

## 7. ESTIMATION DE PARAMÈTRES DANS UN SYSTÈME D'EDO

On suppose que l'équation d'état (qui modélise l'évolution du système) est un système d'équations différentielles ordinaires (EDO) :

$$\begin{cases} \frac{dy_i}{dt} = f_i(t, y, a), \\ y_i(0) = y_{0i}, \end{cases}$$

pour  $i = 1, \dots, N$ , et où on note  $y = (y_1, \dots, y_N)$  et  $a = (a_1, \dots, a_k) \in \mathbb{R}^k$ . L'intégration du système d'EDO permet de calculer les solutions  $y_i(a, t)$  pour  $t \geq 0$ .

On suppose qu'on dispose d'observations à certains instants :  $y_i(t_j)$ ,  $j = 1, \dots, M$ . On note  $y_{i,j}^{obs}$  la valeur observée (ou mesurée) de la solution  $y_i$  à l'instant  $t_j$ . Le but est d'estimer les paramètres  $a$  à partir des observations.

La formulation par moindres carrés consiste à définir la fonctionnelle suivante :

$$J(a) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N [y_i(a, t_j) - y_{i,j}^{obs}]^2$$

Le problème d'identification peut ainsi se réécrire sous la forme du problème d'optimisation suivant : on cherche  $\hat{a}$  tel que

$$J(\hat{a}) = \inf_{a \in K} J(a)$$

où  $K$  est l'ensemble des paramètres  $a$  admissibles.

**7.1. Cas linéaire.** On suppose que les modèles  $f_i$  dépendent linéairement des  $y_j$  et des paramètres  $a$  :

$$f_i(t, y, a) = \sum_{j=1}^N a_{ij} y_j(t),$$

où les  $a_{ij}$  sont bornés. On a donc le système suivant :

$$\begin{cases} \frac{dy_i}{dt} = \sum_{j=1}^N a_{ij} y_j(t), \\ y_i(0) = y_{0i}, \end{cases}$$

qu'on peut réécrire sous forme matricielle :

$$\frac{dY}{dt} = AY, \quad Y(0) = Y_0$$

où la matrice  $A$  a pour coefficients les  $(a_{ij})$ .

La solution est donc  $Y(t) = e^{At} Y_0$ , et  $Y$  dépend donc continûment de  $A$ . Les  $a_{ij}$  étant bornés, on peut supposer que le domaine admissible  $K$  est un compact de  $\mathbb{R}^k$ . Alors le minimum de  $J$  existe, on a existence (mais pas forcément unicité) du jeu de paramètres optimaux.

On doit maintenant calculer le gradient de  $J$  par rapport à  $a$ .

**7.1.1. Méthode directe.** On note  $\tilde{Y}_{ij} = \frac{\partial Y}{\partial a_{ij}}$  la dérivée de  $Y$  par rapport à un des paramètres  $a_{ij}$ . Par définition, il s'agit de la limite quand  $\varepsilon$  tend vers 0 de

$$\frac{Y(A + \varepsilon K_{ij}) - Y(A)}{\varepsilon},$$

où  $K_{ij}$  est une matrice de dimension  $k \times k$  (comme  $A$ ), nulle, sauf pour l'élément  $(i, j)$  qui vaut 1. On a alors, par linéarité :

$$\frac{dY(A + \varepsilon K_{ij})}{dt} = AY(A + \varepsilon K_{ij}) + \varepsilon K_{ij}Y(A + \varepsilon K_{ij}),$$

et en faisant un développement de  $Y$  autour de  $A$ , on a

$$Y(A + \varepsilon K_{ij}) = Y(A) + \varepsilon \tilde{Y}_{ij} + \mathcal{O}(\varepsilon^2).$$

En substituant cette dernière expression, on obtient

$$\frac{dY(A + \varepsilon K_{ij})}{dt} = AY(A) + \varepsilon A\tilde{Y}_{ij} + \varepsilon K_{ij}Y(A) + \mathcal{O}(\varepsilon^2).$$

En soustrayant  $\frac{dY(A)}{dt}$ , en divisant par  $\varepsilon$  et en passant à la limite, on obtient l'équation (dite linéaire tangente) pour la dérivée de  $Y$  par rapport à  $a_{ij}$  :

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{Y}_{ij}}{dt} = A\tilde{Y}_{ij} + K_{ij}Y, \\ \tilde{Y}_{ij}(0) = 0. \end{cases}$$

On peut alors calculer la dérivée de  $J$  par rapport au paramètre  $a_{ij}$ , et par un calcul similaire, on trouve :

$$\frac{\partial J}{\partial a_{ij}}(a) = \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N [y_i(a, t_j) - y_{i,j}^{obs}] \times (\tilde{Y}_{ij})_i(a, t_j).$$

Pour calculer la dérivée par rapport à un paramètre  $a_{ij}$ , il faut donc résoudre l'équation directe (pour calculer la solution directe  $Y$ ), et résoudre l'équation linéaire tangente (pour calculer  $\tilde{Y}_{ij}$ ). Au total, si on veut tout le gradient de la fonction coût, il faut résoudre une fois le problème direct, et  $N^2$  problèmes perturbés (linéaires tangents). Le coût est donc prohibitif, ce qui empêche (sauf cas simplissimes) de calculer le gradient par une approche dite directe.

**7.1.2. Méthode adjointe.** On note  $p_i$  le multiplicateur de Lagrange associé à chaque EDO. On peut alors définir le Lagrangien suivant, correspondant au problème de minimisation de  $J$  sous la contrainte de modèle (i.e. que le système d'EDO soit respecté) :

$$\mathcal{L}(a, Y, P) = J(a, Y) + \sum_{i=1}^N \int_0^T \left( P, \frac{dY}{dt} - AY \right) dt.$$

En faisant une intégration par parties, on peut réécrire le lagrangien :

$$\mathcal{L}(a, Y, P) = J(a, Y) + \sum_{i=1}^N \int_0^T \left[ - \left( \frac{dP}{dt}, Y \right) - (A^T P, Y) \right] dt + (P(T), Y(T)) - (P(0), Y(0)).$$

Chercher un minimum de  $J(a, Y)$  sous la contrainte de modèle revient à chercher un point-selle de  $\mathcal{L}$ . Un point-selle  $(\hat{a}, \hat{Y}, \hat{P})$  de  $\mathcal{L}$  annule les 3 dérivées partielles du lagrangien par rapport à chacune des variables.

**Dérivée nulle par rapport à  $P$  :**

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial P} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{dY}{dt} = AY.$$

On récupère la contrainte du modèle direct.

**Dérivée nulle par rapport à  $Y$  :**

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \tilde{Y}} \cdot \tilde{Y} = 0 = \sum_{j=1}^M [Y(t_j) - Y_j^{obs}] \tilde{Y}(t_j) - \sum_{i=1}^N \left[ \int_0^T \frac{dP}{dt} \cdot \tilde{Y} + \int_0^T (A^T P, \tilde{Y}) \right],$$

et  $(P(T), \tilde{Y}(T)) = 0$ , pour toute perturbation  $\tilde{Y}$ . La dérivée nulle pour toute perturbation implique que  $P$  est solution de l'équation adjointe :

$$\begin{cases} -\frac{dP}{dt} = A^T P - \sum_{j=1}^M [Y(t_j) - Y_j^{obs}] \delta(t_j), \\ P(T) = 0. \end{cases}$$

$P$  est alors appelé état adjoint.

**Dérivée nulle par rapport à  $a$  :**

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_{ij}} = 0 = - \int_0^T p_i y_j.$$

Pour calculer le gradient de  $J$ , il suffit désormais de résoudre une fois le modèle direct (pour calculer  $Y$ ), et une fois le modèle adjoint (pour calculer  $P$ ), qui nécessite le même coût de calcul que le modèle direct.

**7.2. Cas général.**

$$\begin{cases} \frac{dY}{dt} = f(t, Y(t), a(t)), \\ Y(0) = Y_0, \end{cases}$$

où  $Y = (y_1, \dots, y_N)$ , et  $a(t) \in L^2(0, T)$ .

Le but est toujours d'identifier les paramètres  $a$  à partir de mesures  $y_i(a, t)$ ,  $i = 1, \dots, N$ , qu'on note  $z_i(t)$ .

On va minimiser au sens des moindres carrés la fonction coût suivante :

$$J(a) = \int_0^T \sum_{i=1}^N [y_i(a, t) - z_i(t)]^2,$$

où  $z_i(t)$  représente les mesures expérimentales de  $y_i(a, t)$ .

Il y a deux façons d'identifier  $a$  :

- i)  $a \in K$  compact de  $V$ , espace de dimension finie  $M$ . Par exemple un espace de polynômes, ou en utilisant des lois a priori sur les paramètres  $a$ . Si le nombre de paramètres est petit, alors le problème est bien posé, mais  $a$  est mal identifié car  $V$  est probablement trop restrictif par rapport à la réalité. Il faut alors augmenter la dimension  $M$  de l'espace  $V$ , ce qui revient à augmenter le nombre de paramètres, mais cela conduit généralement à des instabilités numériques.
- ii)  $a \in V$  espace de dimension infinie. Les données étant souvent bruitées, cela induit des instabilités sur  $a$ , et il faut alors régulariser le problème pour rendre le problème bien posé. On définit alors la fonctionnelle régularisée :

$$J_\varepsilon(a) = J(a) + \varepsilon \|a\|^2.$$

Exemples :  $V = L^2(0, T)$ ,  $H^1(0, T)$ ,  $H^2(0, T)$ , ... et la norme choisie pour la régularisation dépendra de l'espace considéré.

**Formulation Lagrangienne :**

$$\mathcal{L}(a, Y, P) = J_\varepsilon(a, Y) + \int_0^T \left( P(t), \frac{dY}{dt} - f(t, Y, a) \right) dt$$

qu'on peut réécrire sous la forme, grâce à une intégration par parties :

$$\mathcal{L}(a, Y, P) = J_\varepsilon(a, Y) - \int_0^T \left( \frac{dP}{dt}, Y \right) dt - \int_0^T (P(t), f(t, Y, a)) dt + (P(T), Y(T)) - (P(0), Y(0)),$$

avec la fonctionnelle régularisée

$$J_\varepsilon(a, Y) = \frac{1}{2} \left[ \int_0^T \|Y(t) - Z(t)\|^2 dt + \varepsilon \|a\|^2 \right].$$

Comme précédemment, la minimisation de  $J_\varepsilon$  sous contrainte de modèle se ramène à la recherche d'un point-selle  $(\hat{a}, \hat{Y}, \hat{P})$  du lagrangien  $\mathcal{L}$ .

**Dérivée nulle par rapport à  $P$  :** on retrouve l'équation d'état sur  $Y$ .

**Dérivée nulle par rapport à  $Y$  :** dans une direction de perturbation  $\phi$ , on obtient

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial Y}(\hat{a}, \hat{Y}, \hat{P}).\phi = 0 \\ & = \int_0^T (\hat{Y} - Z).\phi dt - \int_0^T \left( \frac{d\hat{P}}{dt}, \phi \right) - \int_0^T \left( \hat{P}, \frac{\partial f}{\partial Y} \phi \right) + (\hat{P}(T), \phi(T)), \end{aligned}$$

et donc on obtient l'équation adjointe sur  $P$  :

$$\begin{cases} -\frac{d\hat{P}}{dt} = \left( \frac{\partial f}{\partial Y} \right)^T \hat{P} - (\hat{Y} - Z), \\ \hat{P}(T) = 0. \end{cases}$$

**Dérivée nulle par rapport à  $a$  :** dans une direction de perturbation  $b$ , on trouve

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a}(\hat{a}, \hat{Y}, \hat{P}).b = 0 \\ & = \varepsilon (\hat{a}, b)_V - \int_0^T \left( \hat{P}, \frac{\partial f}{\partial a} b \right) dt. \end{aligned}$$

Si  $V = L^2(0, T)$ , alors on peut factoriser :

$$\int_0^T \left[ \varepsilon \hat{a}(t) + \left( \frac{\partial f}{\partial a} \right)^T \hat{P} \right] b dt = 0,$$

et comme la dérivée doit être nulle pour toute perturbation  $b$ , on obtient la condition d'optimalité suivante :

$$\varepsilon \hat{a}(t) + \left( \frac{\partial f}{\partial a} \right)^T \hat{P} = 0.$$

### 7.3. Algorithme numérique de résolution du problème d'identification.

7.3.1. *Algorithme de gradient.* On initialise la valeur des paramètres :  $a = a^0$ . On résout ensuite à l'itération  $n$  les deux systèmes direct et adjoint suivants :

$$\begin{cases} \frac{dY^n}{dt} = f(t, Y^n, a^n), \\ Y^n(0) = Y_0, \end{cases}$$

$$\begin{cases} -\frac{dP^n}{dt} = \left( \frac{\partial f}{\partial Y}(t, Y^n, a^n) \right)^T P^n - (Y^n - Z) \\ P^n(T) = 0, \end{cases}$$

et on définit le nouvel itéré :

$$a^{n+1} = a^n - \rho^n \left( \frac{\partial f}{\partial a}(t, Y^n, a^n) \right)^T P^n,$$

où  $\rho^n$  est le pas de descente. On peut choisir  $\rho^n = \rho > 0$  suffisamment petit, pour garantir la descente (gradient à pas fixe), ou déterminer le pas optimal (gradient à pas optimal) : si  $Y(\rho^n)$  est solution du problème suivant

$$\begin{cases} \frac{dY(\rho^n)}{dt} = f(t, Y(\rho^n), a^n - \rho^n J^n), \\ Y(\rho^n)(0) = Y_0, \end{cases}$$

alors le pas optimal est solution du problème d'optimisation suivant :

$$J(\rho) = \inf_{\rho^n > 0} \|Y(\rho^n) - Z\|^2.$$

Le problème de la recherche du pas optimal  $\rho$  peut s'avérer délicat, la minimisation pouvant converger vers un minimum local.

7.3.2. *Méthode de quasi-linéarisation.* On linéarise l'équation par rapport à  $Y$  et  $a$  pour se ramener à une situation linéaire. Alors, à l'itération  $n$ , on doit résoudre le problème direct suivant, linéarisé autour de l'état  $Y^n$  :

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{Y}}{dt} = f(t, Y^n, a^n) + \left( \frac{\partial f}{\partial Y}(t, Y^n, a^n) \right) (\tilde{Y} - Y^n) + \left( \frac{\partial f}{\partial a}(t, Y^n, a^n) \right) (\tilde{a} - a^n), \\ \tilde{Y}(0) = Y_0. \end{cases}$$

On voit que  $\tilde{Y}$  dépend de  $\tilde{a}$  de façon affine. On peut alors chercher à minimiser la fonction coût suivante :

$$J(\tilde{a}) = \frac{1}{2} \|\tilde{Y}(\tilde{a}) - Z\|^2,$$

et on cherche le nouvel itéré  $a^{n+1}$  tel que

$$J(a^{n+1}) = \inf_{\tilde{a}} J(\tilde{a}).$$

Ce problème est linéaire quadratique, et donc facile à résoudre.

Le problème adjoint à l'étape  $n$  est le suivant :

$$\begin{cases} -\frac{dP^n}{dt} = \left( \frac{\partial f}{\partial Y}(t, Y^n, a^n) \right)^T P^n - (Y^n - Z) \\ P^n(T) = 0, \end{cases}$$

et le gradient de la fonction coût s'écrit alors :

$$\nabla J(\tilde{a}) = \left( \frac{\partial f}{\partial a}(t, Y^n, a^n) \right)^T P^n.$$

On utilise alors, par exemple, une méthode de gradient conjugué pour la mise à jour des paramètres :  $a_{j+1}^n = a_j^n - \rho_j^n w_j^n$ , avec  $w_{j+1}^n = J'(a_j^n) + \lambda_j^n w_j^n$ , de sorte que  $(\hat{Y}(a_{j+1}^n), \hat{Y}(a_j^n)) = 0$ , avec

$$\begin{cases} \frac{d\hat{Y}}{dt} = \left( \frac{\partial f}{\partial Y}(t, Y^n, a^n) \right) \hat{Y} + \left( \frac{\partial f}{\partial a}(t, Y^n, a^n) \right) \hat{a}, \\ \hat{Y}(0) = 0. \end{cases}$$

Il faut alors boucler, en faisant des itérations externes de linéarisation, et dans ces boucles, faire des itérations internes de gradient conjugué. La convergence est rapide s'il y a peu de paramètres.

**7.3.3. Problèmes liés à la discrétisation spatiale.** Il faut faire attention que la discrétisation spatiale et le fait de prendre l'adjoint ne sont pas des opérations qui commutent. Il est impératif de prendre l'adjoint du modèle discrétisé, pour obtenir le modèle adjoint discrétisé, qui sera cohérent avec le modèle direct, et qui donnera la valeur exacte du gradient de la fonctionnelle correspondante.

**Exemple simple :** si on utilise comme discrétisation d'une dérivée d'ordre un en espace avec un schéma à 2 points décentré à droite :

$$\left( \frac{\partial Y}{\partial x} \right)_i \simeq \frac{Y_{i+1} - Y_i}{\Delta x},$$

alors le produit scalaire avec la variable adjointe  $(P)_i$  va donner une intégrale discrète, c'est-à-dire une somme :

$$\sum_i P_i \frac{Y_{i+1} - Y_i}{\Delta x}$$

qu'on peut réécrire avec une intégration par parties discrète (i.e. une inversion d'indices) :

$$\frac{1}{\Delta x} \left( \sum_i P_i Y_{i+1} - \sum_i P_i Y_i \right) = \frac{1}{\Delta x} \left( \sum_i P_{i-1} Y_i - \sum_i P_i Y_i \right) = \sum_i -\frac{P_i - P_{i-1}}{\Delta x} Y_i,$$

en ne tenant pas compte ici des termes de bord dans la somme. Et on constate que cela n'est pas équivalent à la discrétisation (avec le même schéma qu'au départ, à savoir un schéma décentré à droite) de l'adjoint de l'opérateur continu, qui est l'opposé de la dérivée. En effet, on obtient l'opposé de la dérivée spatiale, mais avec une discrétisation par un schéma à deux points, décentré à gauche.

Cela peut aussi se comprendre d'un point de vue matriciel : la transposée de l'opérateur dérivée première discrétisée par un schéma décentré à droite est

$$\begin{pmatrix} \frac{-1}{\Delta x} & \frac{+1}{\Delta x} & 0 & \dots \\ 0 & \frac{-1}{\Delta x} & \frac{+1}{\Delta x} & 0 \\ & & \ddots & \\ \dots & 0 & 0 & \frac{-1}{\Delta x} \end{pmatrix}^T = - \begin{pmatrix} \frac{+1}{\Delta x} & 0 & 0 & \dots \\ \frac{-1}{\Delta x} & \frac{+1}{\Delta x} & 0 & 0 \\ & & \ddots & \\ \dots & 0 & \frac{-1}{\Delta x} & \frac{+1}{\Delta x} \end{pmatrix}$$

et donc l'adjoint de la dérivée discrète décentrée à droite est l'opposé de la dérivée discrète **décentrée à gauche**, et non à droite. Pour éviter ce genre de désagréments (l'utilisation du mauvais schéma entraînant un calcul faux du gradient par l'adjoint, puisque ce n'est plus l'adjoint du système discrétisé), il est possible d'utiliser des schémas symétriques (ou centrés).