

ACADEMIE DE MONTPELLIER
UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNIQUES DU LANGUEDOC

THESE

présentée à l'Université des Sciences et Techniques du Languedoc
pour obtenir le diplôme de DOCTORAT
(Spécialité : Mathématiques Pures et Appliquées)

**QUELQUES PROBLEMES SPECIFIQUES A LA
MODELISATION NON LINEAIRE
APPLICATIONS A DES PROBLEMES ECOLOGIQUES**

par

Mustapha SAMIH

soutenue le 27 Juin 1988 devant le Jury composé de :

MM. ESCOUFIER Yves	Président
BOUCHE Marcel	
CHARLES Bernard	Rapporteur
LEBRETON Jean-Dominique	Rapporteur
MILHAUD Xavier	
ROUX Maurice	

*"Un être vivant ne peut alors
se réduire à sa seule structure
visible. Il représente une maille
du réseau secret qui unit tous
les objets du monde".*

François Jacob.

La logique du vivant.

à Rahma, Malika et Hassan

à Habi...

Nombreux sont les gens qui m'ont aidé tout au long de ce travail. Je tiens à les remercier tous, et tout particulièrement :

- *M. Yves Escoufier, pour m'avoir accepté au sein de son laboratoire, de m'avoir introduit dans le monde des statistiques et de l'analyse des données et d'avoir guidé mes premiers pas. Je lui suis profondément reconnaissant pour le soutien qu'il m'a apporté.*
- *M. Marcel Bouché qui est à l'origine de ce travail. Je le remercie pour sa disponibilité et toutes les discussions qui m'ont permis de percevoir un monde qui m'était inconnu : l'écologie.*
- *M. Bernard Charles pour avoir accepté faire partie du jury, et d'être rapporteur de ce travail.*
- *M. Jean-Dominique Lebreton pour avoir bien voulu lire les premières versions de ce travail. Je le remercie pour tous les conseils, les critiques, et les remarques pertinentes qu'il m'a faites.*
- *M. Xavier Milhaud, pour son aide, et pour avoir accepté de faire partie du jury .*
- *M. Maurice Roux, pour ses remarques et ses critiques. Il a été le premier à me suggérer de faire un premier canevas, il m'a tout le temps encouragé à y travailler.*
- *MM. Alain Pavé de l'université Claude Bernard (Lyon) et Antoine Messean, et Jean Pierre Vila du laboratoire de Biométrie de Jouy-en-Josas qui m'ont fait part de leur grande expérience en Statistique et en Biomathématique.*
- *Mlle Sylvie Hugon pour avoir, entre autre, contribué à la mise en forme finale du texte.*
- *Mlles Martine Marco et Régine Aliaga pour leur aide dans la frappe de ce texte.*

2.2.1	Vitesse, accélération et courbure liée à un paramètre	31
2.2.2	Mesures de non linéarité	33
2.2.3	Calcul numérique des Courbures	35
3	Plan d'expérience et choix entre modèles	40
3.1	Conception d'un plan d'expérience	40
3.1.1	Cas des plans d'expérience favorisant une partie des paramètres à estimer	42
3.2	Utilisation de l'information d'Akaike pour le choix entre modèles .	44
3.2.1	Introduction	44
3.2.2	Rappel du critère du rapport de vraisemblance	44
3.2.3	Présentation générale du critère d'Akaike : A.I.C.	46
4	Généralités sur les systèmes à compartiments linéaires	51
4.1	Définition d'un système à compartiments	51
4.2	Système à compartiments linéaires	53
4.3	Contrôlabilité et Observabilité	55
5	Etude de deux structures écologiques	58
5.1	Génération des modèles de transferts	59
5.1.1	Notation	59
5.1.2	Hypothèse fondamentale	61
5.2	Structure "Azote" dans le modèle REAL	65
5.2.1	Données expérimentales	65
5.2.2	Modèle mathématique	67
5.2.3	Calcul du temps moyen de séjour de l'azote dans chacun des compartiments	77
5.2.4	Calcul du débit du transfert d'azote du ver de terre vers le sol	78
5.2.5	Remarques et commentaires	79
5.2.6	Conclusion	80

5.3	Structure "Carbone" dans le modèle REAL	81
5.3.1	Données expérimentales	81
5.3.2	Modèle mathématique	83
	Annexe A : Analyse des données et modélisation	89
.1.1	Rôle de l'analyse des données dans l'élaboration des modèles	89
.1.2	Analyse des données et plan d'échantillonnage : coefficient RV	91
.1.3	Analyse des données et validations des modèles	91
.1.4	Conclusion	91
	Annexe B : Opérations matricielles utilisées dans l'estimation des paramètres	93
.1.1	Introduction	93
.1.2	Inverse, déterminant et valeur propre	93
.1.3	Matrice définie positive	95
.1.4	Matrices et dérivation	95
.1.5	Formes quadratiques et dérivation :	96
.1.6	Factorisation QR	96
	Annexe C : Programmes informatiques	99

INTRODUCTION

Systeme, structure et modèle

Notion de système et de structure

Introduction

Le travail qui nous a été confié relève du domaine des mathématiques appliquées. Au delà des difficultés strictement mathématiques et de celles liées à l'interprétation, il nous apparaît essentiel de situer ce travail dans son cadre général et de décrire son support intellectuel. C'est l'objet de la présente introduction.

0.1 Nécessité de l'approche systémique

Le scientifique est engagé dans une lutte contre la complexité de la nature et de l'univers économique et social, dans lesquels il est plongé. Son but est la compréhension, la maîtrise et le contrôle de l'évolution des phénomènes biologiques, sociaux et économiques.

Cette action se heurte à des difficultés de toutes les natures : diversifications, multiplications des objectifs, accélération du changement, interconnexion de plus en plus accentuée avec d'autres organisations et avec l'environnement.

Devant cette situation que faire ?

Deux attitudes opposées et extrêmes se présentent fréquemment :

- La première est d'essayer de faire un traitement en bloc, et ainsi la complexité

ne fait que s'accroître . . . elle finira par l'emporter.

- La deuxième attitude est l'opposée de la première; c'est la sursimplification excessive; elle consiste à refuser de prendre en compte la diversité des parties de l'organisme étudié, ainsi que leurs interactions.

Dans ce dilemme de surcomplexité et de sursimplification, il existe une approche plus réaliste et plus conséquente, elle prend en compte explicitement la complexité, c'est ce qu'on appelle *l'analyse des systèmes*, ou *la systémique*.

0.2 Le Concept de système et de structure

L'étude d'un organisme économique, social ou biologique, se fait en égard à une certaine finalité; partant de là, on définit l'ensemble des éléments en relation avec celle-ci, cette totalité organisée sera notre système.

Un système peut être défini comme une entité complexe traitée en égard à une finalité, comme une totalité organisée formée d'éléments en interactions et de relations avec ceux-ci; les uns et les autres étant différenciés et définis en fonction de la place qu'ils occupent dans cette totalité et cela de telle sorte que son identité soit maintenue [65].

La connaissance scientifique d'un élément supposé totalement isolé est en principe exclue, c'est une opération rarement utile. Ce n'est que par ses interactions qu'un objet manifeste sa présence [26]; tout objet doit être représenté comme une partie insérée, immergée, active dans un tout; l'intelligence de son environnement est la condition essentielle de notre connaissance de cet objet [50].

Tout système est défini à partir de son organisation, de ses interactions, autrement dit sa *structure*. La nature de celle-ci diffère selon les systèmes. Ce sera précisément l'un des buts de la systémique, par le moyen de la modélisation, d'explicitement la nature de cette structure. L'étude se fait en tenant compte des connaissances acquises antérieurement, des observations expérimentales (les données) en y

ajoutant, si besoin est, un certain nombre d'hypothèses complémentaires, procédant par la suite à leur validation pour les maintenir ou les rejeter.

0.3 Le concept du modèle : l'outil, son intérêt et ses limites

Pour décrire un système, l'analyser et pour communiquer ses résultats, on a eu recours à un MODELE, c'est-à-dire originellement, à des simplifications et des approximations de cette réalité. On ne peut plus se contenter de managements plus ou moins habiles, qui ne font qu'améliorer cette perception directe, on doit franchir une étape en concevant un outil plus subtil, un outil méthodologique [49]. Un *modèle* est alors un instrument d'étude, il fonctionne par rapport à une ou plusieurs finalités, il est destiné par ce fait à son propre dépassement pour atteindre d'autres objectifs.

Il est également abstrait, c'est un instrument d'intelligibilité du réel dans le sens où il permute une loi à une multiplicité de faits [6]. Il a aussi une fonction sélective de l'information totale appartenant au système.

Sur le plan pratique, les objectifs auxquels peut répondre la modélisation peuvent être cités brièvement :

1. La détection de structures.
2. La réduction des données.
3. L'estimation d'un ou plusieurs paramètres.
4. L'optimisation du plan expérimental.
5. La prévision de l'évolution future du système.
6. La visualisation des variables intermédiaires.

7. La commande d'un système, qui consiste à définir une action pour contrôler son comportement.

Des solutions acceptables ont été trouvées pour certains de ces problèmes, dans le cas de systèmes physiques ou technologiques; mais lorsque la transposition de ces méthodes est tentée dans le domaine biologique ou écologique, on est confronté à un certain nombre de difficultés, résultant essentiellement de la complexité des systèmes vivants [60] :

- La première des difficultés provient de la délimitation du système lui-même; en effet les systèmes écologiques sont fortement interconnectés.
- La seconde vient des nombreuses interactions, qui se traduisent par des non linéarités, au niveau des modèles mathématiques, et qui posent un problème d'utilisation, de maniabilité et de flexibilité.
- La troisième est en rapport avec la qualité des mesures et leur nombre souvent insuffisant; les variables sont parfois inaccessibles ou non directement mesurables, particulièrement *in vivo*; et lorsque elles sont mesurables, ces mesures sont souvent perturbées par un bruit de fond important.

0.4 R.E.A.L : Un exemple de système écologique

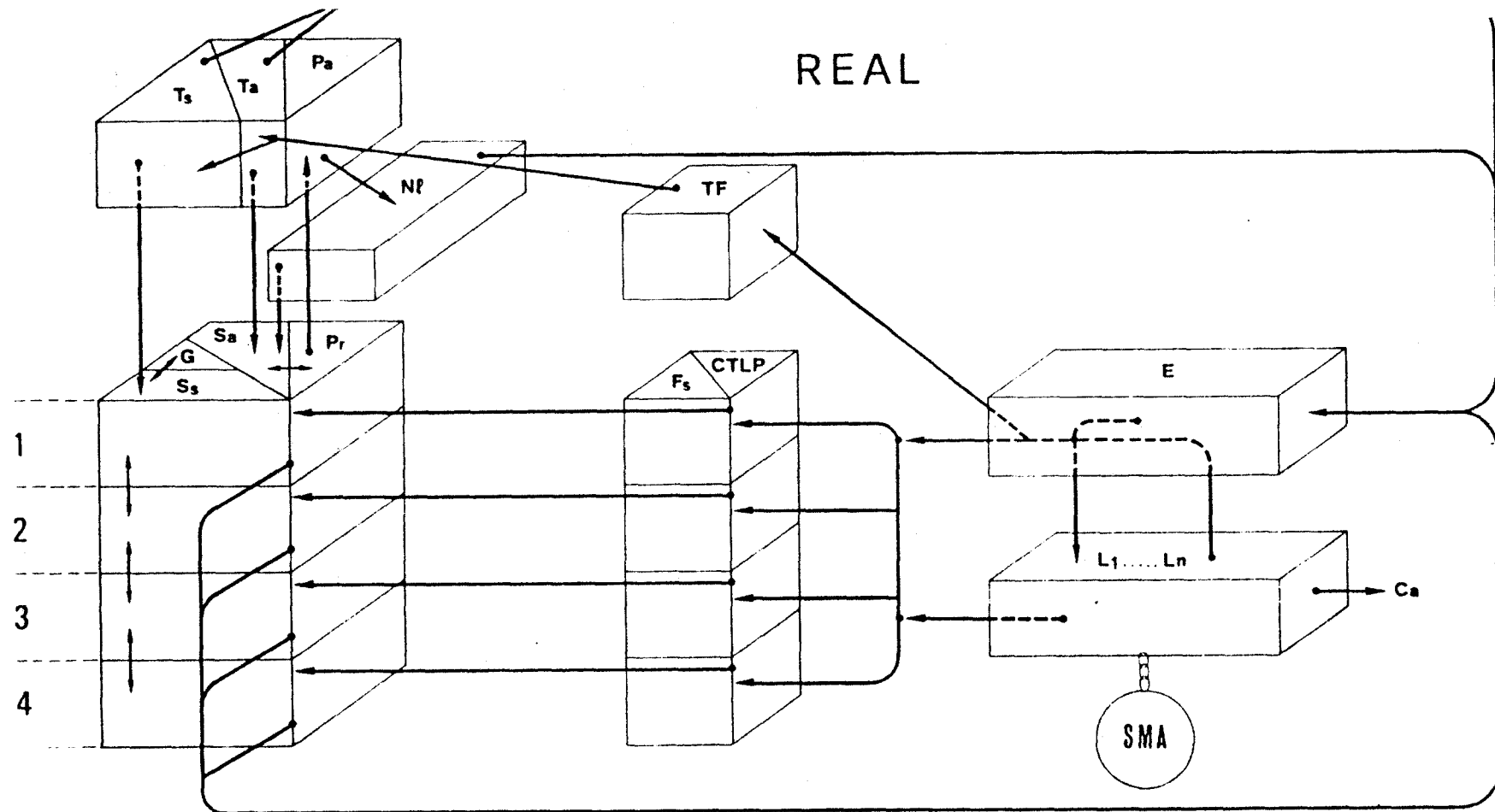
La motivation initiale de ce travail a été l'étude du Rôle Agronomique et Ecologique des Lombriciens. Un schéma conceptuel de ce rôle a été dressé par BOUCHÉ et KRETZCHMAR en 1976, il est résumé par la figure (0.1). Nous avons focalisé notre attention sur les transferts de l'azote et du carbone et notre but a été par l'outil de la modélisation de faire une étude quantitative de ces phénomènes. Les écosystèmes sont extrêmement complexes, car ils associent plusieurs facteurs : les espèces végétales, les micro-organismes, les espèces animales ...

Les modèles généraux tentant de donner une vue plus complète de l'écosystème ne sont pas très nombreux. La plupart sont des modèles schématiques (*conceptuels*).

Le modèle REAL s'efforce par ailleurs d'être [14]

1. Réfutable, c'est-à-dire d'avoir une compartimentation qui permet au système d'être observable (voir chapitre 4 pour la définition de l'observabilité).
2. Ecologique, c'est-à-dire utilisant des données en accord avec les conditions aux champs, ce qui exclut beaucoup de données.
3. Transportable, c'est-à-dire utilisable dans des situations variées.

La construction de modèles comporte plusieurs étapes nous trouvons dans la figure (0.2) un résumé de ces étapes. La nature de ces étapes montre que la modélisation est un travail *pluridisciplinaire*, c'est là un aspect essentiel dont il faut tenir compte.



La version II du modèle du Rôle Ecologique et Agronomique des lombriciens schématise les échanges trophoénergétiques traversant la lumière du tube digestif (= endentère E), à partir de réingestion de turricules constitués d'éléments stables (Ts) ou assimilables (Ta), de litières (NI) ou de sols divers (4horizons 1, 2, 3, 4). Cet endentère fournit les assimilats parvenant aux divers lombriciens (L₁, ..., L_n) qui excrètent à leur tour dans le tube digestif vers E ou par voie cutanée dans un Compartiment de Transfert Lombriciens-Plantes (CTLP). La défécation de l'endentère donne des turricules frais (TF) en surface ou des fèces dans le sol (Fs). Ces éléments passent dans la partie du sol stable (Ss) ou assimilable (Sa) en laissant un espace poral de galeries (G) et sont assimilés par les plantes au niveau racinaire (Pr) avant de rejoindre la partie aérienne (Pa) productrice de litière (NI). Les lombriciens qui produisent aussi de la chair pour leurs prédateurs (Ca) ont une activité décrite par un Sous-Modèle d'Activité.

Figure(0.1) Schéma conceptuel du Rôle Ecologique et Agronomique des Lombriciens : R.E.A.L . (Bouché M.B 1977).

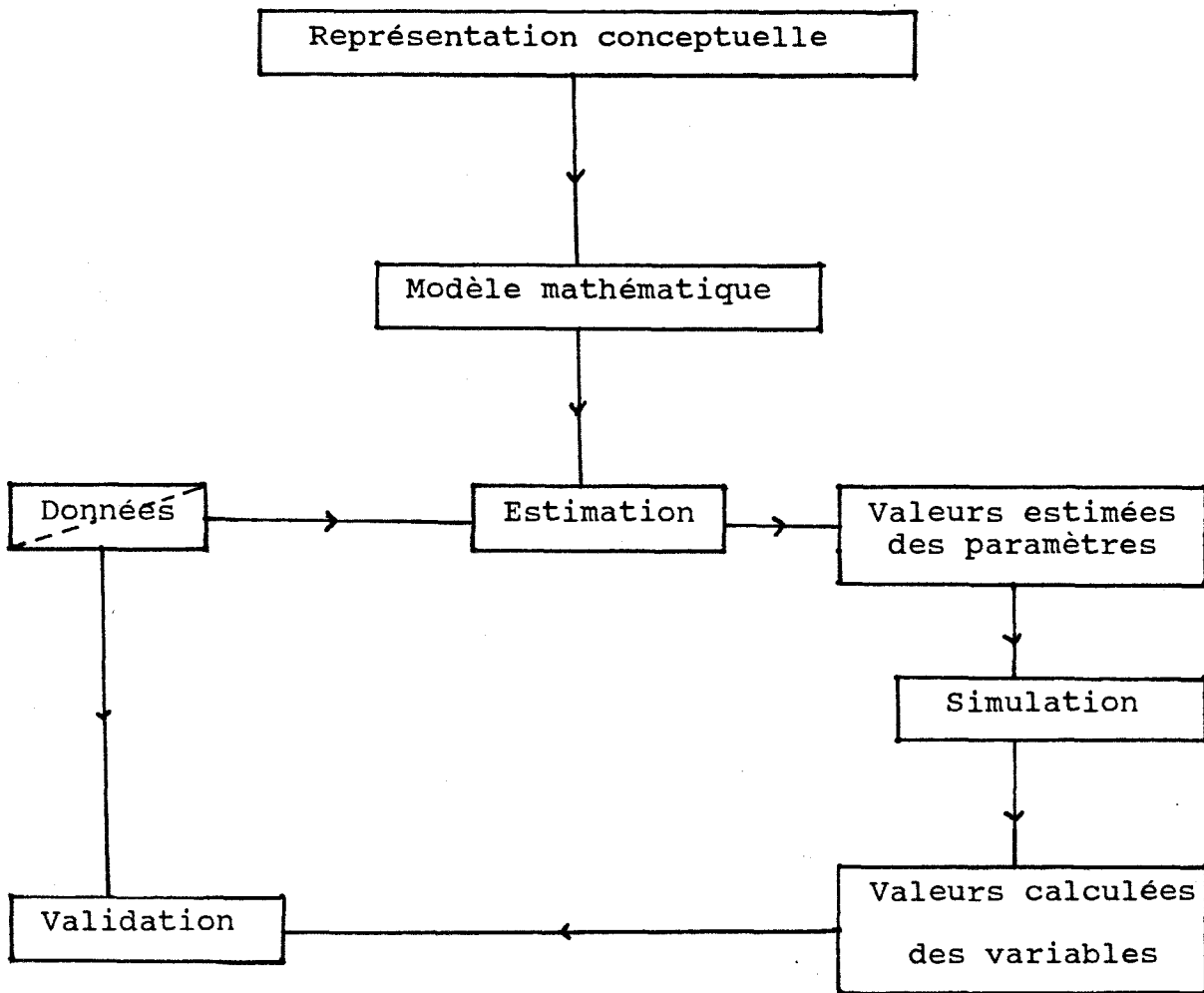


Figure (0.2) : Schéma résumant les principales étapes de la modélisation

PARTIE THEORIQUE

**Problèmes spécifiques à la
régression non linéaire.**

Introduction

Soit le modèle de régression suivant :

$$y = f(x, \theta) + \epsilon$$

Où :

- f est une fonction non linéaire.
- θ est le vecteur des paramètres inconnus $\theta_1, \dots, \theta_p$; on suppose que θ appartient à un sous-ensemble Θ compact de \mathbb{R}^p .
- x est la variable explicative.
- y est la variable expliquée.
- ϵ est une erreur aléatoire, nous supposons tout le long de ce travail que ϵ suit une loi $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$.

Nous disposons d'un ensemble de n observations : $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ vérifiant les relations :

$$(1) \quad y_i = f(x_i, \theta) + \epsilon_i \quad \text{pour} \quad i = 1, \dots, n$$

Sous forme matricielle, la relation (1) s'écrit :

$$Y = F(\theta) + \epsilon$$

où :

$$\begin{aligned} Y &= (y_1, y_2, \dots, y_n)^T \\ F(\theta) &= (f(x_1, \theta_1), \dots, (x_n, \theta)_n)^T \\ \epsilon &= (\epsilon_1, \dots, \epsilon_n)^T \end{aligned}$$

En régression non linéaire, on est amené à se préoccuper successivement des trois points suivants :

1. L'estimabilité et l'estimation des paramètres : nous verrons quels sont les principaux critères statistiques d'estimation ensuite, la question d'estimabilité des paramètres, et enfin nous discuterons les principales méthodes d'estimation.
2. Les régions de confiances et le problème de non linéarité : L'estimation étant achevée, les valeurs estimées des paramètres ne peuvent avoir (au mieux) que des propriétés asymptotiques. Comme les "vrais valeurs" nous restent toujours inconnues, il est alors nécessaire de déterminer les régions où on a le maximum de chances de trouver ces "vraies valeurs". D'autre part l'estimation se résoud par une série d'approximations successives. Pour bien mener à terme cette opération, il apparait souhaitable de disposer d'un moyen (les mesures de non linéarité) de se prévenir contre les approximations abusives, et ainsi apprécier la validité de nos résultats.
3. La conception de plans d'expériences et le choix entre plusieurs modèles : Ce sont deux questions qui se posent une fois l'estimation finie et les modèles élaborés, soit pour un éventuel retour à l'expérience, soit pour trancher entre différents modèles répondant à une même situation physique ou biologique.

Cette partie sera principalement consacrée à l'étude de ces trois points qui feront chacun l'objet d'un chapitre complet.

Chapitre 1

Estimabilité des paramètres.

Aspects numériques et statistiques.

1.1 Principaux critères d'estimations (Rappels)

1.1.1 Le critère des moindres carrés (M-C)

Il s'agit d'un critère "géométrique", qui consiste à minimiser par rapport aux paramètres $\theta_1, \dots, \theta_n$, la distance :

$$(Y - F(\theta))^T W (Y - F(\theta))$$

où:

W est une matrice symétrique définie positive, appelée matrice Poids.

Fréquemment, la matrice W est soit la matrice identité, soit la matrice V^{-1} l'inverse de la matrice de la covariance des erreurs; ce qui revient à donner la même importance à toutes les observations dans le premier cas, et à privilégier les observations où la précision est meilleure dans le deuxième cas.

1.1.2 Le critère du maximum de vraisemblance

Il s'agit d'un critère qui prend en compte le caractère aléatoire du modèle. On maximise la probabilité a posteriori de l'échantillon observé.

Sur le plan pratique, le vecteur des observations est considéré comme la réalisation d'un vecteur aléatoire dont la loi $L(x_1, \dots, x_n/\theta)$ est connue. On cherche alors $\hat{\theta}$ qui rend maximum $L(x_1, \dots, x_n/\theta)$.

$L(x_1, \dots, x_n/\theta)$ s'appelle la vraisemblance de l'échantillon observé.

1.1.3 Le critère bayésien

Ce critère permet de tenir compte de l'information a priori sur le paramètre θ . Si le paramètre suit une loi ayant $P_0(\theta)$ comme densité de probabilité, la quantité à maximiser sera :

$$L^*(x_1, \dots, x_n/\theta) = cL(x_1, \dots, x_n/\theta)P_0(\theta)$$

où :

$L(x_1, \dots, x_n/\theta)$ est la loi définie dans (1.1.2), et c est une constante de normalisation.

Remarques sur le cas normal

1. Si les erreurs suivent une loi normale (ce qui est le cas où nous serons situés dans la partie pratique de notre travail), le critère du maximum de vraisemblance est équivalent à celui des moindres carrés.
2. Dans le cas où les erreurs suivent une loi $\mathcal{N}(0, W^{-1})$ la loi a posteriori sera de la forme :

$$L^*(x_1, \dots, x_n/\theta) = c' \exp((Y - F(\theta))^T W (Y - F(\theta))) \exp((\theta - \mu)^T U (\theta - \mu))$$

où :

c' est une constante.

Appliquons à cette égalité la fonction Log :

$$\text{Log}L^*(x_1, \dots, x_n/\theta) = \text{Log}c' + (Y - F(\theta))^T W (Y - F(\theta)) + ((\theta - \mu)^T U (\theta - \mu))$$

Maximiser $L^*(x_1, \dots, x_n/\theta)$ revient à minimiser $-\text{Log}L^*(x_1, \dots, x_n/\theta)$ ou encore à minimiser la quantité :

$$S(\theta) = (Y - F(\theta))^T W (Y - F(\theta)) + (\theta - \mu)^T U (\theta - \mu)$$

C'est une forme générale que nous utiliserons dans la partie qui va suivre. On remarque qu'en posant $W = I$ et $U = 0$, on retrouve le critère des moindres carrés ordinaires.

1.2 Estimabilité et estimation des paramètres

1.2.1 Introduction

Avant d'entamer l'estimation des paramètres proprement dite, il est prudent de s'assurer de l'estimabilité des paramètres, c'est-à-dire de voir si on se trouve dans des conditions telles que les paramètres puissent être estimés. L'exemple suivant permet de mieux situer cette notion d'estimabilité.

$$y(t) = \frac{\theta_1}{\theta_2 + \theta_3 t}$$

Ce même modèle peut s'écrire sous une forme plus pratique pour l'estimation :

$$y(t) = \frac{1}{\alpha_1 + \alpha_2 t}$$

où :

$$\alpha_1 = \frac{\theta_2}{\theta_1}$$

et :

$$\alpha_2 = \frac{\theta_3}{\theta_1}$$

Il apparait d'après cette dernière écriture, que seulement deux paramètres peuvent être estimés de manière unique : α_1 et α_2 . L'ensemble des paramètres correspondants θ_1 , θ_2 et θ_3 sont en nombre infini.

L'estimation des paramètres ne peut aboutir ici ...

Nous exposerons dans la suite un théorème qui permet de savoir si oui ou non, l'estimation des paramètres est possible.

1.2.2 Critère d'estimabilité (BECK et ARNOLD 1977)

Théorème

Pour que les paramètres du modèle :

$$y = f(x, \theta)$$

soient estimables de façon unique, il suffit que la matrice des dérivées premières soit de rang p .

Éléments de démonstration

Soit la fonction à minimiser :

$$S(\theta) = (Y - F(\theta))^T W (Y - F(\theta))$$

où : W est la matrice des poids définie par :

$$W_{i,j} = \delta_{ij} \sigma_i^2$$

Faisons un développement de Taylor de S autour du minimum $\hat{\theta}$:

$$(1) \quad S(\theta) = S(\hat{\theta}) + \sum_{i=1}^p \hat{S}_{\theta_i} (\theta_i - \hat{\theta}_i) + \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p \hat{S}_{\theta_i \theta_j} (\theta_i - \hat{\theta}_i) (\theta_j - \hat{\theta}_j) + \dots$$

où :

$$\hat{S}_{\theta_i} = \frac{\partial S(\hat{\theta})}{\partial \theta_i} \quad \text{et} \quad \hat{S}_{\theta_i \theta_j} = \frac{\partial^2 S}{\partial \theta_i \partial \theta_j}$$

On obtient par le calcul : $\hat{S}_{\theta_i} = -2 \sum_{u=1}^n \sum_{v=1}^n W_{uv} (y_v - \hat{f}_v) \hat{J}_{ui}$ et $\hat{S}_{\theta_i \theta_j} = -\sum_{u=1}^n \sum_{v=1}^n W_{uv} (\hat{J}_{ui} \hat{J}_{vj} - (y_v - \hat{f}_v) \hat{J}_{uij})$.

où :

$$\hat{f}_v = \frac{\partial f}{\partial \theta_i} \Big|_{x=x_u, \theta=\hat{\theta}} \quad \text{et} \quad \hat{J}_{uij} = \frac{\partial^2 f(x, \theta)}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \Big|_{x=x_u, \theta=\hat{\theta}}$$

Une condition nécessaire pour que $S(\theta)$ admet un minimum en $\hat{\theta}$ est que :

$$\hat{S}_{\theta_i} = 0 \quad \text{pour } i = 1, \dots, p$$

Définissons les déterminants :

D_r pour $r = 1, \dots, p$

$$D_r = \begin{vmatrix} \hat{S}_{\theta_1 \theta_1} & \dots & \hat{S}_{\theta_1 \theta_r} \\ \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \dots & \cdot \\ \hat{S}_{\theta_r \theta_1} & \dots & \hat{S}_{\theta_r \theta_r} \end{vmatrix}$$

Dans le cas où $\hat{\theta}$ est minimum $\hat{S}(\theta) = 0$ et $(S(\theta) - S(\hat{\theta}))$ sera une forme quadratique.

Une condition nécessaire et suffisante pour que $(S(\theta) - S(\hat{\theta}))$ soit une forme quadratique est que :

D_r soit strictement positif pour $r = 1, \dots, p$ (voir annexe).

Posons :

$$\Delta_{\theta_i^+} = \frac{(\theta_i - \hat{\theta}_i)}{\hat{\theta}_i} \quad S_{ij}^+ = \hat{\theta}_i \hat{\theta}_j \hat{S}_{\theta_i \theta_j}$$

$$\mathcal{J}_{u_i}^+ = \hat{\theta}_i \hat{\mathcal{J}}_{u_i} \quad \mathcal{J}_{u_{ij}}^+ = \hat{\theta}_i \hat{\theta}_j \hat{\mathcal{J}}_{u_{ij}}$$

Si $S(\hat{\theta}) = 0$, (1) peut être approximé de la manière suivante :

$$S(\theta) - S(\hat{\theta}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n S_{ij}^+ \Delta \theta_i^+ \Delta \theta_j^+$$

Le calcul de S_{ij}^+ donne :

$$S_{ij}^+ = \sum_{u=1}^n (\sigma_u^{-1} \mathcal{J}_{u_i}^+) (\sigma_u^{-1} \mathcal{J}_{u_j}^+)$$

Remarquons que :

$$S_{ij}^+ = a_i^T a_j$$

où :

$$a_i = (\sigma_1^{-1} \mathcal{J}_{1i}^+, \dots, \sigma_n^{-1} \mathcal{J}_{ni}^+)^T$$

D_r est approximé par :

$$D_r^+ = \begin{vmatrix} a_1^T a_1 & \dots & a_1^T a_r \\ \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \dots & \cdot \\ a_r^T a_1 & \dots & a_r^T a_r \end{vmatrix}$$

C'est un déterminant de Gram. Pour qu'il soit nul il faut et il suffit que les a_i soient linéairement indépendants et comme les a_i sont proportionnels aux vecteurs colonnes de $\mathcal{J}(\hat{\theta})$, ceci équivaut à dire que $\mathcal{J}(\hat{\theta})$ est de rang p . (Fin de la démonstration)

1.2.3 Remarques et commentaires

1. $\mathcal{J}(\theta)$ est de rang p est équivalent à déterminant de $(\mathcal{J}^T(\theta)\mathcal{J}(\theta))$ non nul. Sur le plan pratique, c'est cette dernière condition qu'on vérifie pour avoir l'estimabilité.
2. Dans le cas où on est confronté à un problème de non estimabilité, on peut procéder de deux manières : soit réduire le nombre des paramètres, en reparamétrant le modèle, soit réviser le plan d'expérience. Autre cas fréquent celui où est presque nul, ceci se traduirait par une convergence très lente vers le minimum (voir les commentaires de (3.4.2.1)).

1.3 Méthodes numériques d'estimation

1.3.1 Méthodes de recherches directes

Ces méthodes consistent à se déplacer sur une grille, le pas de déplacement est donné pour chaque paramètre. A chaque itération toutes les directions sont exploitées en chaque point. On se déplace dans celle qui rend minimum la valeur de S . Nous citons comme méthode de recherche directe la méthode du simplexe

(NELDER et MEAD, 1965). Ces méthodes présentent l'avantage d'être faciles à la programmation. Elles ne nécessitent ni de calcul de dérivées ni d'inversion de matrice. Elles présentent par contre l'inconvénient d'être des méthodes très lentes à l'exécution, et de ne pas fournir d'estimation de la matrice de covariance des paramètres. Dans le livre de BECK et ARNOLD [11] on peut trouver un inventaire des principales méthodes de recherches directes.

1.3.2 Méthodes itératives

Le principal avantage de ces méthodes est que l'amélioration est assurée à chaque pas. Le nombre d'itérations s'en trouve ainsi énormément réduit par rapport aux méthodes de recherches directes citées plus haut. Nous nous proposons d'examiner ici la méthode de base qui est la méthode de linéarisation de Gauss. Nous verrons ensuite ses différentes variantes. La fonction à minimiser, définie en (1.1) est :

$$S(\theta) = (Y - F(\theta))^T W (Y - F(\theta)) + (\mu - \theta)^T U (\mu - \theta)$$

où :

W et U sont des matrices poids.

On suppose que W est définie positive et que U est semi-définie positive.

Nous retrouvons le cas des moindres-carrés ordinaires en prenant $W = I$ et $U = 0$.

La valeur estimée de sera notée $\hat{\theta}$.

3.4.2.1 Méthode de linéarisation de Gauss

$\hat{\theta}$ est la valeur qui annule la dérivée de S .

Calculons la dérivée de S par rapport à θ :

$$\nabla_{\theta} S = 2[-\nabla(F(\theta))^T]W[Y - F(\theta)] + 2(-I)U(\mu - \theta)$$

où :

∇_{θ} est l'opérateur de dérivation :

$$\nabla_{\theta} = \left(\frac{\partial}{\partial \theta_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial \theta_p} \right)^T$$

(voir Annexe 1 pour la dérivation de forme quadratique).

Posons :

$$\mathcal{J}(\theta) = \nabla_{\theta}(F(\theta))^T$$

Comme $\hat{\theta}$ est le minimum de $S(\theta)$ et en remplaçant par $\mathcal{J}(\theta)$. On aura :

$$(1) \quad \mathcal{J}(\hat{\theta})W(Y - F(\hat{\theta})) + U(\mu - \hat{\theta}) = 0$$

Il est impossible de dépasser l'équation (1), en θ . Pour dépasser cette difficulté, on procède à un développement de Taylor de $F(\hat{\theta})$ en un point b "voisin" de θ . D'autre part $\mathcal{J}(\hat{\theta})$ étant inconnue on utilisera l'approximation :

$$\mathcal{J}(\hat{\theta}) = \mathcal{J}(b)$$

L'équation (1) devient alors :

$$(2) \quad \mathcal{J}^T(b)W(Y - F(b) - \mathcal{J}(b)(\hat{\theta} - b)) + U(\mu - b) - U(\theta - b) = 0$$

Pour mettre la procédure itérative en marche, on pose :

$$\theta^k = b \quad \theta^{k+1} = \hat{\theta} \quad F^{(k)} = F(\theta^{(k)}) \quad J^{(k)} = J(\theta)$$

k représente l'itération, et θ_{k+1} sera l'estimation de $\hat{\theta}$ en cette itération.

Avec ces nouvelles notations, on déduit facilement de l'équation (2), l'équation de linéarisation de Gauss, constituant le processus itératif conduisant à l'estimation de $\hat{\theta}$:

$$\theta^{(k+1)} = \theta^{(k)} + P^{(k)}(J^{T(k)}W(Y - F^{(k)}) + U(\mu - \theta^{(k)}))$$

où :

$$P^{-1(k)} = \mathcal{J}^{T(k)}W\mathcal{J}^{(k)} + U$$

Le critère d'arrêt de ce processus itératif est :

$$\frac{|\theta_i^{(k+1)} - \theta_i^{(k)}|}{|\theta_i^{(k+1)}| + \delta_1} \leq \delta$$

Pour $i = 1, \dots, p$, δ est fixé en fonction de la précision souhaitée, δ_1 est un nombre non nul utilisé pour éviter d'annuler le dénominateur.

Remarques et commentaires

Dans la méthode de linéarisation de Gauss, la difficulté est l'inversion de la matrice P^{-1} .

Si on est placé dans le cas du critère des moindres carrés ordinaires ($W = I$ et $U = 0$), P^{-1} est inversible si et seulement $\det(\mathcal{J}^T\mathcal{J})$; ce qui correspond à la condition d'estimabilité des paramètres vue dans la partie (1.2).

Dans le cas où cette condition n'est pas remplie, deux cas peuvent se présenter : ou le minimum n'existe pas, ou il y a une infinité de solutions possibles.

Une situation fréquemment rencontrée est celle où $\det(\mathcal{J}^T\mathcal{J})$, non nul, prend des valeurs très faibles. Nous présentons un exemple pour illustrer ce cas [11] : soit le modèle :

$$y = \theta_1 x + \exp(-\theta_2 x)$$

Le vecteur des observations est :

$Y = (2, 3)^T$ correspondant au plan d'expérience $x_1 = 1$ et $x_2 = 2$.

Si on se place dans le cas des moindres carrés ordinaires, la fonction à minimiser est :

$$S = (2 - \theta_1 - \exp(-\theta_2))^2 + (3 - 2\theta_1 - \exp(2\theta_2))^2$$

La représentation graphique de cette fonction est donnée par :

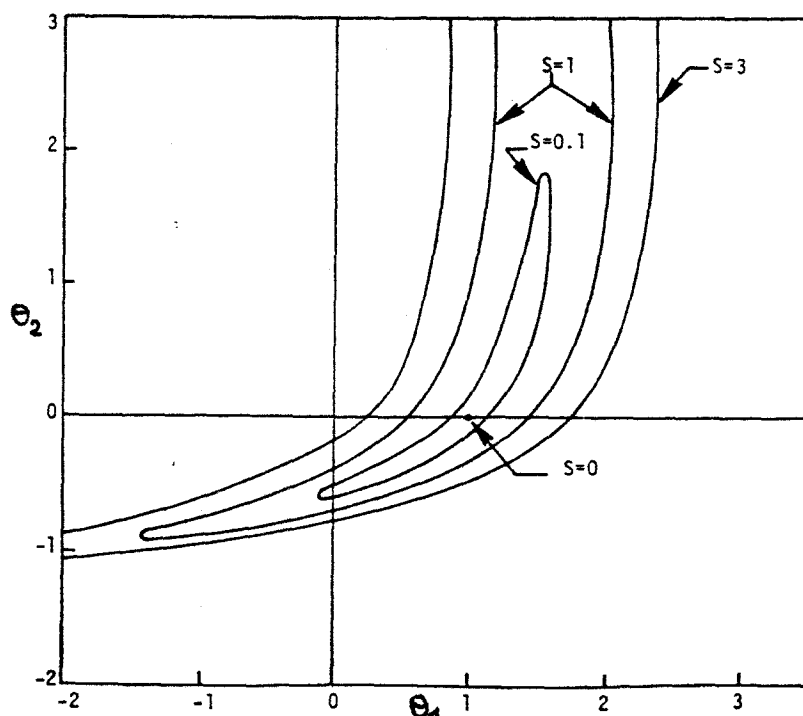


Figure 1.1 : Représentation graphique des contours de la fonction $S(\theta)$ sommes des carrés des écarts pour différents niveaux 0, 0.1, 1.3

La matrice $\mathcal{J}(\theta)$ dans ce cas est :

$$\begin{pmatrix} 1 & -\exp(-\theta_2) \\ 2 & -2\exp(-2\theta_2) \end{pmatrix}$$

La condition d'estimabilité est non vérifiée lorsque $\theta_2 = 0$ ou lorsque θ_2 tend vers (∞) . Si on initialise en dehors de ces deux cas $\det(\mathcal{J}^T \mathcal{J})$ est non nul, or $S(\theta)$ est minimum en $\theta_1 = 0$ et $\theta_2 = 0$. Le minimum atteint est $S(\theta) = 0$. A partir d'un

certain niveau (par exemple $S(\theta) = 0.1$), la descente vers le minimum sera très lente.

1.3.2.2. Variantes de la méthode de Gauss

Un grand nombre d'algorithmes a été proposé pour l'estimation des paramètres. Ces méthodes sont présentées sous différentes formes. La plupart dérivent de la méthode de linéarisation de Gauss, d'autres sont des méthodes à part. Pour un tour d'horizon des différentes méthodes citons le livre de BARD [7]. Nous nous limitons ici à celles les plus couramment utilisées.

1.3.2.2.1. La méthode de Box-Kanemazu

Cette méthode permet une correction du changement de direction vers le minimum dans l'algorithme de Gauss. Dans celui-ci, il arrive que le changement de direction soit si grand que les valeurs itérées oscillent autour du minimum sans jamais l'atteindre. L'algorithme corrigé de Gauss devient :

$$\theta^{(k+1)} = \theta^{(k)} + h^{(k+1)} \Delta_g \theta^{(k)}$$

où :

$$\Delta_g \theta^{(k)} = P^{(k)}(X^{T(k)}W(Y - F^{(k)}) + U(\mu - \theta^{(k)}))$$

Si $h^{(k+1)}$ est pris égal à 1, on retrouve l'algorithme de Gauss. Pour le choix optimal de h , BOX et KANEMAZU [17] considèrent S , au niveau de chaque itération k , comme un polynôme du deuxième degré en h :

$$S(h) = a_0 + a_1 h + a_2 h^2$$

Le h optimal est celui qui minimise S . a_0, a_1, a_2 sont définis à l'étape $(k + 1)$ par :

$$a_0 = S^{(k)} \quad a_1 = -2G^{(k)}$$

$$a_2 = [S_\alpha^{(k)} - S^k + 2G_\alpha^{(k)}]\alpha^{-1}$$

où :

- α est fixé arbitrairement (généralement on prend $\alpha = 1$, ou $\alpha = 1/2$, ou $\alpha = 0.01$).
- $G^{(k)} = \Delta_g \theta^{(k)} P^{-1(k)} \Delta_g \theta^{(k)}$.
- $S_\alpha^{(k)}$ est la valeur de S en $\theta^{(k)}$ en mettant $h = \alpha$ dans (3). Pour les détails de l'élaboration des valeurs de a_0, a_1 et a_2 , voir BECK et ARNOLD [11]. La valeur optimale de h est obtenue en mettant la dérivée de $S(h)$ égale à zéro, on obtient :

$$h^{(k+1)} = G^{(k)} \alpha^2 [S_\alpha^{(k)} - S^k + 2G_\alpha^{(k)}] \alpha^{-1}$$

La méthode de Marquardt

Pour limiter le problème des oscillations très larges dans l'algorithme de Gauss, LEVENBERG, [52], a proposé la correction suivante :

$$\theta^{(k+1)} = \theta^{(k)} + (X^{(k)} W X^{(k)} + \lambda^{(k)} \Omega^{(k)})^{-1} X^{T(k)} W e^{(k)}$$

où :

- $e^{(k)} = Y - F(\theta^{(k)})$.
- Ω est une matrice diagonale introduite pour corriger la direction.
- λ est un réel qui sert à réduire les oscillations.

On peut prendre pour valeur de λ et Ω à l'itération k les valeurs :

$$(4) \quad \lambda^{(k)} = \frac{e^{T(k)} W X^{(k)} X^{T(k)} W e^{(k)}}{S^{(k)}} \quad \Omega^{(k)} = I$$

Sous ces valeurs la méthode prend le nom de “Méthode de descente Maximum”. En général, on choisit couramment pour λ , à la k ième itération, la valeur :

$$\lambda^{(k)} = \frac{\lambda_0}{\nu^{(k)}}$$

où :

- λ_0 est la valeur déduite de (4) dans la première itération.
- ν est une constante supérieure à un. C'est ce qu'on appelle la méthode de Marquardt. [53]. C'est la méthode la plus couramment utilisée.

Remarques et commentaires

1. Face aux nombreuses méthodes qui existent, il convient de choisir la mieux adaptée au problème posé en biométrie. La comparaison entre ces méthodes porte sur le temps de calcul et le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre le minimum. Une étude a été faite dans ce sens [51]. Il en résulte que l'algorithme de Marquardt, programmé aussi par Saih. A. [66], assure toujours une convergence vers le minimum. C'est l'algorithme que nous avons utilisé dans la partie pratique de notre travail.
2. Pour démarrer un algorithme le choix des valeurs initiales conditionne en grande partie la convergence vers le minimum. Malheureusement il n'existe pas de méthode générale conduisant au choix raisonné de ces valeurs initiales, cependant la connaissance du phénomène physique ou biologique et l'interprétation des paramètres du modèle, peuvent donner une évaluation initiale.

Chapitre 2

Région de Confiance et problème de non linéarité

Introduction

L'estimation des paramètres est certes une étape importante, mais elle reste en elle-même d'une portée limitée, puisque les valeurs "exactes" nous resteront malgré tout inconnues. L'intérêt est, alors, de déterminer des régions dans l'espace des paramètres, où la probabilité pour que celles-ci recouvrent la vraie valeur du paramètre θ soit supérieure ou égale à une valeur α donnée. L'objet de ce chapitre est d'étudier la construction de ces régions, dites régions de confiance, nous verrons qu'elles sont construites à l'aide d'approximations, et il faut les manipuler avec grande précaution lorsque la "non linéarité", concept qui sera défini dans ce chapitre, est assez élevée.

2.1 Construction des régions de confiance

2.1.1 Généralités

La détermination de la région de confiance est directement liée aux problèmes de test d'hypothèse de type :

$$H_0 : \theta = \theta_0 \quad \text{contre} \quad H_1 : \theta \neq \theta_0.$$

θ_0 étant le "vrai" paramètre.

La région de confiance associée à ce test sera définie par :

$$\mathcal{R}_\Phi(Y) = \{\theta \in \Theta \quad \text{tel que} \quad \Phi(Y, \theta) = 0\}$$

où Φ est la fonction associée à la construction du test. Elle est définie par :

$$\begin{aligned} \Phi : R \times \Theta &\longrightarrow \{0, 1\} \\ (Y, \theta) &\longmapsto \begin{cases} 0 & \text{si } H_0 \text{ est acceptée} \\ 1 & \text{sinon} \end{cases} \end{aligned}$$

Soit $P_\Phi(\theta)$ la probabilité pour que le paramètre Θ soit dans la région $\mathcal{R}_\Phi(Y)$:

$$P_\Phi(\theta) = \int (1 - \Phi(Y, \theta)) dP_\Theta(Y)$$

Une région de confiance est dite exacte si le test associé est sans biais, c'est-à-dire :

$$C_\Phi = 1 - \alpha$$

La détermination de la région de confiance dépend de la construction du test. Dans ce qui suivra, nous verrons trois méthodes de constructions, mais avant nous commençons par exposer un théorème dont l'utilisation est assez fréquente au cours de ces constructions.

Théorème :

Soit Z un vecteur aléatoire gaussien de loi $\mathcal{N}(m, \sigma^2 I_n)$ où :

- I_n est l'opérateur identité sur R^n .
- m est un vecteur d'un sous espace vectoriel H_1 de dimension p .
Soit H_2 un sous espace vectoriel de R^n de dimension q (avec $p+q \leq n$) orthogonal à H_1 .

Par $\Pi_{H_i}, i = 1, n$, on notera la projection orthogonale sur H_i .

alors :

1. $\Pi_{H_1}(Z)$ et $\Pi_{H_2}(Z)$ sont indépendants.
2.
 - la loi de $\Pi_{H_1}(Z)$ est $\mathcal{N}(m, \sigma^2 I_p)$.
 - La loi de $\Pi_{H_2}(Z)$ est $\mathcal{N}(0, \sigma^2 I_q)$.
3. La loi de $\|\Pi_{H_2}(X)\|^2 = \frac{1}{\sigma^2} \chi^2$

Démonstration :

1. C'est un résultat général, voir le cours de X. Milhaud [55].
2. $\Pi_{H_1}(Z)$ et $\Pi_{H_2}(Z)$ ont respectivement pour loi la marginale en H_1 et la marginale en H_2 .

Ces lois sont donc normales :

$$E(\Pi_{H_1}(Z)) = \Pi_{H_1}(Z) = \Pi_1(m) = m.$$

D'autre part la restriction de $\sigma^2 I_n$ à H_1 est $\sigma^2 I_p$.

$$E(\Pi_{H_2}(Z)) = \Pi_{H_2}(Z) = 0 \text{ et la restriction à } H_2 \text{ est } \sigma^2 I_n \text{ est } \sigma^2 I_q.$$

3. $\mathcal{L}(\Pi_{H_2}(Z)) = \mathcal{N}(0, \sigma^2 I_q)$ (\mathcal{L} signifie : La loi de ...)

$$\text{Donc } \mathcal{L}\left(\frac{1}{\sigma} \Pi_{H_2}(Z)\right) = \mathcal{N}(0, \sigma^2 I_q)$$

Soit e_1, \dots, e_q une base orthonormée de H_q , le vecteur $V = \frac{1}{\sigma} \Pi_{H_2}(Z)$ s'identifie au q-uplet de ses composantes :

$$V = (V_1, \dots, V_1)$$

où

$\mathcal{L}(V_1) = \mathcal{N}(0, 1)$ pour $i = 1, \dots, n$.

On en déduit :

$\mathcal{L}(\frac{1}{\sigma^2} \Pi_{H_2}(Z)) = \mathcal{L}(\sum_{i=1}^n V_i^2) = \chi_q^2$. Nous aborderons maintenant les trois méthodes de construction.

2.1.2 Projecteur sur le plan tangent

Introduction

Cette première méthode s'appuie sur le test suivant :

H_0 : $(Y - F(\theta_0))$ suit une loi $\mathcal{N}(0, \sigma^2 I_n)$

contre son alternative.

Soit la statistique suivante :

$$E(Y, \theta) = \frac{(n-p)}{p} \left\{ \frac{(Y - F(\theta))^T P_\theta (Y - F(\theta))}{(Y - F(\theta))^T (I_n - P_\theta) (Y - F(\theta))} \right\}$$

où :

P_θ est un projecteur de rang q dans R^n .

Proposition :

Sous l'hypothèse H_0 , la statistique $E(Y, \theta)$ suit une loi de Fisher-Snedecor à q et $(n-p)$ degré de libertés.

Cette proposition est une application directe du théorème de la partie (2.1), on utilise aussi le fait que le rapport de deux variables ^(;d)aléatoires suivant une loi de χ^2 suit une loi de Fisher-Snedecor.

La région de confiance qu'on déduit de cette proposition est :

$$\mathcal{R}_E = \{\theta \in \Theta / E(Y, \theta) \leq F_\alpha(p, n-p)\}$$

Un choix naturel pour le projecteur P_θ est le projecteur sur le plan tangent :

$$P_\theta = \mathcal{J}(\theta)(\mathcal{J}^T(\theta)\mathcal{J}(\theta))^{-1}\mathcal{J}(\theta)^T$$

Cette région ainsi définie, possède les propriétés suivantes :

Elle est exacte. Elle présente par contre la difficulté pratique du calcul du projecteur $P(\theta)$, en chaque point θ .

Approximation linéaire

Cette méthode est basée sur la normalité asymptotique de l'estimateur $\hat{\theta}$:

$\hat{\theta}$ suit une loi $\mathcal{N}(\theta_0, \sigma^2(\mathcal{J}(\theta_0)^T\mathcal{J}(\theta_0))^{-1})$.

On considère la statistique :

$$L_{\theta_0}(Y, \theta) = \left\{ \frac{(\hat{\theta} - \theta)(\mathcal{J}^T(\hat{\theta})\mathcal{J}(\hat{\theta})(\hat{\theta} - \theta))}{S(\hat{\theta})} \right\} \frac{(n-p)}{p}$$

$L_{\theta_0}(Y, \theta)$ suit asymptotiquement la loi de Fisher-Snedecor à p et $(n-p)$ degrés de liberté. (Ce résultat se justifie par le fait que $L_{\theta_0}(Y, \theta)$ est un rapport dont chacun des termes suit une loi de χ^2).

La région associée est définie par :

$$\mathcal{R}_L = \{\hat{\theta} \in \Theta / L_{\theta_0}(Y, \theta) \leq F_\alpha(p, n-p)\}$$

Les caractéristiques de cette région sont les suivantes :

- Elle est asymptotiquement exacte, c'est-à-dire $C_L(\theta_0)$ tend vers $(1-\alpha)$ quand n tend vers $+\infty$.
- Elle contient la valeur estimée $\hat{\theta}$.
- Elle correspond à une ellipsoïde, donc sa construction est relativement simple.

Les isocontours de vraisemblance

Considérons la statistique :

$$V_n(Y, \theta) = \left\{ \frac{(Y - F(\theta))^T(Y - F(\theta)) - (Y - F(\hat{\theta}))^T(Y - F(\hat{\theta}))}{(Y - F(\hat{\theta}))^T(Y - F(\hat{\theta}))} \right\} \frac{p}{(n-p)}$$

La statistique $V_n(Y, \theta)$ suit une loi de Fisher-Snedecor à p et $(n-p)$ degrés de liberté, (la justification se fait par le théorème de la partie (2.1)) :

$V_n(Y, \theta)$ est le rapport de deux projections, sur des plans orthogonaux, de deux variables aléatoires, elle suit donc une loi $F(p, n-p)$. La région de confiance associée à cette statistique est :

$$\mathcal{R}_V = \{\theta \in \Theta / V(Y, \theta) \leq F_\alpha(p, n-p)\}$$

Elle a les caractéristiques suivantes:

- Elle est asymptotiquement exacte, c'est-à-dire :
 $C_V(\theta_0)$ tend vers $(1 - \alpha)$ quand n tend vers $+\infty$.
- Comme $C_V(\theta_0)$ peut s'écrire sous la forme :

$$C_V(\theta_0) = \frac{S(\theta) - S(\hat{\theta})}{p} \frac{S(\hat{\theta})}{(n-p)}$$

On déduit de cette écriture que la région \mathcal{R}_V est délimitée par le contour critique :

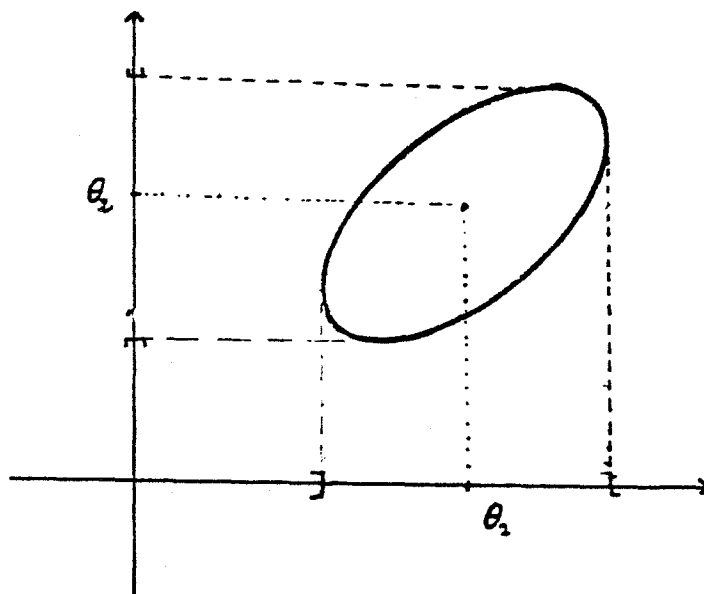
$$S_C(\hat{\theta}) = S_C(\hat{\theta}) \left\{ 1 + \frac{p}{n-p} F_\alpha(p, n-p) \right\}$$

Remarques et commentaires

1. Les trois régions de confiances définies précédemment coïncident dans le cas d'un modèle linéaire $Y = A\theta$, où A est une matrice $n \times p$ de rang plein. Ce résultat se justifie en calculant les trois quantités $V(Y, \theta)$, $L(Y, \theta)$ et $E(Y, \theta)$ et en constatant leur égalité.

2. Au niveau pratique, on travaille plus avec les intervalles de confiance, ceux-ci s'obtiennent par projection de la région de confiance sur les axes du repère (voir figure (2.2)).

Figure 2.2 : Détermination des intervalles de confiance à partir de la région



de confiance. Cas d'un paramètre $\theta \in R$.

3. La statistique $V(Y, \theta)$ ne dépend que de la surface de réponse, la région correspondante sera donc invariante lors de la reparamétrisation du modèle. Elle présente donc l'inconvénient de "l'insouciance" vis à vis de la non linéarité due à la paramétrisation du modèle. La statistique $E(Y, \theta)$, vu que le plan de projection dépend de la paramétrisation, tient compte de la non linéarité, mais elle présente l'inconvénient du calcul du projecteur P_θ en chaque point θ . Seule la méthode de construction par $L(Y, \theta)$ fait le compromis entre la facilité de construction et la prise en compte de la non linéarité, c'est la méthode qui semble être la meilleure! (voir J.R. DONALDSON et R.B. SCHANABEL [28]).

2.2 Le problème de la non linéarité

Introduction

Tous les algorithmes d'estimations sont basés sur une approximation linéaire, au niveau de chaque itération du modèle non linéaire. L'effet géométrique lié à cette approximation est de remplacer la surface de réponse par son plan tangent au point :

$$F(\theta^{(k)}) = (f(x_1, \theta^{(k)}), (f(x_2, \theta^{(k)}), \dots, (f(x_n, \theta^{(k)}))$$

relatif à la k ème étape du processus itératif d'estimation. Il apparaît légitime d'affirmer que l'efficacité de nos algorithmes d'estimation, et au delà de toute l'inférence statistique, doivent tenir compte du phénomène de non linéarité.

Dans ce qui va suivre, nous présentons la définition de la non linéarité et sa quantification. Notre réflexion est largement inspirée des travaux de Bates et Watts[8].

2.2.1 Vitesse, accélération et courbure liée à un paramètre

Lorsque le paramètre θ décrit une droite de direction

$$h = (h_1, h_2, \dots, h_p)^T$$

sur la surface, le point correspondant

$$F(\theta) = (f(x_1, \theta), (f(x_2, \theta), \dots, (f(x_n, \theta))$$

va décrire une courbe définie par :

$$F_b(h) = F(\theta + bh)$$

La vitesse du point $F(\theta)$ est donné par :

$$\dot{F}_h = \left. \frac{\partial F_h}{\partial b} \right|_{b=0}$$

ce qui est égal à :

$$\sum_{i=1}^p \frac{\partial F_h}{\partial \theta_i} \frac{\partial \theta_i}{\partial b} \Big|_{b=0}$$

En utilisant la matrice \mathcal{J} , sous forme matricielle, \dot{F}_h sera :

$$\dot{F}_h = \mathcal{J}(\theta).h$$

A partir des mêmes considérations cinématiques, on définit le vecteur accélération du point en mouvement $F(\theta^{(k)})$.

$$\ddot{F}_h = \left. \frac{\partial^2 F_h}{\partial^2 b} \right|_{b=0}$$

Sous une forme matricielle :

$$\ddot{F}_h = h^T . H . h \quad (*)$$

où H est un cube défini par :

$$H = (H_{iab}) \begin{pmatrix} 1 & \leq & i & \leq & n \\ 1 & \leq & a,b & \leq & n \end{pmatrix}$$

où :

$$H_{iab} = \frac{\partial^2 f(x_i, \theta)}{\partial \theta_a \partial \theta_b}$$

(Le produit $(*)$ se fait d'une matrice d'indices a et b , par le vecteur $h \in R$, autant de fois qu'il y a d'indices i).

Commentaires

Géométriquement, l'interprétation qu'on peut faire des quantités \dot{F}_h et \ddot{F}_h est la suivante :

Dans nos algorithmes itératifs, nous faisons varier θ , et le point correspondant sur la surface de réponse $F(\theta)$ "parcourt" une trajectoire, il possède la vitesse et l'accélération exprimées plus haut.

2.2.2 Mesures de non linéarité

L'accélération \ddot{F}_h , peut se décomposer en trois composantes :

- \ddot{F}_h^T , de dimension 1 : c'est la composante suivant la tangente, on l'appelle 'accélération tangentielle'.
- \ddot{F}_h^G de dimension $p - 1$: c'est la composante suivant les $p - 1$ dimension restante du plan tangent, on l'appelle 'accélération géodisique'.
- \ddot{F}_h^N de dimension $n - p$: c'est la composante suivant le plan normal au plan tangent, on l'appelle 'accélération normale'.

En s'inspirant des notions cinématiques, on définit les courbures suivantes :

$$K_h^N = \frac{|\ddot{F}_h^N|}{|\dot{F}_h|^2}$$
$$K_h^T = \frac{|\ddot{F}_h^T + \ddot{F}_h^G|}{|\dot{F}_h|^2}$$

Elle sont respectivement appelées "courbure normale" et "courbure tangentielle".

Commentaires

1. Géométriquement, l'inverse de K_h^N représente le rayon de courbure de la surface de réponse au point $F(\theta^{(k)})$.
2. Les deux quantités K_h^N et K_h^T caractérisent la surface de réponse de manière très différentes :
 - K_h^N ne dépend que de la surface de réponse (donc du modèle $f(x, \theta)$), et du plan d'expérience défini par x_1, \dots, x_n . On l'appelle : "Courbure intrinsèque".
 - Lors d'une reparamétrisation du même modèle ($f(x, \theta)$), et avec le même plan d'expérience, la surface de réponse reste inchangée, mais la courbure K_h^T change de valeur. Pour cela, on l'appelle la Courbure due à la paramétrisation. Bien entendu cette dernière dépend aussi de la surface de réponse, donc du modèle ($f(x, \theta)$) et du plan d'expérience défini par x_1, \dots, x_n . La meilleure paramétrisation est celle qui rend minimum la courbure K_h^N .
3. Dans la pratique comme la région de confiance (cas des isocontours de vraisemblance) est donnée par :

$$|S(\theta) - S(\hat{\theta})| \leq \left(\frac{S(\hat{\theta})}{(n-p)} \right) \sqrt{F_\alpha(p, n-p)}$$

cette région est de rayon :

$$r = s\sqrt{p}\sqrt{F_\alpha(p, n-p)}$$

où :

$$s = \frac{S(\hat{\theta})}{(n-p)}$$

La comparaison de l'inverse de K_h^N et K_h^T avec r , rayon de la région de confiance, nous fournit un moyen d'apprécier en chaque point, nos approximations linéaires. Dans la partie qui va suivre nous présentons une méthode de calcul numérique de ces courbures, intrinsèque et celle due à la paramétrisation.

2.2.3 Calcul numérique des Courbures

Le calcul numérique des courbures, peut être simplifié en effectuant des transformations linéaires dans l'espace des paramètres. Les détails de ces transformations sont exposés dans [?]. Une factorisation de la matrice : $\mathcal{J}(\theta)$, en un produit QR est utilisée. Q est une matrice orthogonale et R est triangulaire supérieure (voir annexe B pour la factorisation QR). $\mathcal{J}(\theta)$ s'écrira :

$$\mathcal{J}(\theta) = QR = Q\left(\frac{\tilde{R}}{0}\right)$$

où :

Q est la matrice orthogonale $n \times n$ et \tilde{R} est la matrice triangulaire supérieure $p \times p$. Une transformation des paramètres de θ est effectuée, les nouveaux paramètres seront : $\Phi = \tilde{R}(\theta - \tilde{\theta})$.

La matrice des dérivées secondes correspondantes à ces nouveaux paramètres est :

$$H_{..} = [Q^T][L^T H L] \quad \text{où} : L = \tilde{R}^{-1}$$

$[\quad] [\quad]$ représente la multiplication suivant l'indice i de la matrice à trois dimensions $(L^T H L)_{iab}$ où : $1 \leq i \leq n$, et $1 \leq a, b \leq p$ (c'est la seule multiplication qui soit possible).

La courbure “intrinsèque” et celle “due à la paramétrisation” suivant la direction h sont données par :

$$K_h^N = \left| |h^T H_{..}^N h| \right|$$

et

$$K_h^T = \left| |h^T H_{..}^T h| \right|$$

où :

$$H_{..}^N = ((H_{..}^N)_{iab}) \begin{pmatrix} p+1 & \leq & i & \leq & n \\ 1 & \leq & a,b & \leq & p \end{pmatrix}$$

et :

$$H_{..}^T = ((H_{..}^T)_{iab}) \begin{pmatrix} 1 & \leq & i & \leq & p \\ 1 & \leq & a,b & \leq & n \end{pmatrix}$$

Les valeurs de ces deux courbures sont obtenues en prenant la moyenne de K_h^T et de K_h^N , sur toutes les directions h de R^p , l'espace contenant les paramètres. La variation de la direction h peut se faire pour l'algorithme de Bates et Watts [?].

Pour la courbure intrinsèque :

1. Choisir une direction initiale $h_{(k)}$.

$h_{(k)}$ est choisi unitaire.

2. Calculer la quantité :

$$g_{(k)} = 4 \left[h_{(k)}^T H_{..}^N h_{(k)} \right] \left[H_{..}^N h_{(k)} \right]$$

qui est une dérivation par rapport au vecteur $h_{(k)}$. On normalise $g_{(k)}$:

$$\tilde{g}_{(k)} = \frac{g_{(k)}}{|g_{(k)}|}$$

3. Si le produit scalaire $\tilde{g}_{(k)} \cdot h_{(k)}$ est un inférieur à $(1 - \epsilon)$, ϵ étant un seuil qu'on se fixe au départ (on prend $\epsilon = 0.0001$). On passe à l'étape suivante en posant :

$$h_{(k+1)} = \tilde{g}_{(k)}$$

Et on repart de (2). Sinon la courbure intrinsèque sera :

$$K^N = \left| \left| h_{(k)}^T H^N h_{(k)} \right| \right|$$

Le calcul de la courbure due à la paramétrisation se fait de la même manière, en mettant H^T à la place de H^N .

Dans la partie pratique de notre travail, nous avons écrit un programme informatique pour le calcul de ces quantités.

A titre d'exemple pour le modèle :

$$y = \theta_1 \exp(-\theta_2 x) + (M - \theta_1) \exp(-\theta_3 x)$$

où M est une constante égale à : 10.

Le plan d'expérience est donné par :

$$X = (0, 2, 4, 6, 14, 20, 26, 30, 40)^T$$

Les valeurs observées sont données par le vecteur :

$$Y = (9.94, 9.19, 8.44, 6.73, 4.74, 3.35, 2.18, 1.25, 0.59)^T$$

L'estimation obtenue du vecteur :

$$\theta = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)^T$$

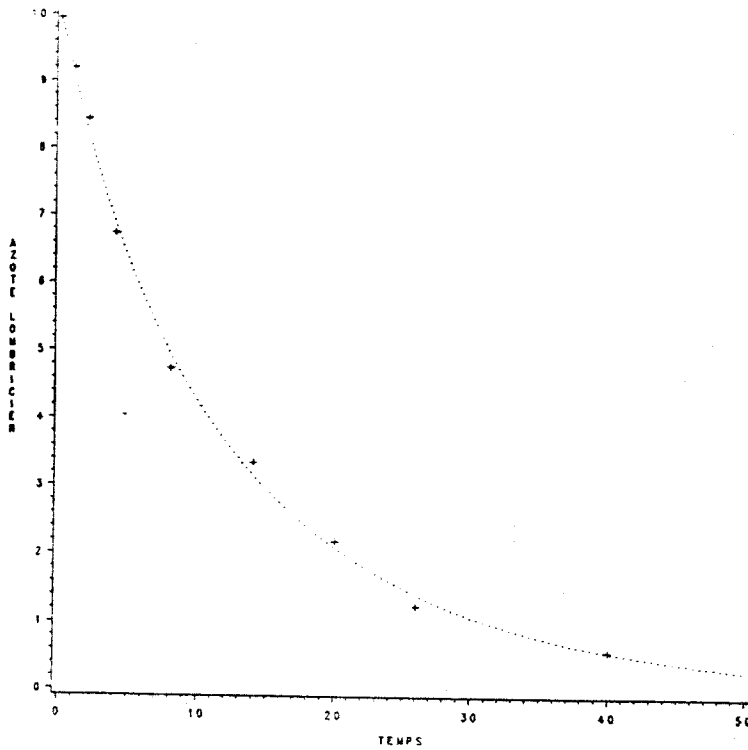
est :

$$(2.83, 0.18, 0.06)^T$$

La somme des carrés des écarts est :

$$s^2 = 0.206$$

La figure 3.2 représente le modèle y avec les données.



Les valeurs des courbures obtenues sont :

$$K^N = 90.397$$

pour la courbure normale, et

$$K^T = 3.6427$$

pour la courbure tangentielle.

Pour avoir une idée sur la qualité de la paramétrisation, nous comparons l'inverse de K^T avec le rayon de la région de confiance, défini dans (4.4.3) de ce chapitre. Numériquement :

$$\frac{1}{K^T} = 0.274$$

et

$$r = 1.115$$

Dans l'annexe C nous trouverons les programmes informatiques qui ont conduit à ces résultats.

Chapitre 3

Plan d'expérience et choix entre modèles

Introduction

Nous allons examiner dans ce chapitre deux questions qui se posent dans tout travail de modélisation.

Nous avons choisi de les regrouper dans un même chapitre car elles apparaissent toutes les deux dès que le travail de l'estimation des paramètres et des régions de confiance est achevée.

Il s'agit alors d'envisager un retour à l'expérience - première question, et de choisir entre plusieurs modèles possibles et en "compétition" pour expliciter le phénomène étudié - deuxième question.

3.1 Conception d'un plan d'expérience

Du fait que toute l'estimation se fait à partir des données expérimentales, la conception d'un plan d'expérience nous paraît un sujet d'une importance majeure.

Le critère de loin le plus fréquemment utilisé pour la conception de plans d'expériences est ce qu'on appelle le critère de la "D-optimalité", qui pour un modèle non linéaire quelconque, consiste à minimiser le volume de l'ellipsoïde de confiance.

Ce critère se trouve résumé dans le théorème suivant (J.P. VILA 1982) :

Théorème :

Pour minimiser le volume de l'ellipsoïde de confiance, défini par

$$\mathcal{J}_{L_\theta} = \{(\theta - \hat{\theta})^T \mathcal{J}^T(\hat{\theta}) \mathcal{J}(\hat{\theta})(\theta - \hat{\theta}) \leq c^2\}$$

où c^2 est une constante, il suffit de maximiser le déterminant de

$$\mathcal{J}^T(\hat{\theta}) \mathcal{J}(\hat{\theta})$$

Eléments de la démonstration :

Les ellipsoïdes de confiances sont déterminés par :

$$(\theta - \hat{\theta})^T \mathcal{J}^T(\hat{\theta}) \mathcal{J}(\hat{\theta})(\theta - \hat{\theta}) = c^2$$

où C est une constante.

Le volume de cet ellipsoïde est donné par :

$$Vol = \pi^{\frac{p}{2}} c (\lambda_1 \cdots \lambda_p)^{\frac{1}{2}} \left(\Gamma\left(\frac{p}{2} + 1\right) \right)^{-1}$$

où :

- p est le nombre de paramètres.
- $\lambda_1 \cdots \lambda_p$ sont les valeurs propres de la matrice $(\mathcal{J}^T(\hat{\theta}) \mathcal{J}(\hat{\theta}))^{-1}$.

- $\Gamma(\cdot)$ est la fonction gamma.

p et c étant constants, minimiser le volume revient à minimiser le produit $\lambda_1 \cdots \lambda_p$ qui est la valeur du déterminant de $(\mathcal{J}^T(\hat{\theta})\mathcal{J}(\hat{\theta}))^{-1}$, donc cela revient à maximiser le déterminant de $\mathcal{J}^T(\hat{\theta})\mathcal{J}(\hat{\theta})$.

Remarques

1. Le critère du théorème précédent est basé sur une approximation asymptotique de la matrice de covariance des paramètres

$$\hat{\Sigma} = \sigma^2 (\mathcal{J}^T(\hat{\theta})\mathcal{J}(\hat{\theta}))^{-1}$$

Il consiste à rendre minimum cette matrice.

2. L'estimation du nouveau plan d'expérience dépend de la valeur a priori du paramètre $\hat{\theta}$, qu'on cherche précisément à réestimer. Il apparaît donc que la qualité de notre futur plan d'expérience sera dépendante de nos méthodes d'estimation statistiques et numériques, et de la taille de l'échantillon initial.
3. Dans le cas où la matrice de covariance des paramètres est différente de la matrice diagonale $\sigma^2 I$, le critère de "D-optimalité" sera légèrement modifié : on maximisera le déterminant de

$$(\mathcal{J}^T(\hat{\theta})(\sigma_1^2 \cdots \sigma_n^2)\mathcal{J}(\hat{\theta}))$$

où σ_i^2 est la variance du résidu de la i ème observation.

3.1.1 Cas des plans d'expérience favorisant une partie des paramètres à estimer

Il arrive que l'on soit intéressé par une partie seulement de l'ensemble des paramètres. On souhaite alors élaborer un plan d'expérience qui va favoriser l'es-

timation de cette partie de paramètres.

Soit θ le paramètre global à estimer, θ peut s'écrire :

$$\theta^T = [\theta_q^T \theta_r^T]$$

où θ_q est formé des q premières valeurs et θ_r est formé des r dernières valeurs (on suppose que $r + q = p$).

Le critère qui maximisera l'estimation de θ_q plus que celle de θ_r est l'objet du théorème suivant :

Théorème :

Le plan d'expérience qui favorise l'estimation du paramètre θ_q est celui qui maximise la quantité :

$$\Delta_q = \frac{\det(\mathcal{J}^T(\hat{\theta})\mathcal{J}(\hat{\theta}))}{\{\det(\mathcal{J}_p^T(\hat{\theta})\mathcal{J}_p(\hat{\theta}))\}}$$

où $\mathcal{J}_p(\hat{\theta})$ est la matrice des dérivées première définie comme $\mathcal{J}(\hat{\theta})$ mais par rapport à θ_p .

Le principe de la démonstration est le même que pour le précédent théorème, pour les détails voir [11], page 477.

3.2 Utilisation de l'information d'Akaike pour le choix entre modèles

3.2.1 Introduction

Il arrive que plusieurs modèles mathématiques soient proposés pour décrire le même phénomène physique ou biologique. Ils sont tous valables mais le meilleur reste à déterminer.

Nous avons été confronté à un tel choix dans la partie pratique de ce travail : pour décrire un système écologique nous avons proposé deux modèles, il a fallu choisir et toute la conception du système écologique dépend de ce choix.

Divers auteurs se sont intéressés à cette question. Les travaux de NEYMAN-PEARSON, entre 1928 et 1933, ceux de Wald [73], et d'autres, ont conduit à un critère à base de rapport de vraisemblance. Ce critère est souvent utilisé, mais son inconvénient principal est de ne tenir compte que de la proximité du modèle aux données, sans se soucier de la complexité due à la paramétrisation.

En rendant complexe un modèle, on arrive à mieux "coller aux données" mais notre modèle n'aura pas forcément une interprétation biologique ou physique.

Saisissant l'handicap dont souffre le critère du rapport de vraisemblance, [1] a donné un critère (A.I.C.) qui tient compte à la fois de la proximité du modèle aux données et de la complexité due à la paramétrisation.

Dans cette partie, nous faisons un rappel de critère du rapport de vraisemblance (Rpv) et ensuite nous présentons d'une manière générale, le critère d'Akaike (A.I.C.).

3.2.2 Rappel du critère du rapport de vraisemblance

On dispose de deux modèles

$$y^{(l)} = f^{(l)}(x, \theta^{(l)}) \quad l = 1, 2$$

Choisir entre les deux modèles, consiste à décider entre les deux hypothèses :

H_1 : Le modèle (1) est correct.

H_2 : Le modèle (2) est correct.

Le critère (Rpv) est fondé sur l'idée suivante :

on préférera le modèle (l) au modèle (l') si la vraisemblance atteinte au modèle (l) est supérieure à celle atteinte au modèle (l'); $l, l' \in 1, 2$.

La mise en oeuvre pratique de ce critère consiste à choisir deux réels r_1 et r_2 satisfaisant les inégalités :

$$0 < r_2 < 1 < r_1$$

et à faire le procédé suivant :

1. si $\frac{L^{(1)}}{L^{(2)}} \leq r_2$ choisir H_2 .
2. si $\frac{L^{(1)}}{L^{(2)}} \geq r_1$ choisir H_1 .
3. si $r_2 \leq \frac{L^{(1)}}{L^{(2)}} \leq r_1$, on ne peut pas décider, retourner à l'expérience.

Théoriquement, r_1 et r_2 dépendent de la taille de l'échantillon observé, mais asymptotiquement, elles sont constantes. Si α est la probabilité d'accepter H_1 alors que H_2 est vraie, et β la probabilité d'accepter H_2 alors que H_1 est vraie, [73] a montré qu'on peut prendre r_1 et r_2 de la manière suivante :

$$r_1 \simeq \frac{(1 - \beta)}{\alpha} \qquad r_2 \simeq \frac{(1 - \alpha)}{\beta}$$

Un exemple : le cas normal

Dans le cas normal, les vraisemblances sont données pour $l = 1, 2$, par :

$$L^{(l)} = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} (\sigma^{(l)})^{(-n)} \exp\left(\frac{-1}{2(\sigma^{(l)})^{(-n)}} \sum_{k=1}^n (y_k - f^{(l)}(x_k, \theta^{(l)}))^2\right)$$

lorsque $L^{(l)}$ est maximum, $(\sigma^{(l)})^{(-n)}$ est égale à :

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (y_k - f^{(l)}(x_k, \theta^{(l)}))^2$$

et la valeur maximale de $L^{(l)}$ est :

$$L^{(l)} = (2\pi)^{\frac{-n}{2}} (\sigma^{(l)})^{-n} \exp\left(\frac{-n}{2}\right)$$

Le rapport $\frac{L^{(1)}}{L^{(2)}}$ sera égal à :

$$\frac{L^{(1)}}{L^{(2)}} = \left(\frac{\sigma^{(2)}}{\sigma^{(1)}}\right)^n = \left(\frac{\sum_{k=1}^n (y_k - f^{(2)}(x_k, \theta^{(2)}))^2}{\sum_{k=1}^n (y_k - f^{(1)}(x_k, \theta^{(1)}))^2}\right)^{\frac{n}{2}}$$

Ce rapport n'est donc que le rapport des écarts entre les valeurs observées et estimées des deux modèles.

Il exprime la qualité de la proximité aux données observées des deux modèles.

3.2.3 Présentation générale du critère d'Akaike : A.I.C.

On suppose qu'il existe un modèle théorique $g(x, \theta^*)$ qui soit le "meilleur" pour décrire le phénomène étudié, où θ^* est le paramètre relatif à ce modèle.

Nous définissons l'écart de notre modèle $f(x, \theta)$ au modèle théorique $g(x, \theta^*)$ par l'information de KULLBACK (KULLBACK et LEIBLER, 1951; KULLBACK, 1959) définie par :

$$I(\theta, \theta^*) = \int \log \left(\frac{p_g(x, \theta^*)}{p_f(x, \theta)} \right) p_f(x, \theta) dx$$

où :

- p_g est la densité de probabilité relative au modèle g .
- p_f est la densité de probabilité relative au modèle f .

La quantité $I(\theta, \theta^*)$ peut être considérée comme la fonction de perte, résultant du choix du modèle $f(x, \theta)$.

Propriétés de $I(\theta, \theta^*)$

1. $I(\theta, \theta^*) = 0$ si et seulement si $p_f(x, \theta) = p_g(x, \theta^*)$.
2. Si $p_f(x, \theta) \neq p_g(x, \theta^*)$ alors $I(\theta, \theta^*)$ est strictement positif.
3. Si X_1, \dots, X_n sont des variables indépendantes et identiquement distribuées, si on note $I_n(\theta, \theta^*)$ l'information de KULLBACK relative à l'ensemble de l'échantillon, alors : $I_n(\theta, \theta^*) = nI(\theta, \theta^*)$

Ces propriétés se démontrent assez facilement :

(1) et (2) résultant directement de la définition et (3) de l'indépendance des variables X_1, \dots, X_n et de la propriété de l'additivité de la fonction logarithme népérien.

Le meilleur modèle $f(x, \theta)$ est celui qui minimise le risque moyen défini par :

$$\mathcal{R}(\theta, \theta^*) = E(I(\theta, \theta^*)) = \int I(\theta, \theta^*) p_g(x, \theta^*) dx$$

Cette idée découle du principe de minimisation de la négentropie énoncé par Boltzman.

Vu que l'on ne connaît pas p_g ni θ^* , il est impossible d'estimer directement $\mathcal{R}(\theta, \theta^*)$. AKAIKE en 1973 a démontré que $\mathcal{R}(\theta, \theta^*)$ est proportionnel à la quantité :

$$A.I.C = -2 \text{Log } L(\hat{\theta}) + 2p$$

où $L(\hat{\theta})$ est la vraisemblance atteinte en $\hat{\theta}$, et p est le nombre de paramètres dans le modèle $f(x, \hat{\theta})$.

A.I.C. se présente comme la somme de deux termes : le premier exprime la qualité de la proximité du modèle aux données observées, le deuxième terme est

fonction du nombre de paramètres dans le modèle et permet de tenir compte d'une surparamétrisation. C'est donc un critère qui fait le compromis entre la proximité aux données et la surparamétrisation. Le modèle qui sera choisi est celui qui rendra minimum A.I.C.

Conclusion de la partie théorique

L'estimation des paramètres et des régions de confiance dans le cas de la régression non linéaire, se fait dans "un espace" possédant une structure géométrique propre. Il est frappant de constater que la statistique a jusqu'à présent accordé si peu d'attention à ce fait élémentaire.

La "géométrie différentielle" apparaît comme un cadre adéquat permettant une analyse spatiale. C'est elle aussi qui permet de mieux rendre compte du caractère essentiel de la régression non linéaire : la non linéarité.

Nous avons vu dans cette partie que la non linéarité dépend du plan d'expérience, on peut alors soulever le problème suivant qui pourra dans un cadre de "géométrie différentielle" être l'objet d'investigations futures : comment modifier le plan d'expérience de telle sorte que la non linéarité soit aussi réduite que possible.

PARTIE PRATIQUE

**Formalisation mathématique
de problèmes écologiques.
Résultats et interprétation.**

Introduction

Les problèmes spécifiques à la régression non linéaire traités dans la partie précédente sont rencontrés dans de nombreux cas et d'une manière générale chaque fois qu'il s'agit de décrire un phénomène lié à un ou plusieurs autres par une relation non linéaire.

Nous aurons affaire dans cette partie à la description et à l'étude d'un phénomène écologique.

Les données qui nous ont été présentées pour modéliser ont été mises dans des unités physiques et biophysiques (compartiments) dépendant les unes des autres. Compte-tenu de cette interdépendance, il nous apparaît objectif de traiter le problème dans sa globalité, et de considérer l'ensemble des compartiments en présence comme un système.

Dans cette partie, nous ferons, en premier lieu, une présentation générale des systèmes linéaires auxquels notre cas concret se rapporte, nous poserons ensuite les résultats des deux structures écologiques que nous avons modélisées. La première est définie par le transit d'azote entre trois unités écologiques : le ver de terre, le sol et la plante. La deuxième est définie par le transit du carbone entre la litière végétale, le lombric et le sol, et l'atmosphère. Les procédés de traitements pour chaque structure "azote" seront exposés dans le détail.

Chapitre 4

Généralités sur les systèmes à compartiments linéaires

4.1 Définition d'un système à compartiments

Un système à compartiments est un ensemble fini de sous-systèmes, appelés compartiments, échangeant une substance entre eux, et éventuellement avec le milieu extérieur. La qualité de matière dans chaque compartiment peut être décrite par une équation différentielle.

La forme d'équation, la plus générale pour un système à m compartiments est :

$$(4.1) \quad \frac{dy_i}{dt} = f_{i0} + \sum_{j=1}^m f_{ij} - \sum_{j=1}^m f_{ji} - f_{oi}$$

où y_i désigne la quantité de matière dans le i ème compartiment, f_{ij} le coefficient de transfert vers le compartiment i , à partir du compartiment j . L'indice O indique le milieu extérieur et f_{i0} symbolise l'action du milieu extérieur sur le compartiment i . f_{i0} est appelée variable de contrôle et y_i variable d'état.

Le schéma correspondant à l'équation (4.1). est présenté à la figure (4.1).

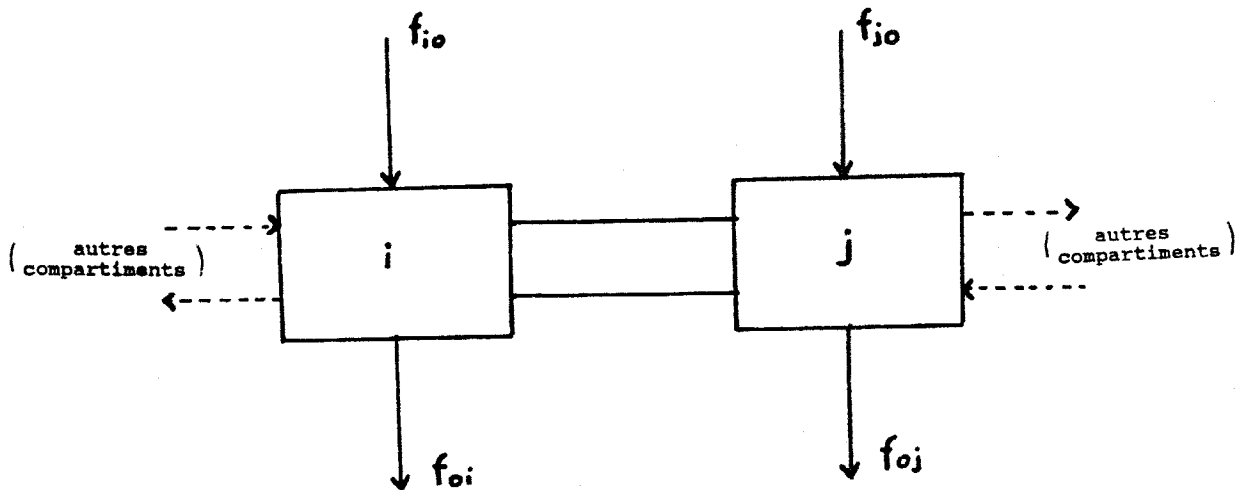


Figure (4.1) : Schéma général d'un système à compartiment

L'intérêt de l'analyse des systèmes à compartiments est de représenter les échanges, en général de matière, entre les différentes parties d'un système naturel ou physique, par décomposition en un certain nombre de sous-systèmes supposés homogènes (les compartiments).

Comme exemple, on peut citer:

- Une population animale sera le système et les compartiments seront les espèces.
- Le corps humain, ou une partie du corps humain, sera le système et les compartiments seront des organes.
- ...

Il est important de remarquer que la décomposition d'un système en compartiments est, dans certaines situations, interprétable en termes de structure, et peut

ne pas avoir de rapport direct avec la réalité physique ou biophysique du système étudié. Les systèmes de diffusion chimique en sont un bon exemple : les substances qui sont les compartiments, coexistent dans une même unité physique, souvent on ne peut les séparer, mais on les distingue les unes des autres.

4.2 Système à compartiments linéaires

La plus grande partie de la théorie des systèmes à compartiments concerne les systèmes linéaires. Ceux-ci sont caractérisés par le principe que la vitesse de transfert entre deux compartiments quelconques est proportionnelle à l'effectif du compartiment d'origine.

L'équation (4.1) devient dans ce cas :

$$\frac{dy_i}{dt} = \sum_{i=1, j=1}^m k_{ij} y_j - \sum_{i=1, j=1}^m k_{ji} y_i - k_{0i} y_i + k_{i0} y_i$$

avec $i = 1, 2, \dots, m$.

On note que les compartiments sont parfois inaccessibles. Dans d'autres cas, ils ne sont pas directement mesurables, c'est-à-dire que les valeurs observées sont des transformations (généralement linéaires) des effectifs des compartiments mesurés.

Ainsi, dans le cas des systèmes chimiques, on observe la concentration plutôt que l'effectif du compartiment, les deux quantités sont liées par la relation : $c_i = \frac{y_i}{V_i}$, y_i étant l'effectif du compartiment et v_i son volume. On distingue plusieurs types de systèmes :

1. les systèmes caténaux (figure (4.4)), les structures de transfert rentrent souvent dans cette catégorie,
2. les systèmes bouclés (figure. (4.2)) : on s'en sert dans l'analyse des phénomènes cycliques,

3. les systèmes mamillaires (figure. (4.3)).

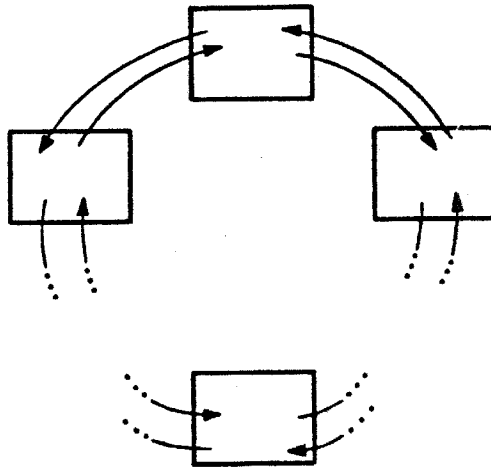


Figure (4.2) : Schéma général d'un système à compartiments cycliques

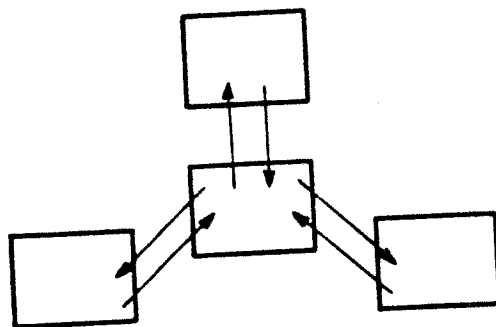


Figure (4.3) : Schéma d'un système à compartiments mamillaires.

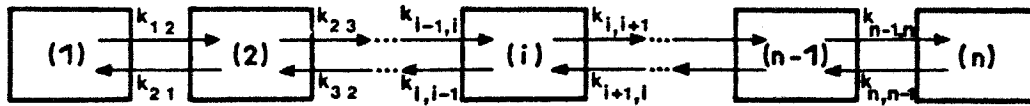


Figure (4.4) : Exemple de système à compartiments caténaire.

4.3 Contrôlabilité et Observabilité

Ce sont des notions utiles dans l'élaboration de plans d'expériences. En effet, il est important de savoir sur quels compartiments exercer une action et dans quels compartiments effectuer les observations. Ces notions sont issues de l'automatisme, on peut trouver deux formalisations mathématiques dans KALMAN et al. (1963). Nous faisons ici une présentation intuitive de ces notions.

Définitions

1. Un système est dit *contrôlable* si une action sur les variables de contrôle, permet de modifier dans un sens qui peut être déterminé à l'avance l'une quelconque des variables d'état du système. La figure (4.5) présente un exemple de système qui n'est pas contrôlable. En effet quelle que soit l'action sur le troisième compartiment, on ne peut pas modifier le contenu du premier.
2. Un système est dit *observable* si l'on peut déduire les états du système au temps t à partir de la connaissance des entrées et des variables observées sur

un intervalle de temps précédent t . L'identification du système correspond à la connaissance de toutes ses variables d'état. La figure 4.6. illustre un cas de système non observable : la connaissance de y_1 seul ne nous donne aucune information sur y_2 ou sur y_3 .

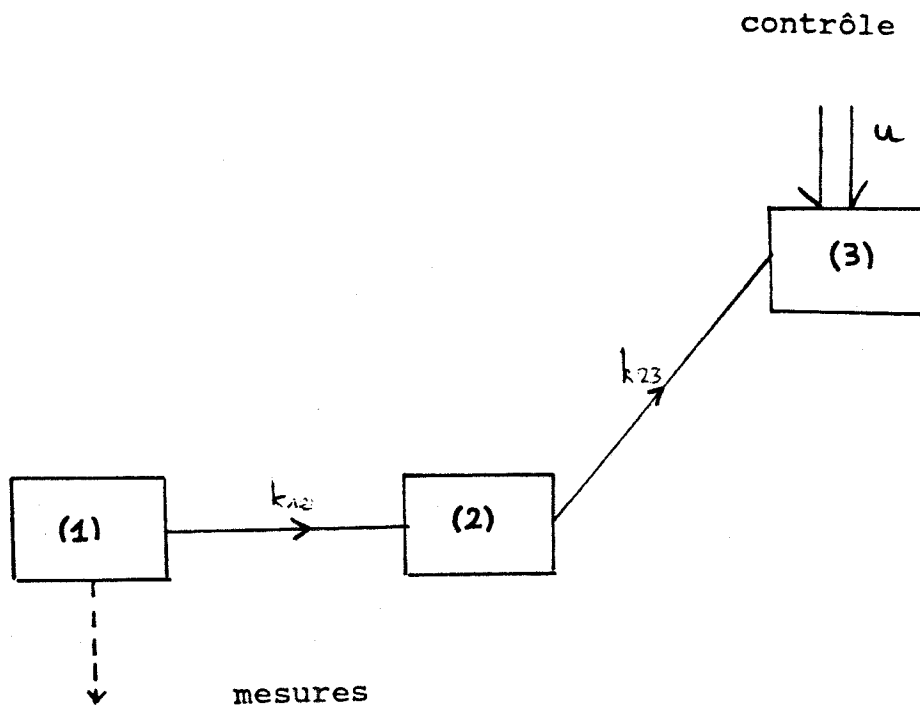


Figure (4.5) : Système à compartiments non complètement contrôlable en agissant sur le compartiment 3, on ne peut pas modifier l'effectif du compartiment 1 (ni de 2!).

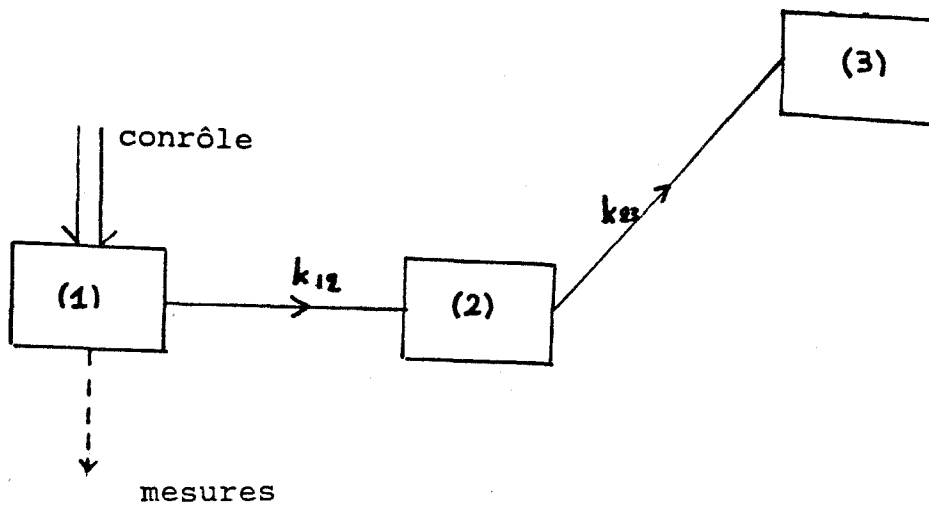


Figure (4.6). : Système non (complètement) observable, en agissant sur le premier compartiment, on ne peut pas prévoir exactement les valeurs des effectifs dans les compartiments 2 et 3.

Chapitre 5

Etude de deux structures écologiques

Introduction

La motivation principale de ce travail de modélisation est la contribution à l'étude du Rôle Ecologique et Agronomique des Lombriciens. Une conceptualisation de ce rôle est donné par la figure (0.1).

L'action des vers de terre dans l'écosystème comporte plusieurs aspects, nous nous sommes intéressés aux transferts de l'azote entre le lombricien et d'autres compartiments représentant leur environnement écologique.

Cet intérêt est une conséquence de la prise de conscience du rôle qu'ils jouent dans la nature : rôle agronomique par le labour biologique qu'ils effectuent et la fertilité naturelle qu'ils apportent aux sols; rôle technologique par leur impact sur l'environnement (traitement des déchets des villes, ...). De plus leur activité métabolique (biomasse de 1 à 3 tonnes pvh par ha) rend impossible d'ignorer le facteur lombricien des bilans écologiques, techniques et économiques [13].

5.1 Génération des modèles de transferts

Le choix d'un modèle est toujours une opération hasardeuse : il n'y a pas de méthode absolue qui permette de connaître le "vrai" modèle. C'est un problème qui se situe en dehors de la logique mathématique, elle relève plus du domaine de l'intuition de l'expérimentateur et le mathématicien n'intervient que pour la formalisation des choix et des hypothèses de celui-ci.

La présentation formelle que nous allons faire dans ce paragraphe se fonde essentiellement sur les notions de la cinétique chimique. Elle nous amènera à considérer notre système comme un cas des systèmes linéaires que nous avons abordés dans le chapitre 5.

Nous appelons "relation" ou "réaction" tout "transfert" existant entre deux compartiments quelconques du système. Nous utiliserons suivant les situations l'un de ces trois termes.

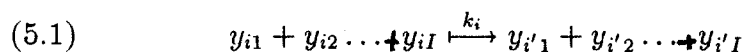
5.1.1 Notation

y_i est l'effectif du i ème compartiment, i varie de 1 à m , où m est le nombre de compartiments dans le système

Plaçons nous dans un cas plus général où il y a présence de plusieurs substances dans chaque compartiment, nous notons

$$\{y_{i1}, \dots, y_{iI}\}$$

l'ensemble de ces substances. Notons R l'ensemble des relations possibles entre les compartiments du système, elles sont du type



$i(i')$ symbolise pour chaque relation (ou transfert) possible le compartiment initial (destination). $I(I')$ est le nombre de substances existant dans ce i ème (i' ème)

compartiment. i et i' varient entre 1 et m , m étant le nombre de compartiments du système étudié.

k_i est une constante caractérisant le transfert entre les compartiments i et i' , elle est introduite par la loi de Van't HOFF (voir paragraphe suivant).

A la relation (5.1) nous associons par analogie avec les transferts chimiques, l'image suivante :

les substances

$$y_{i1}, \dots, y_{iI}$$

interagissent entre elles, pour donner

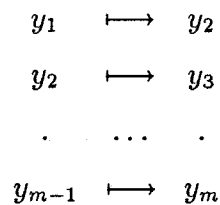
$$y_{i'1} + y_{i'2} \dots, y_{i'I}$$

Il est implicitement admis dans l'écriture (5.1) qu'il peut y avoir certaines substances qui ne participent pas à la réaction (transfert). Autrement dit, il peut exister j et j' avec $1 \leq j \leq I$ et $1 \leq j' \leq I'$ tel que :

$$y_{ij} = y_{i'j'}$$

Ces substances inactives pour le transfert entre les compartiments i et i' s'appellent "catalyseurs".

Pour illustrer la relation (5.2) prenant le cas d'un système caténaire (figure (4.2), chapitre 4), la représentation fonctionnelle relative à ce cas est :



R est alors donné par

$$\mathcal{R} = \{y_i \longmapsto y_{i+1}/i = 1, \dots, m-1\}$$

5.1.2 Hypothèse fondamentale

La méthode de construction de nos modèles de transferts se base sur la "loi de l'action des masses" appelée aussi loi de Van't HOFF [59] utilisée en chimie. Le but de nos modèles est de décrire la variation des effectifs de chaque compartiment et leur génération se fait selon les règles de la cinétique chimique.

D'après la loi de Van't HOFF, la vitesse du transfert (relation 5.1.) entre les compartiments i et i' est proportionnelle à l'effectif du compartiment i :

$$V_i = k_i y_{i1} \times y_{i2} \times \dots \times y_{iI}$$

V_i représente la valeur de la variation de l'effectif de l'ensemble des substances présentes dans le compartiment i , pendant une durée élémentaire dt . k_i est une constante positive qui dépend de certains phénomènes extérieurs, comme la température par exemple.

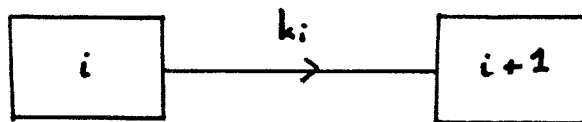
Si on se restreint à une seule substance y_i ,

$$y_i \in \{y_{i1}, \dots, y_{iI}\}$$

la vitesse du transfert d'après la règle de Van't HOFF est

$$V_i = k_i y_i$$

Entre deux compartiments i et $i + 1$ (figure (5.1))



Figure(5.1)

La variation de l'effectif du compartiment i est donnée par :

$$\frac{dy_i}{dt} = -V_i = -k_i y_i$$

et comme l'effectif global est constant, la variation de celui du compartiment $(i + 1)$

$$\frac{dy_i}{dt} = +V_i = +k_i y_i$$

Dans le cas où le compartiment i est à la fois un compartiment initial et compartiment destination (figure (5.2))

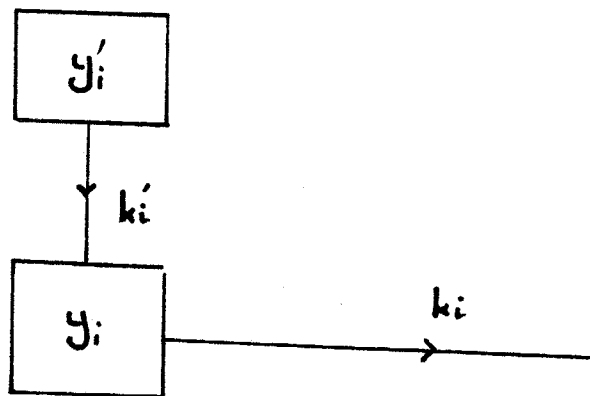


Figure (5.2)

La variation de son effectif est donnée par :

$$\frac{dy_i}{dt} = +k_i y'_i - k_i y_i$$

Cette dernière formule se généralise sans difficulté au cas où le compartiment i est à la fois compartiment destination et compartiment initial, pour plusieurs transferts.

L'effectif sera alors :

$$\frac{dy_i}{dt} = \sum_{i'=1}^{i_1} k_{i'} y_{i'} - \left(\sum_{i=1}^{i_2} k_i \right) y_i$$

i_1 peut être défini par ce nombre de flèches partant du compartiment i , i_2 peut être défini par ce nombre de flèches arrivant au compartiment i .

Remarques

1. Comme nous l'avons déjà souligné la loi de Van't HOFF n'est pas le résultat d'un raisonnement mathématique c'est plutôt l'expression de considérations expérimentales.
2. A une échelle microscopique, la loi de Van't HOFF peut s'exprimer autrement: entre deux instants successifs t et $t + \Delta t$, la probabilité de transition d'un élément du compartiment i est proportionnelle à un infiniment petit près à l'intervalle de temps Δt .

Preuve

Notons p cette probabilité

$$p = \alpha \Delta t + o(\Delta t)$$

où α est la constante de proportionnalité et o est tel que :

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{o(\Delta t)}{\Delta t} = 0$$

Le nombre moyen de transitions pendant l'intervalle de temps Δt est le produit:

$$y_i(t)p$$

qui est égal à :

$$\alpha y_i(t)\Delta t + y_i(t)o(\Delta t)$$

Or ce nombre est exactement égal à :

$$y_i(t) - y_i(t + \Delta t)$$

On en déduit alors :

$$y_i(t + \Delta t) - y_i(t) = -\alpha y_i(t)\Delta t + y_i(t)o(\Delta t)$$

qui est équivalent à :

$$\frac{y_i(t + \Delta t) - y_i(t)}{\Delta t} = -\alpha y_i + y_i \frac{o(\Delta t)}{\Delta t}$$

et en faisant tendre Δ vers 0 on a:

$$\frac{dy_i(t)}{dt} = -\alpha y_i(t) \quad (k_i = \alpha)$$

5.2 Structure "Azote" dans le modèle REAL

Introduction

L'azote est un élément essentiel de la nutrition végétale. L'apport d'engrais industriels dans le sol pour maximiser les rendements des cultures est une preuve de son importance.

Le ver de terre, consommateur de litière végétale, débite de l'azote dans le réservoir sol dans lequel la plante va ensuite puiser cet élément.

L'étude et la description de ce transit de l'azote entre le lombric, le sol et la plante présente un intérêt agronomique, mais aussi scientifique et écologique. Nous nous sommes attachés à décrire ce transfert par un modèle mathématique qui tiendra compte de la globalité du phénomène. Nous avons ensuite caractérisé quantitativement ce processus en calculant la vitesse du transfert de l'azote du ver de terre vers le sol, et le temps moyen de séjour de l'azote dans le lombric.

5.2.1 Données expérimentales

L'expérimentation a été conduite in situ. Elle consistait à suivre le transfert d'un marqueur d'azote (Azote 15) initialement incorporé au lombric, dans le sol puis dans la plante.

Nous n'avons pas pris en compte le passage de l'azote de la plante au lombric car il nécessite un délai assez long non envisageable expérimentalement.

Nous avons donc identifié un système caténaire composé de trois compartiments :

- le compartiment L : c'est le lombricien où s'effectue l'incorporation du marqueur,
- le compartiment S : c'est le sol, il est intermédiaire entre le lombric et la plante,

- le compartiment P : c'est la plante, destination finale de l'azote.

Les observations ont été effectuées seulement dans les compartiments L (vers de terre) et P (plante), il y a eu impossibilité technique d'observation dans le compartiment sol.

Le résumé de la conception du système de son contrôle (marquage) et son observation se trouve dans la figure (5.3.)

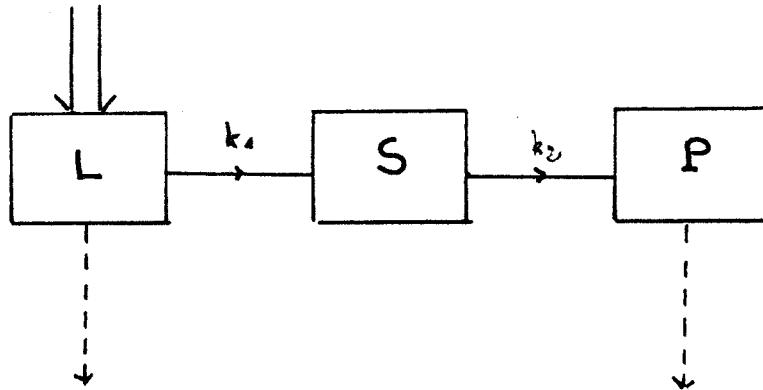


Figure (5.3) : Le système à compartiments Lombric, Sol, Plante.

Il y a eu acquisition de 9 données dans le compartiment Lombric, et 8 dans le compartiment Plante. Si on se réfère aux définitions données dans le chapitre 5, notre système est complètement contrôlable et complètement observable. Les données sont présentes dans le tableau T(1).

N° d'observation	Temps	Lombric	Plante
1	0	9.947	0
2	1	9.199	
3	2	8.440	0.992
4	4	6.737	1.377
5	8	4.742	2.821
6	14	3.355	3.610
7	20	2.189	5.776
8	26	1.250	7.129
9	40	0.592	8.931

T(1) : Tableau des données. On observe l'existence de 9 mesures dans le compartiment Lombric, et 8 dans le compartiment Plante.

5.2.2 Modèle mathématique

Nous appelons

- $y_1(t)$ = la quantité d'azote dans L à l'instant t .
- $y_2(t)$ = la quantité d'azote dans S à l'instant t .
- $y_3(t)$ = la quantité d'azote dans P à l'instant t .

Utilisons l'hypothèse fondamentale exposée dans la partie 5 de ce chapitre.

On peut générer les équations suivantes :

$$(S_1) = \begin{cases} \frac{dy_1(t)}{dt} = -k_1 y_1(t) \\ \frac{dy_2(t)}{dt} = +k_1 y_1(t) - k_2 y_2(t) \\ \frac{dy_3(t)}{dt} = +k_2 y_2(t) \end{cases}$$

Les conditions initiales sont :

- à $t = 0$.

$$\begin{cases} y_1(t) = M \\ y_2(t) = y_3(t) = 0 \end{cases}$$

(M est une constante donnée)

- à $t = \infty$.

$$\begin{cases} y_1(t) = 0 = y_2(t) \\ y_3(t) = M \end{cases}$$

La solution mathématique du système différentiel (S1) est aisée à obtenir :

$$\begin{cases} y_1(t) = M \exp(-k_1 t) \\ y_2(t) = \frac{-k_1 M}{k_1 - k_2} \exp(-k_1 t) + \frac{1}{k_2 - k_1} \exp(-k_2 t) \\ y_3(t) = \frac{k_2 M}{k_1 - k_2} (\exp(-k_1 t) - 1) + \frac{k_1 M}{k_1 - k_2} (\exp(-k_2 t) - 1) \end{cases}$$

Nous avons estimé les paramètres k_1, k_2 nous avons trouvé:

$$k_1 = 0.081$$

$$k_2 = 0.050$$

La somme des carrés des écarts pour ces estimations est :

- 0.478 pour le modèle y_1
- 1.492 pour le modèle y_3

Nous présentons dans le tableau (T.2) les valeurs estimées et les valeurs observées. dans les figures (5.4) et (5.5) les courbes estimées et les données.

Temps	y_1 (obsevé et estimé)		y_3 (observé et estimé)	
0	9.947	9.819	0	
1	9.199	9.054		
2	8.440	8.349	0.992	0.452
4	6.737	7.099	1.377	1.337
8	4.742	5.132	2.821	2.791
14	3.355	3.155	3.610	4.527
20	2.189	1.939	5.776	5.836
26	1.250	1.192	7.129	8.839
40	0.592	0.383	8.931	8.321

Tableau(2): Tableau des Valeurs observées et estimées relativement aux deux modèles y_1 et y_3

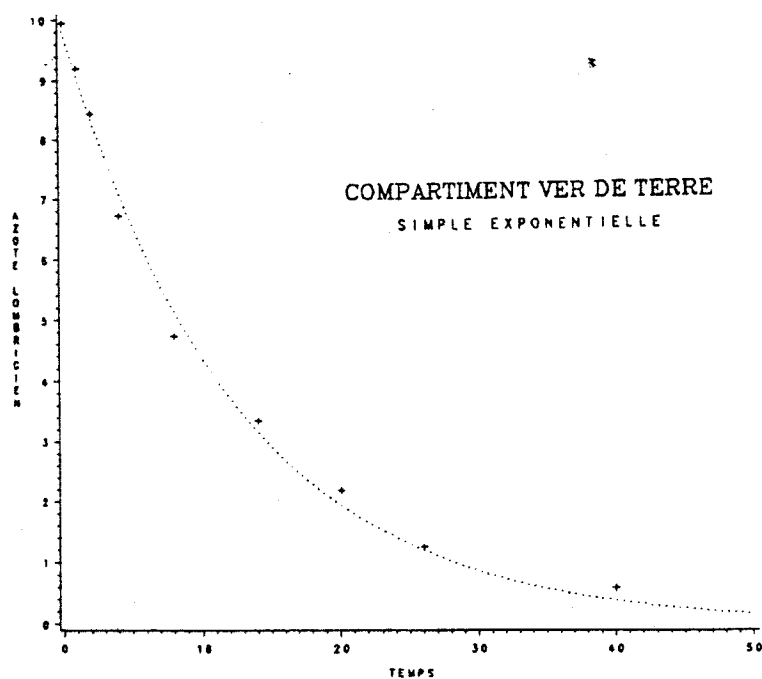
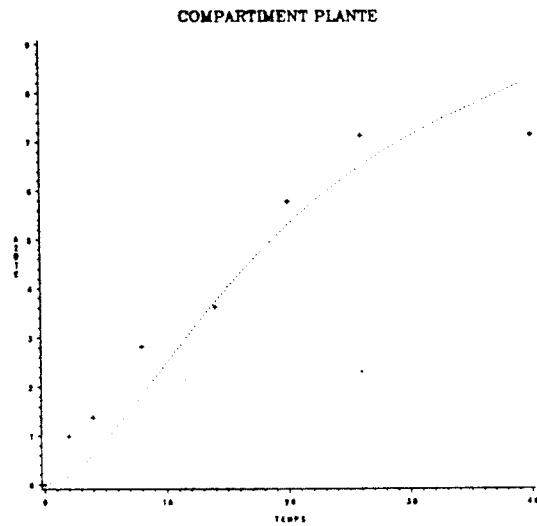
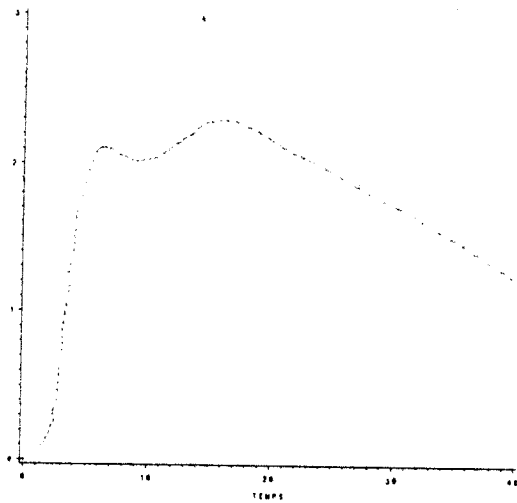


Figure (5.4) : Courbe représentative du modèle y_1 (Azote lombricien)



Figure(5.5) : Courbe représentative du modèle y_3 (Azote plante)



Figure(5.6) : Courbe représentative du modèle y_2 (Azote sol)

Nous avons observé que les modèles estimés sont systématiquement 'décalé' des données observées, surtout dans le compartiment plante comme le montre la figure (4). Comme nous avons choisi de traiter le transfert de l'azote dans sa globalité, nous avons été amené à réexaminer la nature des compartiments, en envisageant l'existence de sous-compartiments.

Notons immédiatement que nous avons effectué là une seconde hypothèse, celle-ci, cette fois, se situe au niveau de la conception de la structure du système.

La nouvelle compartimentation que nous avons envisagée est exposée dans la figure (5.7)

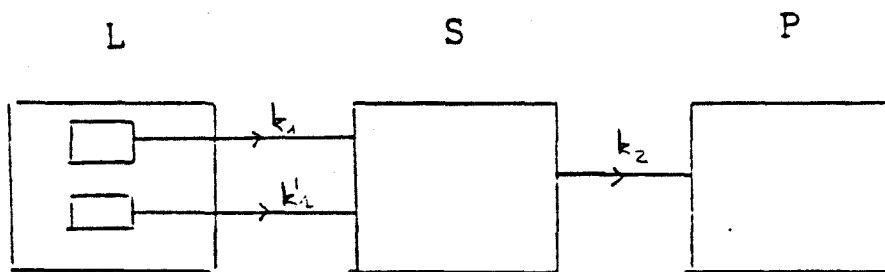


Figure (5.7) :

Le modèle mathématique, relatif à ce choix

$$(S'_1) = \begin{cases} \frac{dy_1(t)}{dt} = -k_1 y_1(t) \\ \frac{dy'_1(t)}{dt} = -k'_1 y'_1(t) \\ \frac{dy_2(t)}{dt} = +k'_1 y'_1(t) - k_2 y_2(t) \\ \frac{dy_3(t)}{dt} = +k_2 y_2(t) \end{cases}$$

On a observé les variables d'état :

$$\begin{cases} Y_1 = y_1 + y'_1 \\ Y_2 = y_2 \\ Y_3 = y_3 \end{cases}$$

Les conditions initiales sont :

- à $t = 0$.

$$\begin{cases} Y_1(t) = M \\ Y_2(t) = Y_3(t) = 0 \end{cases}$$

(M est une constante donnée)

- à $t = \infty$.

$$\begin{cases} Y_1(t) = 0 = Y_2(t) \\ Y_3(t) = M \end{cases}$$

Les solutions du système différentiel sont :

$$y_1(t) = \alpha_1 \exp(-k_1 t)$$

$$y'_1(t) = \alpha'_1 \exp(-k'_1 t)$$

$$y_2(t) = \frac{-k_1 \alpha_1}{k_2 - k_1} \exp(-k_1 t) + \frac{-k'_1 \alpha'_1}{k_2 - k'_1} \exp(-k'_1 t) + c \exp(-k_2 t)$$

$$\begin{aligned}
y_3(t) = & \frac{k_2\alpha_1}{k_2 - k_1} (\exp(-k_2t) - \exp(-k_1t)) \\
& + \frac{k_2\alpha'_1}{k_2 - k'_1} (\exp(-k_2t) - \exp(-k'_1t)) \\
& + M(1 - \exp(-k_2t))
\end{aligned}$$

où α_1 , α'_1 , c et c' sont des constantes d'intégration.

La condition d'estimabilité (identifiabilité) des paramètres, exposée dans le chapitre 1, est incluse dans le logiciel d'estimation. L'usage de celui-ci nous a prouvé qu'ils sont parfaitement estimables. Les valeurs estimées sont :

$$\begin{cases} k_1 = 0.218 \\ k'_1 = 0.064 \\ k_2 = 0.050 \end{cases}$$

Comme il y a beaucoup de paramètres par rapport au nombre de données; pour estimer le modèle y_3 nous avons fixé les paramètres k_1, k'_1, α_1 , et, α'_1 aux valeurs estimées dans le modèle Y_1 .

Avec cette nouvelle compartimentation, les sommes des carrés des écarts sont égales à :

- 0.183 pour le modèle y_1
- 1.184 pour le modèle y_3

Le tableau $T(3)$, présente les valeurs estimées et observées dans les deux compartiments lombric et plante. Les figures (5.8), (5.9) et (5.10) présentent les courbes représentatives.

Temps	y_1 (obsev� et estim�)		y_3 (observ� et estim�)	
0	9.947	10.075	0	0
1	9.199	9.098		
2	8.440	8.251	0.992	0.702
4	6.737	6.862	1.377	1.421
8	4.742	4.920	2.821	2.771
14	3.355	3.161	3.610	4.487
20	2.189	2.101	5.776	5.826
26	1.250	1.417	7.129	6.839
40	0.592	0.574	8.931	8.351

T(3) :Tableau des valeurs observ es et estim es relativement aux deux mod les y_1 et y_3 , dans le cas de la compartimentation de la figure(5.8).

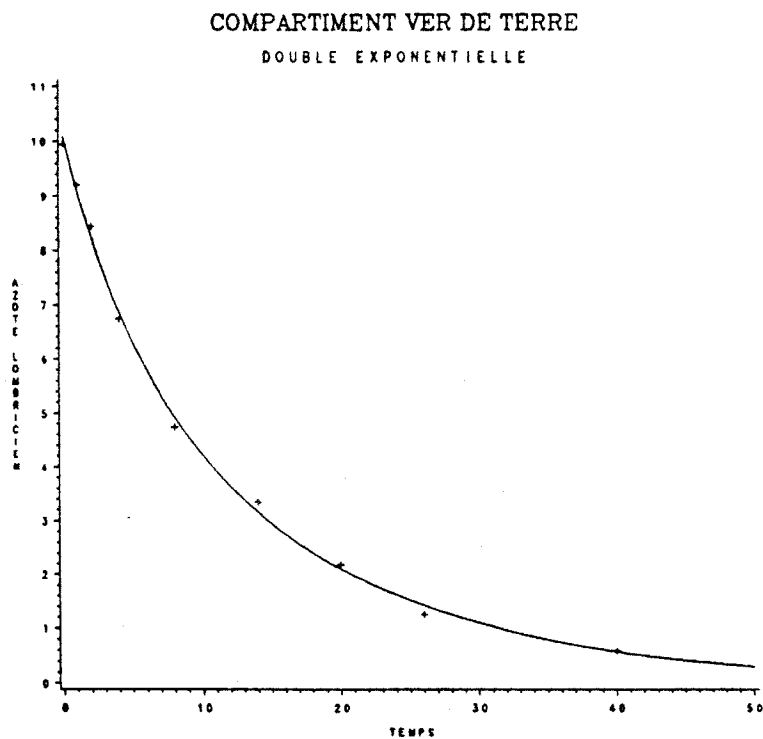


Figure (5.8)

COMPARTIMENT SOL

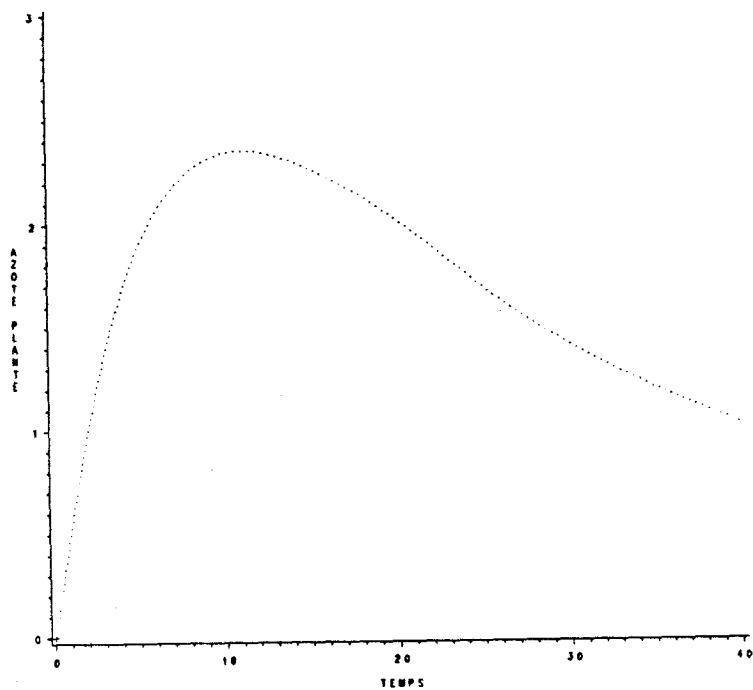


Figure (5.9)

AZOTE PLANTE

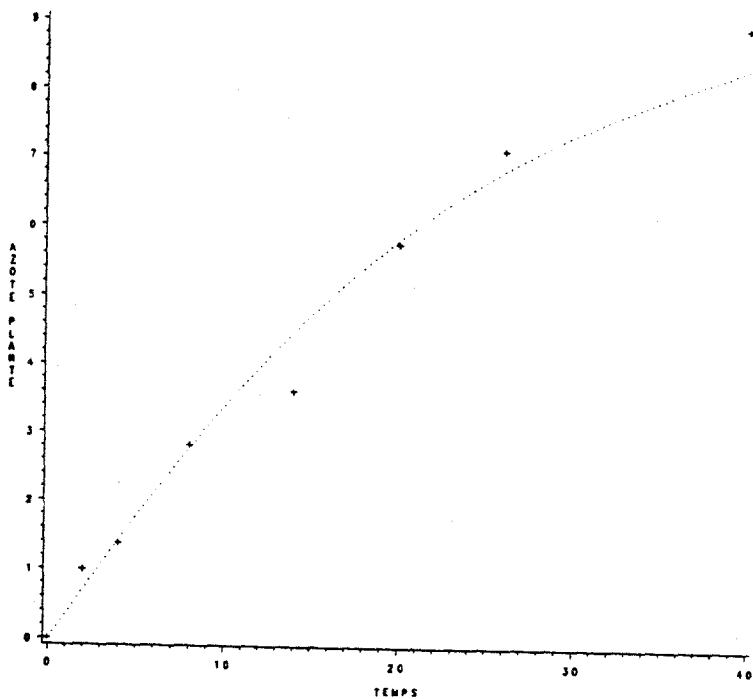


Figure (5.10)

Nous présentons ci-dessous la matrice de corrélation des paramètres $\alpha_1, k_1, \alpha'_1 k'_1$, relative au premier modèle y_1 .

$$\begin{pmatrix} 1 & -0.948 & -0.997 & -0.977 \\ -0.948 & 1 & 0.960 & 0.901 \\ -0.997 & 0.960 & 1 & 0.976 \\ -0.977 & 0.901 & 0.976 & 1 \end{pmatrix}$$

Nous avons essayé l'hypothèse de considérer le compartiment Sol en deux sous-compartiments. La compartimentation du lombric restant inchangée. Cette nouvelle compartimentation s'est traduite par une augmentation significative du nombre de paramètres dans le modèle y_3 . Le système différentiel correspondant est:

$$(S'_1) = \begin{cases} \frac{dy_1(t)}{dt} = -k_1 y_1(t) \\ \frac{dy'_1(t)}{dt} = -k'_1 y'_1(t) \\ \frac{dy'_2(t)}{dt} = +k'_1 y'_1(t) - k'_2 y'_2(t) \\ \frac{dy_3(t)}{dt} = +k_2 y_2(t) + k'_2 y'_2(t) \end{cases}$$

Les solutions du système différentiel sont :

$$\begin{aligned} y_1(t) &= \alpha_1 \exp(-k_1 t) \\ y'_1(t) &= \alpha'_1 \exp(-k'_1 t) \\ y_2(t) &= \frac{-k_1 \alpha_1}{k_2 - k_1} \exp(-k_1 t) + c \exp(-k_2 t) \\ y'_2(t) &= \frac{-k'_1 \alpha'_1}{k'_2 - k'_1} \exp(-k'_1 t) + c' \exp(-k'_2 t) \\ y_3(t) &= \frac{k_2 \alpha_1}{k_2 - k_1} (\exp(-k'_2 t) - \exp(-k_1 t)) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{k'_2 \alpha'_1}{k'_2 - k'_1} (\exp(-k'_2 t) - \exp(-k'_1 t)) \\
& + c (\exp(-k'_2 t) - \exp(-k_2 t)) + M (1 - \exp(-k'_2 t))
\end{aligned}$$

où α_1 , α'_1 , c et c' sont des constantes d'intégration.

Le nombre important des paramètres et la rareté des données sont largement en cause dans les estimations obtenues sous cette nouvelle hypothèse.

La figure (5.11) présente le modèle y_3 sous cette nouvelle hypothèse.

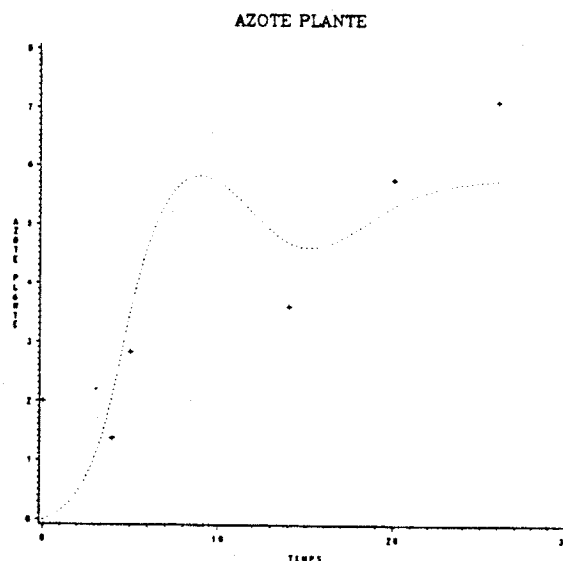


Figure (5.11)

5.2.3 Calcul du temps moyen de séjour de l'azote dans chacun des compartiments

Soit la quantité

$$P = \frac{Y_1(0) - Y_1(t)}{Y_1(0)} = 1 - \frac{Y_1(t)}{M} \quad (Y_1(0) = M)$$

Cette proportion peut être interprétée comme étant la probabilité pour une particule élémentaire d'avoir un temps de séjour inférieur à t dans le premier

compartiment (PAVÉ, 1980) :

$$P(T_1 \leq t) = 1 - \frac{Y_1(t)}{M}$$

Pour les n premiers compartiments, on aura :

$$P(T_1 \leq t) = 1 - \frac{1}{M} \sum_{i=1}^n Y_i(t)$$

On peut vérifier sans difficulté que $P(T_n \leq t)$ est une fonction de répartition.

La densité de la variable aléatoire T_n dans les n premiers compartiments est :

$$f_n(t) = \frac{dP(T_n \leq t)}{dt} = \frac{-1}{M} \sum_{i=1}^n \frac{Y_i(t)}{dt}$$

Le temps moyen de séjour dans les n premiers compartiments est :

$$\mu_n = \int_0^{+\infty} t f_n(t) dt$$

Ainsi, on trouve pour le premier compartiment :

$$\mu = 12.912$$

5.2.4 Calcul du débit du transfert d'azote du ver de terre vers le sol

La valeur du débit D de l'azote du ver de terre sera donnée par la dérivée à l'instant initial, de la quantité $Y_1(t)$, effectif du compartiment lombric :

$$D = \alpha_1 k_1 + \alpha_1' k_1'$$

Numériquement :

$$D = 1.049 \text{mg/j}$$

COMPARTIMENT VER DE TERRE
DOUBLE EXPONENTIELLE

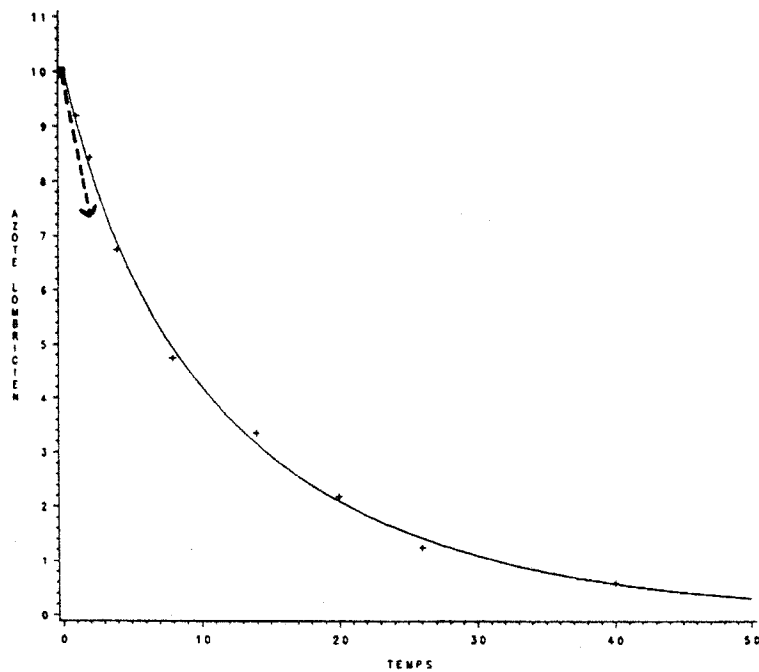


Figure (5.12) : Vitesse initiale du transfert de l'azote du ver de terre au sol.

5.2.5 Remarques et commentaires

A l'issue de l'étape 1 de l'élaboration du modèle, nous avons envisagé de modifier le compartiment ver de terre pour améliorer l'adéquation de la courbe du modèle

à celle des données.

Nous avons alors émis l'hypothèse d'un double processus de sécrétion de l'azote du lombric. C'est ce qui nous a conduit à subdiviser le compartiment lombric en deux sous-compartiments. Le résultat s'est alors avéré beaucoup plus satisfaisant et a conforté l'hypothèse biologique du départ.

De plus, le choix de la double compartimentation se justifie quantitativement par le critère d'Akaike (AIC). En effet, pour un modèle de k paramètres $AIC(k)$ est égal à :

$$-2\text{Log}L(k) + 2k$$

où : $L(k)$ est la vraisemblance atteinte par l'estimation obtenue.

Dans le cas d'un seul compartiment, la valeur de AIC est : -20.772 dans le cas de deux, cette valeur est : -29.984 . D'après le critère d'Akaike, c'est le deuxième cas qu'il faut retenir.

Par curiosité, nous avons essayé de pousser la subdivision jusqu'à trois sous-compartiments. En fin de compte, nous avons renoncé à la triple compartimentation pour les raisons suivantes :

1. Cette nouvelle compartimentation induit de nouveaux paramètres (deux). On se retrouve avec 5 paramètres qu'il faut estimer avec 8 données : nos résultats n'étaient pas suffisamment précis (voir figure (5.11))
2. Graphiquement, la triple compartimentation n'apporte pas de progrès significatifs dans l'adéquation de la courbe du modèle à celle des données au regard des résultats déjà obtenus par la double compartimentation.

5.2.6 Conclusion

Les calculs numériques que nous avons effectués grâce aux modèles nous révèlent trois résultats essentiels.

1. L'azote lombricien est entièrement assimilé par la plante, en effet les graphiques de la figure 5.6. montrent que au bout de 45 jours environ, cet azote se retrouve entièrement dans la plante, après un transit par le compartiment sol. Ce résultat est une démonstration de la "bonne qualité" de l'azote du ver de terre.
2. Nous constatons que la valeur du débit est importante, et le temps moyen de séjour est relativement réduit. Connaissant la forte biomasse que représentent les lombrics, on mesure l'importance quantitative de l'azote d'origine lombricienne.

5.3 Structure "Carbone" dans le modèle REAL

Dans le même esprit et dans le but de comprendre le transfert du carbone entre divers compartiments écologiques dont le ver de terre, nous nous sommes intéressés à la construction de modèles qui peuvent rendre compte de ce phénomène.

Ce travail est de la même nature que celui réalisé pour la structure "azote" pour cette raison nous ne reprendrons pas tous les détails de notre cheminement. Nous trouverons dans le travail de ^{Diery}[27] des développements sur le rôle biologique du carbone lombricien.

5.3.1 Données expérimentales

Les données expérimentales qui nous ont été présentées sont relatives aux compartiments :

- Litière il sera noté Lit;
- Sol, il sera noté S;
- Vers de terre, il sera noté L.

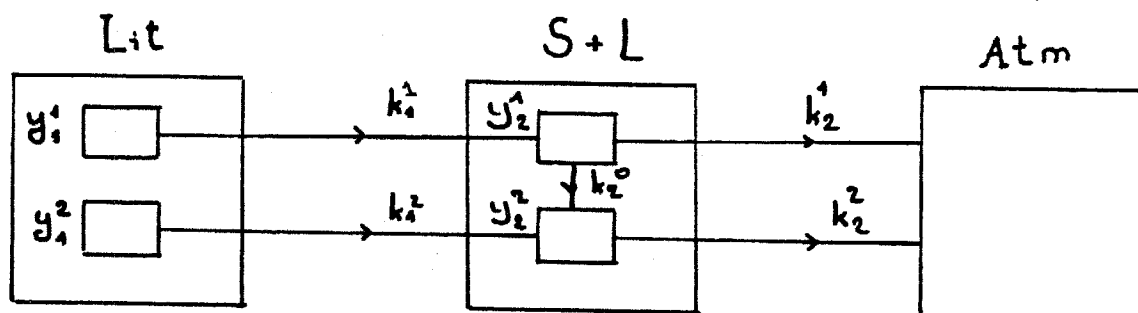
Le système global est présenté dans la figure (5.13).

La litière utilisée a été marquée avec du C^{14} , il se retrouve à la fin dans l'atmosphère, après passage par le sol et le ver de terre. Nous exposerons dans le tableau T(4) les données observées dans le compartiment Lit, S, et L.

litière

N° d'observation	Temps	Litière	Lombric	Sol
1	0	100		0
2	4	62.93	0.30	8
3	8	39.62	1.3	20
4	17	14.01	1.3	23
5	30	3.14	0.63	15.5
6	48	0.40	0.42	21.75
7	68	0.04		16.51

T(4) : Tableau des données. On observe l'existence de 7 mesures dans le compartiment litière et sol, et 6 dans le compartiment lombric.



Figure(5.13): Lit = litière, S = sol, Atm = atmosphère.

5.3.2 Modèle mathématique

Nous appelons :

- Y_1 : la quantité de carbone dans la litière, $Y_1 = y_1^1 + y_1^2$.
- y_2^1 : la quantité de carbone dans le sol.
- y_2^2 : la quantité de carbone dans le lombric.
- y_3 : la quantité de carbone dans l'atmosphère.

Par usage de l'hypothèse fondamentale exposée dans la partie A de ce chapitre, on peut générer les équations suivantes :

$$(S_2) = \begin{cases} \frac{dy_1^1(t)}{dt} &= -k_1^1 y_1^1(t) \\ \frac{dy_1^2(t)}{dt} &= -k_1^2 y_1^2(t) \\ \frac{dy_2^1(t)}{dt} &= -k_1^1 y_1^1(t) - (k_2^0 + k_2^1) y_2^1(t) \\ \frac{dy_2^2(t)}{dt} &= +k_1^2 y_1^2(t) + k_2^0 y_2^1(t) - k_2^2 y_2^2(t) \\ \frac{dy_3(t)}{dt} &= k_2^1 y_2^1(t) + k_2^2 y_2^2(t) \end{cases}$$

Les conditions initiales sont :

- à $t = 0$:

$$\begin{cases} Y_1(t) &= M \\ y_2^1(t) &= y_2^2 = y_3(t) = 0 \end{cases}$$

- à $t = +\infty$:

$$\begin{cases} Y_1(t) &= y_2^1(t) = y_2^2(t) = 0 \\ y_3(t) &= M \end{cases}$$

La solution analytique de ce système est facile à trouver, elle est donnée par :

$$\left\{ \begin{array}{l} y_1^1(t) = \alpha_1^1 \exp(-k_1^1 t) \\ y_1^2(t) = (M - \alpha_1^1) \exp(-k_1^2 t) \\ y_2^1(t) = \frac{k_1^1 \alpha_1^1}{k_2^0 + k_2^1 - k_1^1} (\exp(-k_1^1 t) - \exp(-(k_2^1 + k_2^0)t)) \\ y_2^2(t) = \frac{k_1^2 \alpha_1^2}{k_2 - k_1^1} \exp(-k_1^2 t) + \frac{k_2^0 k_1^1 \alpha_1^1}{(k_2^0 - k_1^1)(k_2^0 + k_1^1)} \exp(-k_1^1 t) \\ \quad + \frac{k_2^0 c_2^1}{k_2^1 - k_2^0 - k_2^0} \exp(-(k_2^0 + k_2^1)t) + c_2^2 \exp(-k_2^2 t) \\ y_3(t) = \frac{-k_2^1 \alpha_1^1}{-k_1^1 + k_2^1 + k_2^0} \exp(-k_1^1 t) - \frac{k_2^1 c_2^1}{k_2^1 + k_2^0} \exp(-(k_2^0 + k_2^1)t) \\ \quad + \frac{k_2^2 \alpha_1^2}{k_1^1 - k_2^2} \exp(-k_1^2 t) + \frac{k_2^0 k_1^1 \alpha_1^1}{(k_1^1 - k_2^2)(k_2^0 + k_2^1 - k_1^1)} \exp(-k_1^1 t) \\ \quad + \frac{k_2^0 k_2^2 c_2^1}{(k_2^0 + k_2^1)(-k_2^0 - k_2^1 + k_2^2)} \exp(-(k_2^0 + k_2^1)t) - c_2^2 \exp(-k_2^2 t) + M \end{array} \right.$$

L'estimation des coefficients de transfert a donné

$$k_1^1 = 0.128$$

$$k_1^2 = 0.011$$

$$k_2^0 = 30.710$$

$$k_2^1 = 1.390$$

$$k_2^2 = 0.010$$

Les corrélations entre les paramètres sont :

$$\text{cor}(k_1^1, k_1^2) = 0.81$$

$$\text{cor}(k_2^1, k_2^2) = 0.99$$

La somme des carrés des écarts relatifs aux hors modèles, est :

- 309.133 pour le modèle Y_1
- 0.662 pour le modèle y_2^1
- 65.648 pour le modèle y_2^2

Nous présentons dans le tableau T(5) les valeurs estimées dans les trois compartiments Litière, Sol, Lombric; et dans la figure (5.14) les modèles estimés.

Temps	Litière		Lombric		Sol	
	(observé-estimé)		(observé-estimé)		(observé-estimé)	
0	100	103.20	0	0	0	0
4	62.93	63.02	0.30	0.63	8	10.1
8	39.62	38.95	1.3	0.82	20	15.83
17	14.01	14.25	1.3	0.95	23	20.79
30	3.14	4.76	0.63	0.91	15.5	21.09
48	0.40	2.36	0.42	0.77	21.75	18.98
68	0.04	1.72			16.51	16.51

T(5) :Tableau des valeurs observées et estimées relativement aux deux modèles Y_1 (carbone litière) y_2^1 (carbone lombric) et y_2^2 (carbone sol), dans le cas de la compartimentation de la figure(5.13).

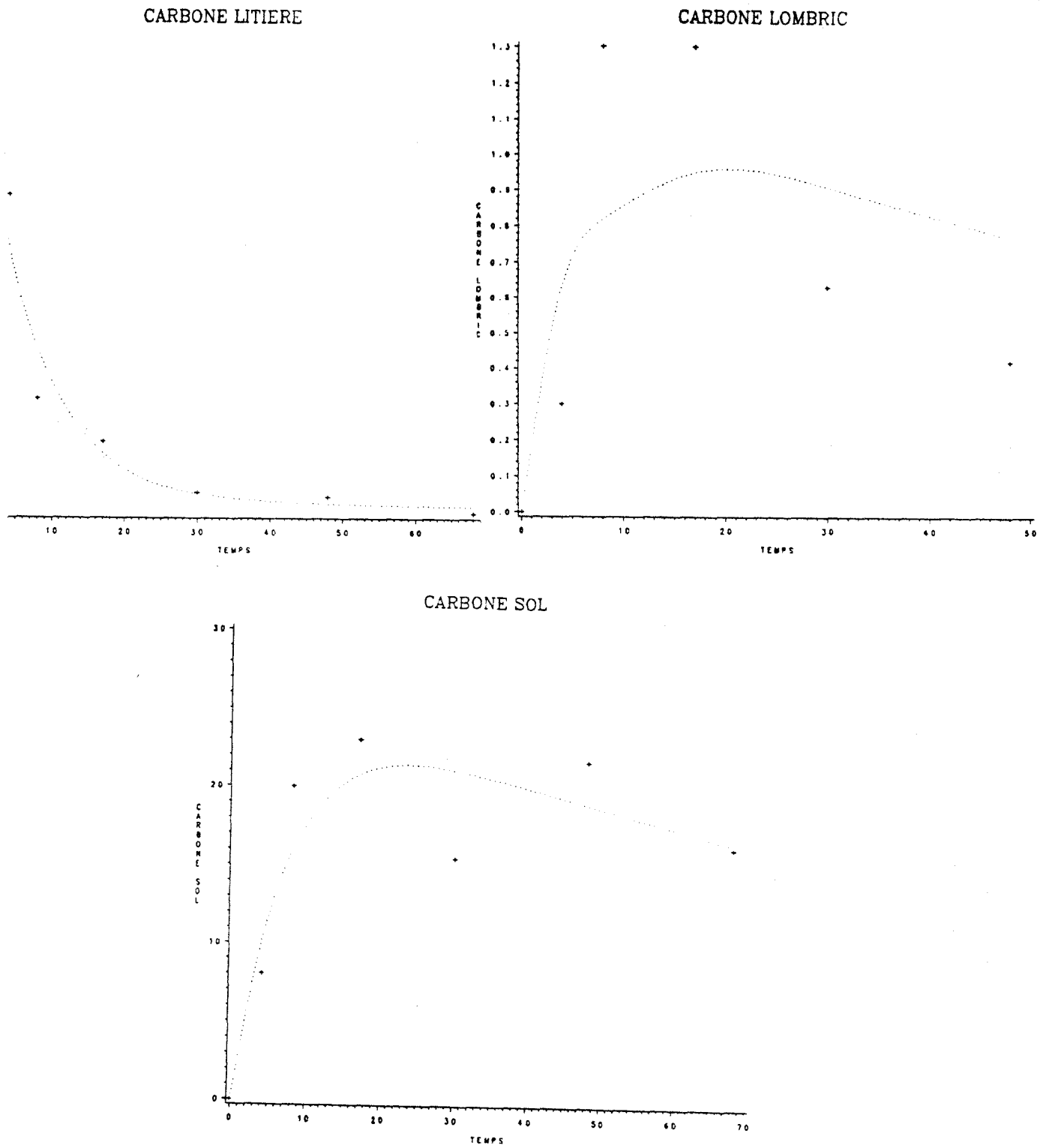


Figure (5.14) : Courbes représentatives aux modèles y_1 (carbone litière) y_2^1 (carbone lombric) et y_2^2 (carbone sol)

Conclusion de la partie pratique

A part le cas du compartiment ver de terre, de l'examen de nos résultats numériques nous constatons que :

- Les intervalles de confiance sont assez larges.
- Les matrices de variance covariances ont des valeurs assez élevées.

Comme ces résultats statistiques sont fondés sur des approximations asymptotiques, autrement dit plus l'échantillon est grand plus les résultats seront précis, les constats cités plus haut s'expliquent par la taille réduite de l'échantillon :

- pour la structure azote :
 - 9 observations dans le compartiment Lombric
 - 8 observations dans le compartiment Plante
- et pour la structure Carbone :
 - 7 observations dans les compartiments Litière et Sol
 - 6 observations pour le compartiment Lombric

Dans le schéma résumant les principales étapes de la modélisation (figure (0.2) de l'introduction), l'acquisition des données expérimentales se situe bien après la représentation conceptuelle et la constitution du modèle mathématique.

Cet ordre n'a pas été respecté et l'échantillonnage a été fait sans consultation a priori entre l'écologue et le mathématicien.

C'est une première tentative, il serait intéressant de revenir à l'expérience pour les deux raisons suivantes :

- au niveau biologique, justifier la subdivision du ver de terre en deux sous-compartiments,
- au niveau mathématique, rééchantillonner pour confirmer ou infirmer la conception du système et maximiser la précision des estimations.

ANNEXES

ANNEXE A : Analyse des données et modélisation

L'étude des phénomènes est une longue marche où alternent et s'entremêlent l'élaboration de modèle, le recueil des données et l'élaboration des faits. On a souvent présenté la modélisation, par son caractère inférentiel, comme opposée à l'analyse des données. Nous nous proposons dans cette partie de montrer que les deux disciplines peuvent coexister ensemble pour servir le même but.

Rôle de l'analyse des données dans l'élaboration des modèles

Il arrive que les données à traiter se présentent dans un lot où on ne peut pas distinguer à 'l'oeil' les groupements homogènes des données. Bien qu'il s'agit d'un seul phénomène à étudier, les données acquises peuvent présenter une hétérogénéité due à des nuances existantes dans le phénomène lui-même. Il y a alors le risque de proposer un modèle pour l'ensemble des observations. Les techniques d'analyse des données peuvent être d'une grande utilité pour détecter les groupements des données et ainsi aider à proposer un modèle adéquat pour chaque groupement. Dans le cadre de REAL nous nous sommes intéressés aux phénomènes de température dans le sol, des données ont été observées sur plusieurs années et à différents niveaux du sol. Nous étions intéressés par la construction d'un modèle de

température du sol. La question qui s'est imposée est la suivante : faut-il proposer un seul modèle pour les différents niveaux ou non ? Le problème se traduit au niveau des données en la nécessité de voir s'il y a des "niveaux" ou des "blocs" dans l'ensemble des données dont il faut tenir compte de la disparité. Nous nous sommes servis de l'analyse en composantes principales pour visualiser les différents niveaux de températures (voir figure) et notre conclusion a été la prise en considération du facteur profondeur dans nos modèles.

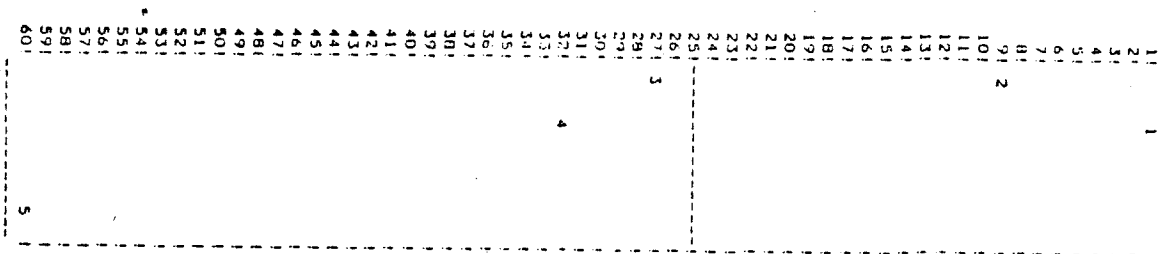


Figure : Axe vertical : 1 ,axe horizontal :2
 Les niveau de profondeur dansle sol sont désignés par 1:niveau 0
 2:niveau-5cm 3:niveau-20cm 4:niveau -50cm 5:niveau-100cm .

Analyse des données et plan d'échantillonnage : coefficient RV

La réflexion sur la modélisation doit en principe commencer avant l'acquisition des données. Les contraintes matérielles et méthodologiques nous obligent à concevoir des plans d'expérience où d'échantillonnages optimisés. Quand les données sont rassemblées dans un tableau, le problème de l'optimisation peut se poser à deux niveaux :

- Au niveau des variables (descripteurs), pour déterminer laquelle est la plus importante et sur quoi il faut focaliser notre observation [67] .
- Au niveau des individus (des sites sur un territoire par exemple) pour choisir le point le plus représentatif.

Une réponse est donnée par le coefficient RV [33] ; il permet en plus de quantifier le degré de la représentativité et ainsi mesure la qualité de l'optimisation.

Analyse des données et validations des modèles

Il s'agit d'analyser les écarts (les résidus) entre les données de l'expérience et celles calculées par le modèle. Si le modèle ne comprend qu'une seule variable, on peut mettre en évidence des éventuelles anomalies : dispersion croissante des écarts, successions de valeurs sur ou sous estimées, etc ... (on trouvera dans le DRAPPER et SMITH [29] des idées sur la manipulation de ces résidus). Dans le cas où on est en présence de plusieurs variables, la visualisation globale de répartition des résidus nécessite une technique d'analyse multidimensionnelle (ACP ou AFC appliquées sur les variables résidus).

Conclusion

Toutes les activités du statisticien concourent à la satisfaction de deux objectifs [35] :

1. Un objectif d'exploration : fournir des résumés synthétiques des ensembles de données observées.
2. Un objectif inférentiel : étendre à un non observé disponible qui aurait pu se substituer au fini observé disponible.

L'analyse des données est un moyen pour atteindre le premier objectif, la modélisation l'est pour le deuxième, et dans bien des cas toutes les deux peuvent servir le même but.

ANNEXE B : Opérations matricielles utilisées dans l'estimation des paramètres

Introduction

L'estimation dans le cas des modèles non linéaires se réduit finalement à des approximations par linéarisation, d'où l'importance que joue l'algèbre matricielle. Tout au long de notre texte, nous avons utilisé des propriétés matricielles. Nous exposerons ci-dessous les principaux résultats sur les opérations matricielles.

Inverse, déterminant et valeur propre

Soit B une matrice carrée, l'inverse de B , notée B^{-1} , est définie par :

$$BB^{-1} = B^{-1}B = I$$

où I est la matrice identité.

Dans le cas où B est une matrice diagonale

$$B = \text{diag}(b_{11}, \dots, b_{nn})$$

Si b_{ii} , pour tout i de 1 à n , alors B est inversible, et son inverse est donné par :

$$B^{-1} = (b_{11}^{-1}, \dots, b_{nn}^{-1})$$

Si

$$\lambda_1, \dots, \lambda_n$$

sont les valeurs propres de B , alors, le déterminant de B , est donné par :

$$\det(B) = \prod_{i=1}^n \lambda_i$$

Cas des matrices définies par blocs

Soit B une matrice par blocs :

$$B = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix}$$

où B_{ij} est de dimensions $n_i \times n_j, j = 1, 2$. On suppose que $\det(B) \neq 0$, $\det(B_{11}) \neq 0$, $\det(B_{22}) \neq 0$, soit A l'inverse de B , alors A est donné par :

$$A = B^{-1} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}$$

où :

$$A_{11} = (B_{11} - B_{12}B_{22}^{-1}B_{21})^{-1} = B_{11}^{-1} + B_{11}^{-1}B_{12}B_{22}^{-1}B_{21}B_{11}^{-1}$$

$$A_{12} = -B_{11}^{-1}B_{12}(B_{22} - B_{21}B_{11}^{-1}B_{12})^{-1} = -B_{11}^{-1}B_{12}A_{22}$$

$$A_{22} = (B_{22} - B_{21}B_{11}^{-1}B_{12})^{-1} = B_{22}^{-1} + B_{22}^{-1}B_{21}B_{11}^{-1}B_{12}B_{22}^{-1}$$

$$A_{21} = -B_{22}^{-1} B_{21} (B_{11}^{-1} - B_{12} B_{22}^{-1} B_{21}^{-1})^{-1}$$

Le déterminant de B est donné par :

$$\det(B) = \det(B_{22}) \cdot \det(B_{11}^{-1} - B_{12} B_{22}^{-1} B_{21}^{-1}) = \frac{\det(B_{22})}{\det(A_{21})}$$

Si B_{12} et B_{21} sont des matrices nulles, alors l'inverse de B est donné par :

$$B^{-1} = \text{diag}(B_{11}^{-1}, B_{22}^{-1})$$

Matrice définie positive

Une condition nécessaire et suffisante pour que la matrice carrée symétrique B soit définie positive est :

$$\det(b_{11}) > 0, \det \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} > 0 \dots$$

Une autre condition nécessaire et suffisante, est que les valeurs propres soient toutes positives.

Matrices et dérivation

Dans la méthode d'estimation de Gauss, nous avons utilisé plusieurs fois la dérivation de vecteurs ou de matrices.

On définit l'opérateur dérivée par rapport à θ , ∇_{θ} par :

$$\nabla_{\theta}^{(p \times 1)} = \left(\frac{\partial}{\partial \theta_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial \theta_p} \right)^T$$

Soit S un vecteur ($n \times 1$).

$$\nabla_{\theta}^{(p \times 1)} C^T (1 \times n) = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \theta_1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \frac{\partial}{\partial \theta_p} \end{pmatrix} (c_1, \dots, c_n)^T = \begin{pmatrix} \frac{\partial c_1}{\partial \theta_1} & \dots & \frac{\partial c_n}{\partial \theta_p} \\ \cdot & \dots & \cdot \\ \frac{\partial c_1}{\partial \theta_1} & \dots & \frac{\partial c_n}{\partial \theta_p} \end{pmatrix}$$

Remarques

1. Si on applique ∇_{θ} à θ , on obtient la matrice identité.
2. Appliquons l'opérateur ∇_{θ} à un scalaire, résultat d'un produit scalaire $c^{(1 \times n)}$ par $D^{(n \times 1)}$

$$\nabla_{\theta}(CD) = (\nabla_{\theta}C)D + (\nabla_{\theta}C^T)D^T$$

Formes quadratiques et dérivation :

Soit la forme quadratique :

$$Y^T Q Y = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n Y_i Q_{ij} Y_j$$

où Q est une matrice symétrique, semi-définie positive.

Appliquons l'opérateur ∇_{θ} à la forme quadratique :

$$\nabla_{\theta}(Y^T Q Y) Q Y + (\nabla_{\theta}(Y^T Q)) Y$$

$$\nabla_{\theta}(Y^T Q Y) = 2(\theta_{\theta} \theta^T A^T) Q A \theta = 2A^T Q A \theta$$

Le lecteur désirant plus de détails pourra se reporter au livre de POLLOCK D.S.G (1979).

- On calcule :

$$Q = H_1 \dots H_N$$

et on pose $R = A_N(Q)$, comme produit de matrice orthogonale, est orthogonal; A_N triangulaire supérieure).

Annexe C

Programme de calcul des courbures suivant la methode expose dans le chapitre 2.

A/ Calcul des tableaux V et H.

Le fichier à lire est le tableau (x_1, x_2, \dots, x_n) des observations.

```
Program
CREATION_DES_MATRICES_DES_DERIVEES_POUR_LE_CALCUL_DES_COURBURES
;
(*LE NOM DU FICHIER DES DONNEES S'APPELLE ABCISSE.PAS*)
CONST
NMAX=20;

TYPE VECT = ARRAY[1..NMAX] OF REAL;
    MATRICE = ARRAY[1..NMAX] OF VECT;
    str = string[15];
    CUBE = ARRAY[1..NMAX] OF MATRICE;

VAR

PAR1,PAR2,PAR3,CST1 :REAL;
A,B      :MATRICE ;
I,J,K,N,M,L,C  :integer;
OUTFILE,INFILE :TEXT;
FIC1,NOM,AAA : STR;
TAB:CUBE;

PROCEDURE LIT(VAR ENTREE:TEXT;NOMDOS:STR; VAR T:MATRICE);
BEGIN
ASSIGN(ENTREE,NOMDOS);
RESET(ENTREE);
L:=0;
WHILE NOT EOF(ENTREE) DO BEGIN
    C:=0;
    L:=L+1;
    WHILE NOT EOLN(ENTREE) DO BEGIN
        C:=
C+1;
```

2

```
READ(ENTREE,t[L,C])
```

```
END;
```

```
READLN(ENTREE)
```

```
END;
```

```
END;
```

```
PROCEDURE ECRIT(RECT:MATRICE);
```

```
VAR CC,LL :INTEGER;
```

```
BEGIN
```

```
FOR LL:= 1 TO L DO BEGIN
```

```
FOR CC:= 1 TO C DO BEGIN
```

```
WRITE(RECT[LL,CC]:8:5);
```

```
END;
```

```
WRITELN
```

```
END;
```

```
WRITELN;WRITELN;WRITELN;
```

```
WRITE('-TAPEZ RETURN POUR CONTINUER -');readln(aaa);
```

```
END;
```

```
PROCEDURE CREE(VAR ENTREE:TEXT;NOMDOS:STR;VAR T1:MATRICE);
```

```
VAR I,J :INTEGER;
```

```
BEGIN
```

```
ASSIGN(ENTREE,NOMDOS);
```

```
REWRITE(ENTREE);
```

```
FOR I:=1 TO 9 DO
```

```
BEGIN
```

```
FOR J:=1 TO 3 DO
```

```
BEGIN
```

```
WRITE(ENTREE,T1[I,J]:10:8,' ');
```

```
END;
```

```
WRITELN(ENTREE);
```

```
END;
```

```
CLOSE(ENTREE);
```

```
END;
```

```
PROCEDURE CREE1(VAR ENTREE:TEXT;NOMDOS:STR;VAR T1:CUBE);
```

```
VAR I,J :INTEGER;
```

```
BEGIN
```

```
ASSIGN(ENTREE,NOMDOS);
```

```
REWRITE(ENTREE);
```

```
FOR I:=1 TO 9 DO
```

```
BEGIN
```

```
FOR J:=1 TO 3 DO
```

```
BEGIN
```

```
FOR K:=1 TO 3 DO
```

```
BEGIN
```

```

        END;
        WRITELN(ENTREE);
    END;

    WRITELN(ENTREE);WRITELN(ENTREE);WRITELN(ENTREE);
END;
CLOSE(ENTREE);
END;

```

```

BEGIN
N:=9;

```

```

WRITELN;WRITELN;

```

```

WRITELN('QUEL EST LE NOM DU FICHIER DOS a LIRE ?
');READLN(NOM);

```

```

LIT(INFILE,NOM,A);

```

```

ECRIT(A);

```

```

N:=1;
M:=9;

```

```

PAR1:=2.834;
PAR2:=0.1853;
PAR3:=0.0628;
CST1:=9.947;

```

```

FOR I:=1 TO M DO

```

```

    BEGIN
    B[I,1]:=EXP(-PAR2*A[1,I]) - EXP(-PAR3*A[1,I]);
    B[I,2]:=-A[1,I]*PAR1*EXP(-PAR2*A[1,I]);
    B[I,3]:=-(CST1-PAR1)*A[1,I]*EXP(-PAR3*A[1,I]);
    END;

```

```

FOR I:=1 TO M DO

```

```

    BEGIN
    TAB[I,1,1]:=0;
    TAB[I,1,2]:=-A[1,I]*EXP(-PAR2*A[1,I]);
    TAB[I,1,3]:=A[1,I]*EXP(-PAR3*A[1,I]);
    TAB[I,2,1]:=-A[1,I]*EXP(-PAR2*A[1,I]);
    TAB[I,2,2]:=PAR1*A[1,I]*A[1,I]*EXP(-PAR2*A[1,I]);
    TAB[I,2,3]:=0;
    TAB[I,3,1]:=A[1,I]*EXP(-A[1,I]*PAR3);
    TAB[I,3,2]:=0;

```

END;

4

CREE(OUTFILE, 'FIC1.PAS', B);

CREE1(OUTFILE, 'FIC3.PAS', TAB);
END.

B/ Calcul des courbures.B/ Calcul des courbures.

Les fichiers à lire sont les tableaux créés par le programme precedent. Comme résultats il donne la valeur des deux courbures : normale et tangentielle.

```

Program CALCUL_DE_COURBURE;
(*Ce programme permet le calcul de la courbure suivant la
methode expos
dans BATES ET WATTS 1980 *)

CONST
NMAX=10;

TYPE VECT = ARRAY[1..NMAX] OF REAL;
MATRICE = ARRAY[1..NMAX] OF VECT;
CUBE = ARRAY[1..NMAX] OF MATRICE;
STR = STRING[15];
INDLIG=1..NMAX;
INDCOL=1..NMAX;

VAR
PS, EPS, EPS1, PKN, PKT, KN, KN2, KT, KT2, S1, S2, S3, S4, SIGMA2, S, ALFA ,
PIV , GAMMA : REAL ;
NOR1, NOR2, NORMDD1, NORMDD2, PS1, NORMT2, NORMT1, NORMD1, NORMD2
:REAL;
KK, KA, N1, K1, K2, I, J, K, N, M, L, C :integer;
TA2, TA1, QTR, TRINV, R12, RINV, PA, ID, AA1, R1, R2, AA, Q, HK, HK1, A, H1 :
MATRICE;
TAB2, TAB, TAB1, TAB1A: CUBE;
DD, DD1, DD2, D, D1, D2, V, DIAGR, BETA: VECT;
INFILE :TEXT;
NOM, AAA : STR;

(*procedure de lecture des donnees *)

PROCEDURE LIT(VAR ENTREE:TEXT;NOMDOS:STR; VAR T:MATRICE);
BEGIN
ASSIGN(ENTREE, NOMDOS);
RESET(ENTREE);
L:=0;
WHILE NOT EOF(ENTREE) DO BEGIN
C:=0;
L:=L+1;
WHILE NOT EOLN(ENTREE) DO BEGIN
C:=
C+1;

```



```

READ(ENTREE,t[L,C])
END;
READLN(ENTREE)
END;
END;

```

```

PROCEDURE LITC1(VAR ENTREE:TEXT;NOMDOS:STR;VAR T1:MATRICE);
VAR I,J :INTEGER;
BEGIN
ASSIGN(ENTREE,NOMDOS);
RESET(ENTREE);
FOR I:=1 TO 9 DO
BEGIN
FOR J:=1 TO 3 DO
BEGIN
READ(ENTREE,T1[I,J]);
END;
READLN(ENTREE);
END;
CLOSE(ENTREE);
END;

```

```

PROCEDURE LITC2(VAR ENTREE:TEXT;NOMDOS:STR;VAR T1:CUBE);
VAR I,J :INTEGER;
BEGIN
ASSIGN(ENTREE,NOMDOS);
RESET(ENTREE);
FOR I:=1 TO 9 DO
BEGIN
FOR J:=1 TO 3 DO
BEGIN
FOR K:=1 TO 3 DO
BEGIN
READ(ENTREE,T1[I,J,K]);
END;
READLN(ENTREE);
END;
READLN(ENTREE);READLN(ENTREE);READLN(ENTREE);
END;
CLOSE(ENTREE);
END;

```

```

PROCEDURE ECRIT1( T1:CUBE);
VAR I,J :INTEGER;
BEGIN
FOR I:=1 TO 9 DO
BEGIN
FOR J:=1 TO 3 DO
BEGIN
FOR K:=1 TO 3 DO

```

```

        WRITE(T1[I,J,K]:10:8,' ');
        END;
        WRITELN;
    END;
WRITE('-TAPEZ RETURN POUR CONTINUER -');readln(aaa);

    WRITELN;WRITELN;WRITELN;
    END;
WRITE('-TAPEZ RETURN POUR CONTINUER -');readln(aaa);
END;

```

```

PROCEDURE ECRIT2( T1:CUBE);
VAR I,J :INTEGER;
BEGIN
FOR J:=1 TO 2 DO
    BEGIN
    FOR I:=1 TO 6 DO
        BEGIN
        FOR K:=1 TO 2 DO
            BEGIN
            WRITE(T1[I,J,K]:10:8,' ');
            END;
            WRITELN;
        END;
    END;
WRITE('-TAPEZ RETURN POUR CONTINUER -');readln(aaa);

        WRITELN;WRITELN;WRITELN;
    END;
WRITE('-TAPEZ RETURN POUR CONTINUER -');readln(aaa);
END;

```

(*PROCEDURE INVERSION DE MATRICE*)

```

PROCEDURE INVERSION(VAR MATI:MATRICE;MAT:MATRICE
;NMAX:INTEGER);

```

```

VAR K,I:INDCOL;
    J:INDLIG;
    D:REAL;

```

```

FOR I:=1 TO NMAX DO
BEGIN
D:=MAT[I,I];
MAT[I,I]:=1;

```

```

FOR J:=1 TO NMAX DO
MAT[I,J]:=MAT[I,J]/D;
FOR K:=1 TO NMAX DO
IF K<>I THEN
BEGIN
D:=MAT[K,I];
MAT[K,I]:=0;
FOR J:=1 TO NMAX DO
MAT[K,J]:=MAT[K,J]-MAT[I,J]*D;
END;
END;
FOR I:=1 TO NMAX DO
FOR J:=1 TO NMAX DO
MATI[I,J]:=MAT[I,J];
END;

```

(*PROCEDURE DE TRANSPOSITION DE MATRICE*)

```

PROCEDURE TRANSPOSE(VAR MAT,MATA:MATRICE;NC,NL :INTEGER);
VAR I,J :INTEGER;
BEGIN
FOR I:=1 TO NL DO
FOR J:=1 TO NC DO MAT[J,I]:=MATA[I,J];
END;

```

(*PROCEDURE PRODUIT DE MATRICE*)

```

PROCEDURE PRODUIT(VAR MAT,MATA,MATB : MATRICE;
NL,NCL,NC:INTEGER);
VAR I,J,K:INTEGER;
BEGIN
FOR I:=1 TO NL DO
FOR J:=1 TO NC DO
BEGIN
MAT[I,J]:=0;
FOR K:=1 TO NCL DO
MAT[I,J]:=MAT[I,J]+MATA[I,K]*MATB[K,J];
END;
END;

```

(*Procedure d'écriture des données pour vérifications : *)

```

PROCEDURE ECRIT(RECT:MATRICE);
VAR CC,LL :INTEGER;
BEGIN

```

```

WRITE('MAT(' ,LL,' ,',CC,')=' ,RECT[LL,CC]:10:8,' ');
                                END;
                                WRITELN;
                                END;
WRITELN;WRITELN;WRITELN;
WRITE('-TAPEZ RETURN POUR CONTINUER -');readln(aaa);

```

```

END;

```

```

BEGIN
M:=9;N:=3;

```

```

CLRSCR;WRITELN;WRITELN;WRITELN;WRITELN;WRITELN;WRITELN;WRITELN;

```

```

WRITELN('                QUEL EST LE NOM DU FICHIER DOS a LIRE ?
');
WRITELN('                *****
');

```

```

READLN(NOM);
CLRSCR;

```

```

(*lecture des donnees :*)
LITC1(INFILE,NOM,A);

```

```

WRITELN('LA MATRICE DES DONNEES  : ');
WRITELN('***** ');
L:=9;
C:=3;
(*écriture des donnees :*)
(*ECRIT(A);*)

```

```

CLRSCR;WRITELN;WRITELN;WRITELN;WRITELN;WRITELN;WRITELN;WRITELN;

```

```

WRITELN('                QUEL EST LE NOM DU CUBE DOS a LIRE ? ');
WRITELN('                *****
');

```

CLRSCR;

10

```
(*lecture des donnees :*)  
LITC2(INFILE,NOM,TAB);
```

```
WRITELN('LE CUBE DES DONNEES : ');  
WRITELN('*****');
```

```
(*écriture des donnees :*)  
(*ECRIT1(TAB);*)
```

```
(*N:=C;  
M:=L;*)  
N1:=N-1;
```

```
FOR K:=1 TO N DO
```

```
  BEGIN
```

```
    S:=0;
```

```
    (*Definition de v(k) et calcul de somme des  
a(i,k)2*)
```

```
    FOR I:=K TO M DO
```

```
      BEGIN
```

```
        V[I] := A[I,K];
```

```
        S:= S + V[I]*V[I];
```

```
      END;
```

```
    ALFA:= SQRT(S);
```

```
    PIV:= A[K,K];
```

```
    IF (PIV >= 0) THEN ALFA:= -ALFA;
```

```
    DIAGR[K]:=ALFA;
```

```
    BETA[K]:=S-PIV*ALFA;
```

```
    PIV:=PIV-ALFA;
```

```
    V[K]:=PIV;
```

```
    A[K,K]:=PIV;
```

```
    FOR J:=k+1 TO N DO
```

```
      BEGIN
```

```
        S:=0;
```

```
        FOR I:=K TO M DO S:= S + V[I]*A[I,J];
```

```
          GAMMA := S/BETA[K];
```

```
        FOR I:=K TO M DO A[I,J]:=A[I,J]-
```

```
        GAMMA*V[I];
```

END;

u

WRITELN;

WRITELN;

```
(*FOR I:=1 TO M DO
  BEGIN
    FOR J:= 1 TO N DO
      WRITE(LST,' R[' ,I, ',' ,J, ']=' ,A[I,J]:8:3);
      WRITELN(LST);
```

```
    END;*)
FOR I:=1 TO M DO
  BEGIN
    FOR J:=1 TO N DO R1[I,J]:=0;
    END;
  FOR J:=1 TO N DO R1[J,J]:=DIAGR[J];
  FOR I:=1 TO N DO
    BEGIN
      FOR J:=I+1 TO N DO R1[I,J]:=A[I,J];
      END;
    WRITELN;
    WRITELN;
```

```
(*WRITELN('LA MATRICE TRIANGULAIRE SUPERIEURE : ');*)
(*WRITELN('*****');*)
WRITELN;
FOR I:=1 TO N DO FOR J:=1 TO N DO R12[I,J]:=R1[I,J];
L:=M;
C:=N;
```

```
(*ECRIT(R1);*)
```

```
WRITELN;
(*WRITELN('-TAPEZ RETURN POUR CONTINUER -');READLN(AAA);*)
```

```
(*FOR I:=1 TO N DO
  BEGIN
    WRITE(' A(' ,I, ') = ',BETA[I]:8:3);
    END;
  WRITELN;
  *)
N1:=N-1;
```

FOR I:=1 TO M DO

BEGIN

FOR J:=1 TO M DO

BEGIN

HK[I,J]:=0;

END;

END;

FOR I:=N TO M DO

BEGIN

FOR J:=N TO M DO HK[I,J]:=-

A[I,N]*A[J,N]/BETA[N];

END;

FOR I:=1 TO M DO HK[I,I]:=1+HK[I,I];

FOR I:=1 TO M DO

BEGIN

FOR J:=1 TO M DO H1[I,J]:=-

A[I,1]*A[J,1]/BETA[1];

END;

FOR J:=1 TO M DO H1[J,J]:=1+H1[J,J];

FOR K:=N DOWNT0 3 DO

BEGIN

K1:=K-1;

K2:=K1-1;

FOR I:=1 TO M DO

BEGIN

FOR J:=1 TO M DO

BEGIN

END;

END;

13

FOR I:=K1 TO M DO

BEGIN

FOR J:=K1 TO M DO HK1[I,J]:=-
A[I,K1]*A[J,K1]/BETA[K1];
END;

FOR I:=1 TO M DO HK1[I,I]:=1+HK1[I,I] ;

FOR I:=1 TO M DO

BEGIN

FOR J:=1 TO M DO Q[I,J]:=0;
END;

FOR I:=K1 TO M DO

BEGIN

FOR J:=K1 TO M DO

BEGIN

Q[I,J]:=0;

FOR KA:=K1 TO M DO

Q[I,J]:=Q[I,J]+HK1[I,KA]*HK[KA,J];

END;

END;

FOR I:=1 TO K2 DO Q[I,I]:=1;

FOR I:=1 TO M DO

BEGIN

FOR J:=1 TO M DO HK[I,J]:=Q[I,J];

END;

END;

FOR I:=1 TO M DO

BEGIN

FOR J:=1 TO M DO


```

AA[I,J]:=0.;
FOR K:=1 TO M DO AA[I,J]:=AA[I,J]+H1[I,K]*HK[K,J];
END;
END;

```

```

(*WRITELN('LA MATRICE ORTHOGONALE : ');
WRITELN('***** ');*)

```

```

M:=9;
N:=3;
L:=M;
C:=M;

```

```

(*ECRIT(AA);*)

```

```

FOR I:=1 TO M DO
BEGIN
FOR J:=1 TO M DO AA1[I,J]:=AA[J,I];
END;

```

```

PRODUIT(ID,AA,AA1,M,M,M);
TRANSPOSE(QTR,AA,M,M);

```

```

(*WRITELN;WRITELN;WRITELN('ORTHOGONALITE ? ');
WRITELN('***** ');
ECRIT(ID);
WRITELN;WRITELN;
WRITELN;
WRITELN('TRIANG SUP');
L:=9;C:=3;
ECRIT(R1);*)

```

```

(*WRITELN;WRITELN('LA MATRICE INITIALE : ');
WRITELN('***** ');

```

```

PRODUIT(R2,AA,R1,M,M,N);
L:=9;
C:=3;

```

```

ECRIT(R2);*)
L:=9;C:=3;

```

```

INVERSION(RINV,R1,N);

```

```

L:=N;
C:=N;
(*WRITELN('INVERSE DE LA MATRICE TRIANGULAIRE SUPERIEUR');

```

```

(*)
(*PRODUIT(PA,R1,RINV,N,N,N);
WRITELN('VERIFICATION ?');
WRITELN('*****');
ECRIT(PA);*)

```

```

TRANPOSE(TRINV,RINV,N,N);
(*WRITELN('MATRICE TRANSPOSEE ');
WRITELN('*****');
L:=N;
C:=N;
ECRIT(TRINV);
*)
FOR I:=1 TO 9 DO
BEGIN
FOR J:=1 TO 3 DO
BEGIN
FOR K:=1 TO 3 DO
BEGIN
TAB1A[I,J,K]:=0;
FOR KK:=1 TO 3 DO
TAB1A[I,J,K]:=TAB1A[I,J,K]+TRINV[J,KK]*TAB[I,KK,K];
END;
END;
END;
WRITELN('TAB1A');
(*ECRIT1(TAB1A);*)

```

```

FOR I:=1 TO 9 DO
BEGIN
FOR J:=1 TO 3 DO
BEGIN
FOR K:=1 TO 3 DO
BEGIN
TAB1[I,J,K]:=0;
FOR KK:=1 TO 3 DO
TAB1[I,J,K]:=TAB1[I,J,K]+TAB1A[I,J,KK]*RINV[KK,K];
END;
END;
END;
WRITELN('MATRICE TAB1');
(*ECRIT1(TAB1);*)

```

```

(*TRANSPOSITION DE LA MATRICE ORTHOGONALE Q *)
TRANPOSE(QTR,AA,M,M);

```