - \alpha' \alpha^{r-2} R_{N-r+1}, \quad (\text{D.25})$$

$$c_{r,i} = c_{r-1,i-1} - \beta c_{r-1,i} - \alpha \gamma c_{r-2,i}, \text{ pour } i = 1, \dots, r-3, \quad (\text{D.26})$$

$$c_{r,r-2} = c_{r-1,r-3} - \beta c_{r-1,r-2}, \quad (\text{D.27})$$

★ pour $r \in [3, N]$:

$$c_{r,r-2} = c_{2,0} - (r-2)\beta c_{2,1}. \quad (\text{D.28})$$

Pour montrer cette proposition, nous allons donner l'expression des coefficients $(c_{r,0})_{r \in [1, N]}$ puis, celle des $(c_{r,i})_{i \in [1, r-3]}$ et montrer ainsi qu'elles ne dépendent que des constantes du système et des R_i , $i \in [1, N]$.

Détermination de $(c_{r,0})_{r \in [1, N]}$.

$c_{1,0}$ et $c_{2,0}$ sont données par (D.22) et (D.23) respectivement et sont bien fonction des constantes du système et des R_i , $i \in [1, N]$.

L'équation (D.25), soit $c_{r,0} = -\gamma \alpha c_{r-2,0} - \beta c_{r-1,0} - \alpha' \alpha^{r-2} R_{N-r+1}$ peut se récrire sous la forme matricielle suivante

$$u_r = S u_{r-1} - w_r$$

où

$$u_r = \begin{pmatrix} c_{r-1,0} \\ c_{r,0} \end{pmatrix}, S = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\alpha\beta & -\beta \end{pmatrix}, w_r = \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha' \alpha^{r-2} R_{N-r+1} \end{pmatrix},$$

qui définit une suite récurrente linéaire d'ordre 1 à laquelle on peut rajouter la condition initiale $u_2 = \begin{pmatrix} c_{N-1,0} \\ c_{0N-2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -R_N \\ \beta R_N - \alpha' R_{N-1} \end{pmatrix}$. Elle se réécrit donc :

$$u_r = S^{r-2}u_2 - \sum_{j=0}^{r-3} S^j w_{r-j}. \quad (\text{D.29})$$

Déterminons les puissances de S . Le polynôme caractéristique de S qui est égal à :

$$\chi_S(X) = X^2 + \beta X + \alpha\gamma \quad (\text{D.30})$$

a son déterminant $\Delta = \beta^2 - 4\alpha\gamma$ positif (car $\beta = -(\alpha + \beta + R)$). χ_S admet donc deux racines $X_1 = -\frac{\beta+\sqrt{\Delta}}{2}$, $X_2 = -\frac{\beta-\sqrt{\Delta}}{2}$ et telles que $0 < X_1 < X_2$.

Effectuons alors une division euclidienne de X^n , $n \geq 2$ par χ_S . Ceci donne :

$$\exists!(Q_n, R_n) \in \mathbb{R}_n[X]^2, X^n = Q_n(X)\chi_S(X) + R_n(X), \text{ avec } \deg(R_n) < 2. \quad (\text{D.31})$$

D'après le théorème d'Hamilton Cayley, $\chi_S(S) = 0$, d'où $S^n = R_n(S)$. Aussi, pour calculer S^n , il faut calculer R_n .

Posons $R_n(X) = a_n X + b_n$. (D.31) pris respectivement en X_1 et X_2 nous donne un système de deux équations en les deux inconnues a_n et b_n . Les solutions du système sont

$$a_n = \frac{X_1^n - X_2^n}{X_1 - X_2}, \quad b_n = \frac{X_2 X_1^n - X_1 X_2^n}{X_2 - X_1}.$$

Ainsi, l'expression de S^n est :

$$S^n = \frac{X_1^n - X_2^n}{X_1 - X_2} S - \frac{X_2 X_1^n - X_1 X_2^n}{X_1 - X_2} I_2, \quad (\text{D.32})$$

I_2 étant la matrice identité de dimension 2×2 . En reprenant (D.32) et l'égalité (D.29), il vient que :

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} c_{r-1,0} \\ c_{r,0} \end{pmatrix} &= \frac{X_1^{r-2} - X_2^{r-2}}{X_1 - X_2} \begin{pmatrix} \beta R_N - \alpha' R_{N-1} \\ \alpha\gamma R_N - \beta^2 R_N + \beta\alpha' R_{N-1} \end{pmatrix} - \frac{X_2 X_1^{r-2} - X_1 X_2^{r-2}}{X_1 - X_2} \begin{pmatrix} -R_N \\ \beta R_N - \alpha' R_{N-1} \end{pmatrix} \\ &\quad - \sum_{j=0}^{r-3} \left[\frac{X_1^j - X_2^j}{X_1 - X_2} \begin{pmatrix} \alpha' \alpha^{r-j-2} R_{N-r+j+1} \\ -\beta\alpha' \alpha^{r-j-2} R_{N-r+j+1} \end{pmatrix} - \frac{X_2 X_1^j - X_1 X_2^j}{X_1 - X_2} \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha' \alpha^{r-j-2} R_{N-r+j+1} \end{pmatrix} \right], \end{aligned} \quad (\text{D.33})$$

d'où

$$\begin{aligned} c_{r,0} &= \frac{X_1^{r-2} - X_2^{r-2}}{X_1 - X_2} \left((\alpha\gamma - \beta^2) R_N + \beta\alpha' R_{N-1} \right) - \frac{X_2 X_1^{r-2} - X_1 X_2^{r-2}}{X_1 - X_2} (\beta R_N - \alpha' R_{N-1}) \\ &\quad + \sum_{j=0}^{r-3} \left[\frac{X_1^j - X_2^j}{X_1 - X_2} \beta + \frac{X_2 X_1^j - X_1 X_2^j}{X_1 - X_2} \right] \alpha' \alpha^{r-j-2} R_{N-r+j+1}. \end{aligned} \quad (\text{D.34})$$

On en déduit que $(c_{r,0})_{r \in [3, N]}$ dépend uniquement des constantes du système initial et de R_i , $i \in [1, N]$.

Détermination des $(c_{r,i})_{i \in [1, r-3]}$ pour $r \in [3, N]$ fixé

Nous avons défini la suite $(c_{r,i})_{i \in [1, r-3]}$ en fixant r et en faisant varier i . Par contre, nous aurons besoin de définir cette suite en fixant i et en faisant varier r . Comme $r \in [3, N]$ et $i \in [1, r-3]$, si i est fixé dans $[1, N-3]$, alors $r \in [i+3, N]$.

Soit donc $i \in [1, N-3]$. Alors, d'après (D.25) avec $r = i+1$, on a $c_{i+1,i} = -R_N$. Puis, d'après (D.28) avec $r = i+2$, il vient que $c_{i+2,i} = c_{0, N-2} - i\beta c_{2,1} = (i+1)\beta R_N - \alpha' R_{N-1}$. L'équation (D.26) peut se récrire :

$$u_r^i = S u_{r-1}^i - w_r^{i-1}$$

où

$$u_r^i = \begin{pmatrix} c_{r-1,i} \\ c_{r,i} \end{pmatrix}, S = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\alpha\beta & -\beta \end{pmatrix}, w_r^{i-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ c_{r-1,i-1} \end{pmatrix}$$

avec comme condition initiale

$$u_{i+2}^i = \begin{pmatrix} c_{i+1,i} \\ c_{i+2,i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -R_N \\ (i+1)\beta R_N - \alpha' R_{N-1} \end{pmatrix}.$$

La suite $(u_r^i)_{r \in [i+3, N]}$ est donc une suite récurrente linéaire avec conditions initiales et dont le second membre w_r^{i-1} est connu d'après l'hypothèse de récurrence. Aussi, en effectuant le même raisonnement que dans le cas $i = 0$ et en reprenant les notations, on obtient l'expression de $c_{r,i}$ qui est :

$$\begin{aligned} c_{r,i} &= \frac{X_1^{r-i-2} - X_2^{r-i-2}}{X_1 - X_2} \left[(\alpha\gamma - \beta^2(i+1))R_N + \beta\alpha' R_{N-1} \right] \\ &\quad - \frac{X_2 X_1^{r-i-2} - X_1 X_2^{r-i-2}}{X_1 - X_2} \left[(i+1)\beta R_N - \alpha' R_{N-1} \right] \\ &\quad \sum_{j=0}^{r-i-3} \left[\frac{X_1^j - X_2^j}{X_1 - X_2} \beta + \frac{X_2 X_1^j - X_1 X_2^j}{X_1 - X_2} \right] c_{r-j-1, i-1}. \end{aligned} \tag{D.35}$$

On en déduit que les $c_{r,i}$ ne dépendent que des constantes du système initial et des R_i . ■

Annexe E

Corps de Mikusinski, Identifiabilité linéaire, Estimateurs

Dans cet annexe, nous allons présenter une théorie de l'estimation des dérivées dans un cadre algébrique et déterministe développée par M. Fliess et H. Sira-Ramirez. Aucune connaissance *à priori* des propriétés statistiques de signaux et bruits n'est requise. Les estimateurs présentent une excellente robustesse à une large variété de bruits additifs. Ils reposent sur des formules explicites, ce qui conduit à des calculs très rapides.

Rappelons quelques définitions introduites dans le chapitre 2.

E.1 Algèbre différentielle

Définition 47 Un *anneau différentiel (ordinaire)* R est un anneau commutatif muni d'une dérivation que l'on notera ici $\frac{d}{ds}$, i.e, une application $R \rightarrow R$ telle que $\forall x, y \in R$,

$$\begin{aligned} - \frac{d}{ds}(x + y) &= \frac{dx}{ds} + \frac{dy}{ds}, \\ - \frac{d}{ds}(xy) &= \frac{dx}{ds}y + x\frac{dy}{ds}. \end{aligned}$$

Un corps *différentiel (ordinaire)* est un anneau différentiel qui est aussi un corps.

Une constante c est un élément de R tel que $\frac{dc}{ds} = 0$. Un *anneau (resp. corps) de constantes* est un anneau (resp. corps) différentiel ne contenant que des constantes.

Exemple : Soit K un corps différentiel de constantes. Le corps $k(s)$ des fonctions rationnelles en la variable s , à coefficients dans K , possède bien une structure de corps différentiel par rapport à la dérivation $\frac{d}{ds}$, K est son sous-corps des constantes.

Un *morphisme différentiel* $\phi : R_1 \rightarrow R_2$ entre deux anneaux différentiels est un morphisme d'anneaux tel que,

$$\forall x \in R_1, \frac{d}{ds}(\phi(x)) = \phi\left(\frac{dx}{ds}\right).$$

Une *spécialisation différentielle* $R \rightarrow K$ est un morphisme différentiel où R est un anneau différentiel et K un corps différentiel.

E.2 Extension de corps différentielle

Une *extension de corps différentielle* L/K est la donnée de deux corps différentiels K, L tels que

- $K \subseteq L$,
- la restriction à K de la dérivation de L est la dérivation de K .

Un élément $x \in L$ est dit *différentiellement algébrique* sur K si x satisfait une équation différentielle algébrique sur K , i.e $P(x, \frac{dx}{ds}, \dots, \frac{d^n x}{ds^n}) = 0$ où P est un polynôme à coefficients dans K . L'extension L/K est dite *différentiellement algébrique* si chaque élément de L est différentiellement algébrique sur K .

Un élément de L qui n'est pas différentiellement algébrique sur K est dit *différentiellement transcendant*. Une extension *différentiellement transcendante* est une extension L/K qui n'est pas différentiellement algébrique.

Notation : Soit S un sous-ensemble de L . Le sur-corps différentiel (resp. sur-anneau) de K généré par S est noté $K \langle S \rangle$ (resp. $K\{S\}$).

E.3 Opérateurs différentiels linéaires

Soit K un corps différentiel. L'anneau $K \left[\frac{d}{ds} \right]$ des opérateurs différentiels linéaires de la forme $\sum_{finie} a_\alpha \frac{d^\alpha}{ds^\alpha}$, $a_\alpha \in K$ est commutatif si et seulement si K est un corps de constantes. Même dans

le cas général non commutatif, $K \left[\frac{d}{ds} \right]$ est un idéal d'anneau principal à gauche et à droite : tout idéal gauche, droite est généré par un seul élément [39].

Un opérateur est dit *propre* (resp. *strictement propre*) si les a_α le sont (rappelons qu'une fraction rationnelle est dite propre si le degré du numérateur est (strictement) inférieur au degré du dénominateur). Il est dit polynômial en $\frac{1}{s}$ si $a_\alpha \in k_0[\frac{1}{s}]$.

E.4 Le corps différentiel d'opérateurs de Mikusinski

E.4.1 Le corps des opérateurs de Mikusinski

Munissons l'ensemble \mathcal{C} des fonctions continues $f : [0, \infty) \rightarrow \mathcal{C}$ d'une structure d'anneau commutatif par rapport à l'addition

$$(f + g)(t) = f(t) + g(t)$$

et au produit de convolution

$$(f \star g)(t) = (g \star f)(t) = \int_0^t f(\tau)g(t - \tau)d\tau = \int_0^t g(\tau)f(t - \tau)d\tau.$$

\mathcal{C} est un domaine d'intégrité, i.e sans diviseur de zero [40], [41], [51]. Notons M le corps des fractions de \mathcal{C} . Ce corps est appelé le corps de *Mikusinski*.

Chaque élément de M est un *opérateur*. Toute fonction $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{C}$ peut aussi s'écrire comme $\{f\}$ en tant qu'élément de M .

Le produit de deux éléments $a, b \in M$ sera écrit ab au lieu de $a \star b$.

Exemple :

1. Toute fonction $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{C}$ localement Lebesgue-intégrable, à support borné à gauche appartient à M .

2. L'inverse dans M de la fonction échelon unité (Heaviside)

$$\mathbf{1}(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t < 0 \\ 1 & \text{si } t \geq 0 \end{cases} \quad (\text{E.1})$$

est l'opérateur de dérivation s .

Soit $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{C}$ une fonction C^1 à support borné à gauche. Alors $s\{f\} = \{f'\}$.

Soit $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{C}$ localement Lebesgue-intégrable, à support borné à gauche. Alors la fonction

$\frac{\{g\}}{s} = \left\{ \int_{-\infty}^t g(\sigma) d\sigma \right\}$ est aussi à support borné à gauche. Le sous-corps $\mathcal{C}(s) \subset M$ des fonctions rationnelles sur \mathcal{C} en la variable s a la même signification que celle usuelle en calcul opérationnel (voir [40], [41], [51]).

E.4.2 La dérivée algébrique

Pour toute application $f \in C$, on a que l'application $f \mapsto \frac{df}{ds} = \{-tf\}$ satisfait les propriétés de dérivation, i.e.,

$$\frac{d}{ds}(f + g) = \frac{df}{ds} + \frac{dg}{ds}$$

et

$$\frac{d}{ds}(f \star g) = \frac{df}{ds} \star g + f \star \frac{dg}{ds}.$$

Elle peut-être étendue à une dérivation, appelée *dérivation algébrique* de M , en posant, pour $g \neq 0$,

$$\frac{d}{ds}(\{f\} \star \{g\}^{-1}) = \frac{\frac{df}{ds} \star g - f \star \frac{dg}{ds}}{\{g\}^2}.$$

Muni de cette dérivation algébrique, M devient un corps différentiel dont le sous-corps des constantes est \mathcal{C} .

E.5 Identifiabilité

Soit k_0 un corps de base, considéré comme un corps différentiel de constantes. Soit k une extension algébrique finie de $k_0(\vartheta)$, où $\vartheta = (\theta_1, \dots, \theta_r)$ est un ensemble fini de paramètres inconnus. Le degré de transcendance de l'extension K/k_0 est donc au plus égal à r . De plus, nous munissons k d'une structure canonique de corps différentiel de constantes. Soit $K/k(s)$ une extension différentiellement algébrique finiment engendrée.

Un *signal* est un élément de K . Considérons un ensemble fini $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_\kappa)$ de signaux.

Définition 48 Les paramètres ϑ sont dits *linéairement identifiables* par rapport à \mathbf{x} si

$$P \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \vdots \\ \theta_r \end{pmatrix} = Q \quad (\text{E.2})$$

où

- P et Q sont, respectivement, des matrices $r \times r$ et $r \times 1$.
- les coefficients de P et Q appartiennent à $\text{span}_{k_0(s)[\frac{d}{ds}]}(\mathbf{1}, \mathbf{x})$,
- $\det(P) \neq 0$.

E.6 Estimateurs

Cette partie va consister à définir la notion de bruit de façon mathématique. Soit $N/k_0(s)$ une extension de corps différentiels, telle que, K, N soient *linéairement disjoints* sur $k_0(s)$ [9]. Tout élément de N est appelé *bruit* ou *perturbation*. Un bruit n est dit *structuré* s'il est annihilé par $\eta \in k_0(s) \left[\frac{d}{ds} \right]$, $\eta \notin k_0(s) : \eta n = 0$. Cette définition signifie que lorsqu'on lui applique un certain opérateur algébrique, ce bruit disparaît. Sinon le bruit est dit *non structuré*.

Soit $\mathcal{Q}(K \otimes_{k_0(s)} N)$ le corps des fractions, qui est un corps différentiel de l'anneau intègre $K \otimes_{k_0(s)} N$. Introduisons la *mesure bruitée* $y \in \mathcal{Q}(K \otimes_{k_0(s)} N)$, $y = x + n^{str} + n^{nst}$, où n^{str} et n^{nst} sont des bruits structurés ou non. Alors, (E.2) devient

$$P \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \vdots \\ \theta_r \end{pmatrix} = Q + R^{str} + R^{nstr} \quad (\text{E.3})$$

où y remplace \mathbf{x} dans P et Q ; les coefficients de R^{str} (resp. R^{nstr}), qui est une matrice colonne $r \times 1$, appartiennent à $\text{span}_{k(s) \left[\frac{d}{ds} \right]}(n^{str})$ (resp. $\text{span}_{k(s) \left[\frac{d}{ds} \right]}(n^{nstr})$). En multipliant (E.3) par $\Delta \in \text{Ann}_{k_0}(R^{str}) \subseteq k_0(s) \left[\frac{d}{ds} \right]$ où est $\text{Ann}_{k_0}(R^{str})$ est l'idéal à gauche des annihilateurs des coefficients de R^{str} , on obtient, si $\det(\Delta P) \neq 0$, l'*estimateur*

$$\Delta P \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \vdots \\ \theta_r \end{pmatrix} = \Delta Q + \Delta R^{nstr} \quad (\text{E.4})$$

Définition 49 L'estimateur est dit *propre* (resp. *strictement propre*, *polynômial en s^{-1}*) si tout coefficient de ΔP et ΔQ est somme d'une fraction rationnelle propre (resp. *strictement propre*, *polynômial en s^{-1}*) et de terme de la forme ϖy , où $y \in \mathbf{y}$ est une suite de signaux et $\varpi \in k_0(s) \left[\frac{d}{ds} \right]$ est propre (resp. *strictement propre*, *polynômial en s^{-1}*).

Il est dit *minimal* si Δ est un générateur monogène de l'idéal principal à gauche $\text{Ann}_{k_0}(R^{str})$.

Proposition 15 Il existe un estimateur (E.4) que l'on peut choisir minimal et /ou propre (resp. *strictement propre*, *polynômial en s^{-1}*).

Bibliographie

- [1] S.Audoly, G.Bellu,L.D'Angio,M.Pia Saccomani,C.Cobelli, *Global Identifiability of Nonlinear Models of Biological Systems*, IEEE Transactions on Biomedical Engineering, V48, No. 1,january 2001.
- [2] El Badia A., Ha Duong T. and Hamdi A. *Identification of a point source in a linear advection-dispersion-reaction source problem* , à paraître.
- [3] J. Baumeister. *Stable Solution of Inverse Problems*. Viewed Advances Lectures in Mathematics, 1996.
- [4] P. Borne, G. Dauphin-Tanguy, J.P. Richard, F. Rotella, I. Zambettakis. *Modélisation et Identification des Processus*, Volume 1. Technip, 1992.
- [5] F.Boulier. *Etude et implantation de quelques algorithmes en algèbre différentielle*, PhD thesis, Université de Lille I, 1994.
- [6] F.Boulier, D.Lazard, F.Ollivier, and M. Petitot. Computing representations for the radicals of a finitely generated differential ideals. Technical report, LIFL, Université Lille I.
- [7] F. Boulier, F. Lemaire. Computing canonical representatives of regular differential ideals. In *proc. ISSAC 2000, International Symposium on symbolic and algebraic Computation*, St Andrews, Scotland, 2000.
- [8] De Boor C., (1978) :*A practical Guide to Splines*. New York : Springer.
- [9] N. Bourbaki, Algèbre, Masson, Paris, 1981, chap. 4 à 7.
- [10] H Brézis, *Analyse fonctionnelle. Théorie et applications*, Dunod.
- [11] B. Buchberger. Gröbner bases : an algorithmic method in polynomial ideal theory. In *Multidimensional systems theory*, éd. par Bose (N.-K.), chap. 6, pp. 184-232. - D. Reidel Pub. Co., 1985, Mathematics and its Applications 16.
- [12] L. Denis-Vidal, *Identifiabilité de modèles non linéaires paramétriques de dynamiques classiques et à retard. Planification d'expériences et Estimation de paramètres*. Thèse d'habilitation, 2004.
- [13] L. Denis-Vidal, G. Joly-Blanchard, C. Noiret, M. Petitot, *Two approaches for testing identifiability and corresponding algorithms*. Mathematical and Computer Modelling of Dynamical Systems Journal
- [14] L. Denis-Vidal, G. Joly-Blanchard, C. Noiret, Some results ans applications about identifiability of nonlinear dynamical systems, *Proc. 5th ECC*, Karlsruhe, (1999).
- [15] Diop, S. Differential-algebraic decision methods and some applications to system theory. *Theoretical computer science* 98, 1 (1992), 137-161. (cité p.27, 49)
- [16] S. Diop, M. Fliess. Non linear observability, identifiability and persistent trajectories. In *Proc. 30th conference on decision and control*, Volume W3-1-4 :20, pages 714-719, 1991. Brighton.

- [17] H. W. Engl, M. Hanke and Andreas Neubauer, *Regularization of Inverse Problems*. Kluwer Academic Publishers.
- [18] L.C Evans, *Differential Equations*, American Mathematical Society.
- [19] M. Fliess, M. Mboup, A. Neves, H. Sira-Ramirez. *Une autre vision de l'identification de signaux et systèmes*, Conférence Francophone d'Automatique (CIFA), Douz, Tunisie, 2004
- [20] M. Fliess, J. Levine, F. Ollivier, P. Martin, P. Rouchon. A remark on linear accessibility conditions and infinite prolongations. *Systems and Control Letters*, 31 :77-83, 1997.
- [21] M. Fliess. Automatique et corps différentiels. *Forum Mathematicum* 1, 3 (1989), 227-238.
- [22] M. S. Grewal, K. Glover, Identifiability of Linear and Nonlinear Dynamical Systems, *IEEE Trans. Automn. Contr*, AC-21 :833-837, 1976.
- [23] M. Hanke. *A regularizing Levenberg-Marquardt scheme with applications to inverse groundwater filtration problems*. *Inverse Problems*, 13 :79-95, 1997.
- [24] M. Hanke. A regularizing Levenberg-marquardt scheme with applicatios to inverse groundwater filtration problems, *Inverse Problems*, 13 :79-95, 1997.
- [25] R. Hermann and A. J. Krener. Nonlinear controlability and observability. *IEEE trans. on autom. control*, ac-22 :728-740, 1977.
- [26] H. Hironaka. Resolution of singularities of an algebraic variety over a field of characteristic zero. *Ann. Math.*, vol. 79, 1964, pp. 109-326.
- [27] S. Ibrir, S. Diop. A numerical procedure for filtering and efficient high-order signal differentiation. *Int. J. Appl. Math. Comput. Sci*, 2004, Vol. 14, No. 2, 201-208.
- [28] T. Kato, *Perturbation Theory of linear operators*, Springer, New-York, 1966.
- [29] G. Katriel. *Solution to Rubel's question about differentially algebraic dependence on initial values*. *Math.CA*,4,2002.
- [30] J. B. Keller. Inverse problems. *Am. Math. Mon.*, 83 :107-118, 1976.
- [31] A. Kirsch. *An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems*. Springer, 1996.
- [32] E. R. Kolchin. *Differential Algebra and Algebraic Groups*. Academic Press, New-York and London, 1973.
- [33] F. Lemaire. *Contribution à l'algorithmique en algèbre différentielle*. Thèse, Université des sciences et technologies de Lille, 2002.
- [34] Levenberg, K. *A Method for the Solution of Certain Problems in Least Squares*. *Quart. Appl. Math.* 2, 164-168, 1944.
- [35] Lions, J.L. and Mangenes E. (1981) *Problèmes aux limites non homogènes et applications*, volume 2, Dunod, Paris.
- [36] Lions, J.L. (1992) Pointwise control for Distributed Systems *in Control and Estimation in distributed Parameters Systems*, Edited by Banks H.T. SIAM.
- [37] L. Ljung, S.T. Glad. On global identifiability for arbitrary model parametrizations. *Automatica*, 30(2) :265-276, 1994.
- [38] Marquardt, D. *An Algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters*. *SIAM J. Appl. Math.* 11, 431-441, 1963.
- [39] J.C. McConnell, J.C. Robson, *Noncommutative Noetherian Rings*, Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2000.
- [40] J. Mikusinski, *Operational Calculus* (2nd ed., vol. 1),PWN,Warsaw, Pergamon, Oxford, 1983.

-
- [41] J. Mikusinski, T.K Boehme, *Operational Calculus* (2nd ed., vol. 2),PWN,Warsaw, Pergamon, Oxford, 1987.
- [42] C. Noiret. *Utilisation du calcul formel pour l'identifiabilité de modèles paramétriques et nouveaux algorithmes en estimation de paramètres*. Thèse, Université de Technologie de Compiègne, 2000.
- [43] F. Ollivier. *Le problème de l'identifiabilité structurelle globale : approche théorique, méthodes effectives et bornes de complexité*. PhD thesis, Ecole Polytechnique Paris, 1990.
- [44] F. Ollivier. Identifiabilité des systèmes. Technical Report 97-04, GAGE, Ecole polytechnique, juin 1997.
- [45] J. F. Ritt. *Differential Algebra*. Americ. Math. Soc,1950
- [46] S. Vajda, K.R. Godfrey, H. Rabitz. Similarity transformation approach to identifiability analysis of nonlinear compartmental models. *it Math. Biosc.*, 93 :217-248, 1989.
- [47] A. J. van der Schaft and H. Nijmeijer. *Nonlinear Dynamical Control Systems*. Springer-Verlag, 1996.
- [48] E. Walter, L. Pronzato. *Identification de Modèles paramétriques à partir de données expérimentales*. MASSON, 1994.
- [49] E. Walter. *Identifiability of State Space Models*, Volume 46. Springer-Verlag, 1994.
- [50] P.A Raviart, J.M Thomas, *Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles*, Dunod.
- [51] K. Yosida, *Operational Calculus*, Springer, New York,1984.