

École Centrale de Lyon  
TFE 2018

Laboratoire d'Automatique et de Génie des Procédés  
Lyon

## Rapport Final de Travail de Fin d'Études

Algorithme d'estimation pour une EDP hyperbolique décrivant  
un procédé de cristallisation

*BRIVADIS Lucas*

Option : Mathématiques et Décision  
Filière : Mathématiques et Ingénierie du Risque  
Métier : Ingénieur Recherche Innovation et Développement

Tuteurs :

ECL : VIAL Grégory  
Entreprise : ANDRIEU Vincent  
CHABANON Élodie  
GAGNIÈRE Émilie  
SERRES Ulysse



**Année 2017-2018**

---

Ce formulaire est à insérer après la page de garde du rapport. Il atteste que le rapport a été validé par l'entreprise et peut être communiqué en l'état au Service de la Scolarité de l'École Centrale de Lyon.

**VALIDATION DU RAPPORT DE TFE**

**PAR L'ENTREPRISE**

**Références du Travail de Fin d'Études**

Nom de l'élève : BRIVADIS Lucas

Titre du rapport : Algorithme d'estimation pour une EDP hyperbolique décrivant un procédé de cristallisation

Entreprise : Laboratoire d'Automatique et de Génie des Procédés

Nom du Tuteur entreprise : ANDRIEU Vincent

Nom du Tuteur ECL : VIAL Grégory

---

L'entreprise reconnaît avoir pris connaissance du rapport mentionné ci-dessus et autorise sa transmission à l'École Centrale de Lyon.

- L'entreprise autorise la diffusion du rapport sur internet
- L'entreprise demande une limitation de la diffusion à l'intranet de l'Ecole Centrale  
(*raayer la mention inutile*)

Le représentant de l'entreprise :

Nom :  
Fonction :

Date :  
Signature et cachet :



**Academic year 2017-2018**

---

This form should be placed after the title page of the Report. It certifies that the Report has been validated by the firm and can be submitted as it stands to the Registrar's Department of Centrale Lyon.

**COMPANY VALIDATION OF FYI REPORT**

Final Year Internship references

Student's name : BRIVADIS Lucas

Report title : Estimation algorithm for a hyperbolic PDE describing a crystallization process

Firm : Laboratoire d'Automatique et de Génie des Procédés

Name of Company tutor : ANDRIEU Vincent

Name of School tutor : VIAL Grégory

---

The firm acknowledges awareness of the above Report and authorizes transmission to Centrale Lyon.

- The company authorizes the release of the report on the internet
- ~~The company authorizes the release of the report exclusively on the intranet~~  
*(Strike out inapplicable part)*

Firm's representative :

Name :

Position :

Date :

Signature and stamp :



## **Remerciements**

Je tiens à remercier ceux qui m'ont accompagné tout au long de ce stage : Vincent Andrieu, Élodie Chabanon, Émilie Gagnière, Ulysse Serres ainsi que Noureddine Lebaz. Merci de l'attention que vous m'avez porté et de la bienveillance avec laquelle vous m'avez accueilli au sein du LAGEP. Travailleur avec vous est un plaisir et une chance, et je me réjouis à présent d'entamer mon doctorat aux côtés de Vincent, Ulysse et Jean-Paul Gauthier.

Je profite également de ce rapport pour remercier Grégory Vial, qui a su m'aiguiller dans mes choix tout au long de ma scolarité à l'ECL, et m'a permis de m'épanouir pleinement dans cette école et d'atteindre les objectifs que je m'étais fixés.

## Résumé du rapport

Au cours d'un procédé de cristallisation dans un réacteur fermé, le contrôle et l'estimation en ligne de la distribution en taille des cristaux (DTC) sont d'une importance capitale notamment pour l'industrie chimique et pharmaceutique. Dans ce rapport, une étude mathématique d'un modèle du procédé est menée afin de réaliser un algorithme d'estimation en ligne de la DTC. Nous basons nos méthodes sur deux types de mesure : la concentration en solide dans le réacteur et la sonde FBRM®. Pour la première, notre algorithme se base sur la réalisation d'un observateur de type Luenberger en dimension infinie, puis sur la méthode de Tikhonov. Nous démontrons que cette mesure n'apporte pas suffisamment d'informations, à la fois théoriquement et par des simulations. L'un de nos principaux résultats est la non observabilité du système couplé avec cette mesure. Nous modélisons, par une analyse probabiliste, la mesure effectuée par la technologie FBRM® comme la mesure de la distribution en taille des cordes. Nous mettons en place un algorithme efficace basé sur cette mesure et le testons sur des données simulées et expérimentales. Enfin, nous suggérons une piste pour la réalisation d'un observateur faible basé sur la FBRM®.

**Mots-clés :** Cristallisation ; Observabilité ; Distribution en taille des cristaux ; Distribution en longueur de cordes ; FBRM ; Équation de transport ; Observateur de Luenberger ; Méthode de Tikhonov

## **Abstract**

During a batch crystallization process, the on-line control and estimation of the particle size distribution (PSD) is critically important for the chemical and pharmaceutical industry. In this report, a mathematical analysis of a model of the process is carried out to implement an on-line PSD estimation algorithm. Our methods are based on two different kinds of measures : the solid concentration in the reactor and the FBRM® technology. Using the first, an algorithm based on an infinite dimensional Luenberger observer and on the Tikhonov regularisation method is implemented. We demonstrate, theoretically and with simulations, that this measure does not provide enough informations. One of our main result is the non observability of the control system for this output. We modelize, with a probabilistic analysis, the FBRM® technology as the measure of the chord length distribution (CLD). We implement an efficient algorithm based on this measure and test it on simulated and experimental data. Finally, we put forward a track to explore to make an FBRM® based weak observer.

**Keywords :** Crystallization ; Observability ; Particle size distribution ; Chord length distribution ; FBRM ; Transport equation ; Luenberger observer ; Tikhonov method

## Table des matières

<b>Remerciements</b>	<b>1</b>
<b>Notations</b>	<b>7</b>
<b>Introduction</b>	<b>8</b>
<b>1. Cahier des charges et stratégie choisie</b>	<b>10</b>
1.1. Contexte du stage . . . . .	10
1.2. Cahier des charges . . . . .	10
1.3. Stratégie mise en place . . . . .	11
<b>2. Préliminaires théoriques</b>	<b>12</b>
2.1. Introduction à la théorie du contrôle . . . . .	12
2.1.1. Autour de la notion d'observabilité . . . . .	12
2.1.2. Observateur de Luenberger pour les systèmes linéaires en dimension finie . . . . .	13
2.2. Introduction aux problèmes inverses . . . . .	14
2.2.1. Équation intégrale . . . . .	14
2.2.2. Méthode de régularisation de Tikhonov . . . . .	15
<b>3. Modélisation du procédé de cristallisation</b>	<b>17</b>
3.1. Bilan de population . . . . .	17
3.2. Caractère bien posé du problème . . . . .	18
3.2.1. Cas de l'équation de transport à vitesse constante . . . . .	18
3.2.2. Approche par changement de temps . . . . .	20
3.2.3. Approche directe . . . . .	22
3.3. Propriétés de la solution . . . . .	24
3.4. Conclusion . . . . .	24
<b>4. Observateur de Luenberger basé sur la concentration en solide</b>	<b>25</b>
4.1. Mesure de la concentration en solide . . . . .	25
4.2. Mise en place de l'observateur . . . . .	26
4.2.1. Estimation de $G$ . . . . .	27
4.2.2. Existence et unicité de $a$ . . . . .	27
4.2.3. Inversion de $T$ . . . . .	28
4.3. Analyse de l'injectivité de la mesure . . . . .	28
4.3.1. Non observabilité de la mesure en concentration . . . . .	29
4.3.2. Non injectivité de $(z_0, u) \mapsto y$ . . . . .	31
4.3.3. Injectivité de $u \mapsto y$ pour $z_0 = 0$ . . . . .	33
4.3.4. Non injectivité de $(z_0, u, G) \mapsto y$ . . . . .	36
4.4. Simulations numériques . . . . .	38
4.4.1. Simulation de l'équation de transport . . . . .	38
4.4.2. Approximation de l'observateur . . . . .	39

4.4.3. Reconstruction de l'état . . . . .	41
4.5. Conclusion . . . . .	47
<b>5. Exploitation de la technologie FBRM®</b>	<b>48</b>
5.1. Principe de la technologie FBRM® . . . . .	48
5.2. Distribution en longueur de cordes . . . . .	50
5.3. Mise en œuvre de la méthode de Tikhonov . . . . .	54
5.4. Résultats numériques . . . . .	55
5.4.1. Données obtenues en simulation . . . . .	56
5.4.2. Données expérimentales . . . . .	56
5.5. Analyse théorique de la méthode FBRM® . . . . .	63
5.5.1. Non observabilité de la FBRM® . . . . .	63
5.5.2. Injectivité de la FBRM® . . . . .	63
5.6. Conclusion . . . . .	66
<b>Conclusion</b>	<b>68</b>
<b>A. Introduction à la cristallisation</b>	<b>69</b>
A.1. Solubilité et sursaturation . . . . .	69
A.2. Germination et croissance . . . . .	70
<b>B. Vérification du modèle de la FBRM®</b>	<b>72</b>
B.1. Protocole expérimental . . . . .	72
B.2. Résultats . . . . .	72
<b>C. Injectivité de la FBRM® sur les fonctions constantes par morceaux</b>	<b>75</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>77</b>

## Table des figures

4.1.	Graphe de $z_0^n$ .	30
4.2.	Condition au bord de l'équation de transport.	39
4.3.	Approximation numérique de la solution de l'équation de transport.	40
4.4.	Approximation numérique de la mesure $y$ .	41
4.5.	Évolution de l'écart entre $Tz$ et $\zeta$ .	42
4.6.	Reconstruction de $z$ à $t$ fixé.	45
4.7.	Reconstruction globale de $z$ .	46
5.1.	Schéma de principe de la sonde FBRM®.	49
5.2.	Graphe de $k$ à $\ell$ fixé.	51
5.3.	Calcul de la probabilité qu'une corde d'une sphère de rayon $r$ soit de longueur inférieure ou égale à $\ell$ .	52
5.4.	Calcul de la probabilité que le laser de la sonde FBRM® traverse une sphère de rayon $r$ .	53
5.5.	Évolution de la distribution en taille des cordes associée à la DTC simulée en Figure 4.3.	56
5.6.	Évolution au cours des expériences LG34 et LG39 de la concentration en solide.	57
5.7.	Évolution au cours de l'expérience LG34 de la distribution en taille des cordes.	59
5.8.	Évolution au cours de l'expérience LG39 de la distribution en taille des cordes.	60
5.9.	Reconstruction en ligne de la DTC pour l'expérience LG34.	61
5.10.	Reconstruction en ligne de la DTC pour l'expérience LG39.	62
A.1.	État du système en fonction de la concentration en soluté et de la température en milieu isobare.	70
B.1.	Distributions en taille des particules et des cordes dans le mélange pour des billes de $30 \mu\text{m}$ de rayon.	73
B.2.	Distributions en taille des particules et des cordes dans le mélange pour des billes de $300 \mu\text{m}$ de rayon.	74

## Notations

### Abréviations

DTC	Distribution en Taille des Cristaux
FBRM	Focused Beam Reflectance Measurement (mesure de la réflectance du faisceau focal)

### Notations mathématiques générales

$E'$	espace dual de $E$
$E^\perp$	orthogonal de $E$
$\langle \cdot, \cdot \rangle_E$	produit scalaire sur $E$
$\  \cdot \ _E$	norme sur $E$
$\text{id}_E$	opérateur identité sur $E$
$\text{Im } K$	image de l'opérateur $K$
$\ker K$	noyau de l'opérateur $K$
$\text{rg } K$	rang de l'opérateur $K$
$\mathcal{D}(K)$	domaine de l'opérateur $K$
$K^{-1}$	inverse de l'opérateur $K$
$\text{supp } f$	support de la fonction $f$
$f^{(n)}$	dérivée n-ième de la fonction $f$
$\mathbb{1}_\Omega$	fonction indicatrice de $\Omega$
$\overline{\Omega}$	adhérence de $\Omega$
$\mathbb{P}(A)$	probabilité de l'évènement $A$
$\mathbb{E}(X)$	espérance de la variable aléatoire $X$
$\partial_x$	dérivée partielle par rapport à $x$
$\dot{z}$	dérivée de $z$ par rapport à la variable temporelle
$\text{diag}(a_1, \dots, a_n)$	matrice diagonale ou diagonale par blocs dont la diagonale est $a_1, \dots, a_n$

### Espaces fonctionnels

$\Omega$	ouvert de $\mathbb{R}^n$
$E$	espace vectoriel, $\mathbb{R}$ si non précisé
$L^p(\Omega)$	$= \{f : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \text{ mesurable} / \int_{\Omega}  f ^p < +\infty\}$
$H^m(\Omega)$	espace de Sobolev sur $\Omega$ d'ordre $(m, 2)$
$C(\Omega; E)$	fonctions continues sur $\Omega$ à valeurs dans $E$
$C^k(\Omega; E)$	fonctions $k$ fois continûment dérivables sur $\Omega$ à valeurs dans $E$
$C^\infty(\Omega; E)$	$= \bigcap_{k \in \mathbb{N}} C^k(\Omega; E)$
$C(\overline{\Omega}; E)$	fonctions continues sur $\overline{\Omega}$ à valeurs dans $E$
$C^k(\overline{\Omega}; E)$	restrictions à $\overline{\Omega}$ des fonctions de $C^k(\mathbb{R}^n; E)$
$C^\infty(\overline{\Omega}; E)$	$= \bigcap_{k \in \mathbb{N}} C^k(\overline{\Omega}; E)$
$\mathbb{R}_n[x]$	espace des fonctions polynomiales de degré inférieur ou égal à $n$
$\mathcal{L}(E, F)$	espace des opérateurs linéaires continus de $E$ dans $F$

## Introduction

Le procédé de cristallisation est d'une importance capitale pour l'industrie chimique et pharmaceutique, car la plupart des composés utilisés ou produits sont sous forme solide. Les cristaux ainsi formés se doivent donc de respecter des caractéristiques précises. En particulier, la distribution en taille des cristaux (DTC) est un paramètre important. Dans la plupart des cas, une fois les cristaux générés, ils subissent une étape de broyage afin d'uniformiser leur taille. Un enjeu important pour l'industrie serait d'être capable d'éviter ou au moins de limiter cette étape coûteuse, et donc de produire directement des cristaux ayant une distribution en taille prédéfinie.

Pour parvenir à cela, il faut être capable de déterminer la DTC à chaque instant durant le procédé de cristallisation. Malheureusement, il n'existe pas de capteurs physiques permettant de mesurer cette distribution en temps réel. Il est cependant possible de mesurer des quantités liées, comme la concentration en solide du mélange ainsi que la distribution en longueur de cordes. Est-il possible, à partir de ces informations, de déterminer en ligne la DTC ? C'est à cette question que nous tentons de répondre, en nous basant sur un modèle du procédé de cristallisation. L'objectif de ce stage est donc de concevoir un algorithme capable d'estimer en ligne (« *in situ* ») la DTC au cours d'un procédé de cristallisation en réacteur fermé (« *batch* »).

Dans le premier chapitre de ce rapport, nous présentons le contexte du stage, définissons le cahier des charges et présentons la stratégie mise en place pour répondre aux objectifs fixés. Ce chapitre permet de comprendre les enjeux du sujet sans rentrer dans les détails techniques qui seront présentés dans les chapitres suivants.

Dans le Chapitre 2, nous introduisons des notions théoriques utiles pour le travail présenté autour de la théorie du contrôle et des problèmes inverses. Les théorèmes sont cités sans démonstrations, mais des références bibliographiques permettent de trouver ces dernières dans la littérature. Ils pourront être utilisés dans les chapitres suivants. L'introduction de la Section 2.1 permet de comprendre le contexte général de la théorie du contrôle.

Le Chapitre 3 s'attache à décrire le modèle dynamique d'un procédé de cristallisation et à vérifier le caractère bien posé de ce modèle. La Section 3.1 permet de comprendre la modélisation du procédé et l'origine du système dynamique à étudier. Dans les sections suivantes, un travail d'analyse fonctionnelle est mené afin d'analyser précisément ce système.

Les Chapitres 4 et 5 constituent le cœur du rapport. Dans chacun de ces chapitres, nous tentons de mettre au point un algorithme répondant aux objectifs du stage essentiellement basé sur un type de mesure physique : la mesure de la concentration en solide dans le Chapitre 4 et la sonde FBRM® dans le Chapitre 5. Dans le Chapitre 5, un important travail de modélisation stochastique de la mesure effectuée par la sonde est également mis en place. Trois sections s'ajoutent ensuite dans ces chapitres : une étape de description

de la méthode employée par l'algorithme pour estimer en ligne la DTC (Sections 4.2 et 5.3), une étape d'analyse mathématique de la méthode (Sections 4.3 et 5.5) et une étape de test numérique (Sections 4.4 et 5.4).

## 1. Cahier des charges et stratégie choisie

### 1.1. Contexte du stage

Le stage se déroule au sein du Laboratoire d'Automatique et de Génie des procédés (LAGEP, UMR CNRS 5007), et résulte de la collaboration entre deux équipes : l'équipe PES (Procédés d'Élaboration du Solide) spécialisée en génie des procédés, notamment de cristallisation, et l'équipe SNLEP (Systèmes Non Linéaires de Procédés) spécialisée en mathématiques appliquées et en théorie du contrôle. Il s'inscrit dans le cadre d'un projet PEPS CNRS. Il est coencadré par :

- Vincent Andrieu, CR-CNRS, SNLEP,
- Élodie Chabanon, MCU, PES,
- Émilie Gagnière, MCU, PES,
- Ulysse Serres, MCU, SNLEP.

Le travail autour de la sonde FBRM® s'est déroulé en collaboration avec Noureddine Lebaz, MCU, PES. Enfin, un échange avec Jean-Paul Gauthier (professeur émérite à l'université de Toulon) a fortement contribué aux perspectives de construction d'un observateur basé sur la FBRM®. Nécessitant essentiellement des compétences en mathématiques appliquées, le stage a néanmoins permis de travailler en collaboration avec des chercheurs en automatique et en génie des procédés.

### 1.2. Cahier des charges

L'objectif principal de ce stage est de mettre en place une procédure algorithmique capable de déterminer en ligne la DTC dans un réacteur fermé de cristallisation. À ce titre, le livrable attendu (ce rapport) contient à la fois une analyse théorique des problèmes rencontrés et des méthodes proposées, et une description des procédures algorithmiques suggérées pour répondre à l'objectif. Précisons dans cette section les principaux objectifs que notre algorithme doit remplir.

**Estimation de la DTC :** L'algorithme doit proposer une estimation de la DTC dans un réacteur fermé la plus proche possible de la réalité. Afin de mesurer la qualité de l'estimation, nous testerons l'algorithme de deux façons. Dans un premier temps, sur une simulation d'un procédé de cristallisation obtenue via un modèle macroscopique de ce procédé. Dans un second temps, et uniquement si le premier test est concluant, sur des données réelles obtenues expérimentalement au sein du laboratoire.

**Données d'entrée :** Pour estimer la DTC, l'algorithme ne dispose que d'un nombre restreint d'informations, fournies par des capteurs physiques au cours de la cristallisation. Nous considérons dans notre approche deux types de mesure : une mesure de la concentration en solide dans le réacteur, qui pourra être en ligne ou hors ligne, et une mesure en ligne fournie par une sonde FBRM®.

**Réponse en ligne :** L'algorithme doit être capable de traiter les données et d'estimer la DTC en temps réel au cours d'une expérience de cristallisation. L'objectif à terme étant le contrôle de la DTC, il est crucial que l'estimation se fasse à une fréquence la plus élevée possible par rapport à la durée de l'expérience.

### 1.3. Stratégie mise en place

Pour parvenir à répondre au cahier des charges, présentons succinctement la stratégie mise en place. Dans un premier temps, un important travail bibliographique est nécessaire autour de la théorie du contrôle afin de comprendre et formuler le problème dans un contexte mathématique précis, efficace et général. Ce travail s'effectue également en collaboration avec des chercheurs en génie des procédés, afin de s'assurer que les hypothèses et les modèles choisis sont ceux classiquement utilisés dans le domaine.

S'ajoute ensuite une documentation sur les instruments de mesures à notre disposition : la mesure de la concentration en solide dans la première partie du stage, puis la sonde FBRM® par la suite. Une analyse théorique de ces mesures est ensuite menée, afin de les exploiter avec des outils appropriés, comme les problèmes inverses ou l'observateur de Luenberger, en vue de la réalisation de notre algorithme. Les principaux théorèmes obtenus sont présentés dans ce rapport.

Enfin, si l'analyse théorique est concluante, nous implémentons l'algorithme qui en découle dans le langage MATLAB® afin de le tester. Deux types de tests sont mis en œuvre : des tests sur des données simulées, et des tests sur des données expérimentales. Les simulations sont basées sur un modèle classique du procédé de cristallisation. Les données expérimentales proviennent de manipulations effectuées par le passé au sein du laboratoire. Au cours du stage, différents algorithmes ont pu être mis en place et testés. Ils sont donc comparés en fonction de leur réponse aux principaux objectifs présentés dans le cahier des charges.

## 2. Préliminaires théoriques

Dans cette partie, nous exposons différents éléments théoriques utilisés dans la suite du rapport. Nous nous focaliserons d'abord sur la théorie du contrôle et introduirons certains des concepts clés de ce domaine. Nous rappellerons ensuite quelques résultats utiles pour la résolution de problèmes inverses.

### 2.1. Introduction à la théorie du contrôle

Dans cette section, nous proposons une introduction à la théorie du contrôle basée sur l'ouvrage de B. Jacob et H. Zwart [JZ12]. Considérons un modèle d'un système dynamique que l'on cherche à étudier. Notons  $z$  la grandeur physique d'intérêt décrite par le modèle. On dira que  $z$  est l'état du système. Ajoutons à ce modèle un signal d'entrée  $u$ , également appelé commande ou contrôle, qui agit sur la dynamique de  $z$ , et un signal de sortie  $y$ , également appelé mesure ou observation, déterminé par l'état du système.

*Exemple 2.1.1.* Considérons par exemple une masse  $m$  connue de l'utilisateur soumise à une force  $u$  sur laquelle l'utilisateur du système peut agir. Notons  $z = (q, v)$  le couple (position, vitesse) de la masse, de sorte que  $v = \dot{q}$ . La seconde loi de Newton nous permet d'écrire le système dynamique auquel est soumis  $z$  :

$$u = m\ddot{q}.$$

La question peut alors se poser de savoir s'il est possible de choisir  $u$  de façon à faire atteindre à la masse une position particulière, ou à la faire se déplacer d'une certaine façon, ou en satisfaisant certaines contraintes : c'est la question de la contrôlabilité. Pour contrôler le système, il sera généralement nécessaire de connaître l'état ou une partie de l'état, et donc de procéder à une observation.

Supposons par exemple que l'on dispose d'un capteur de position. La mesure disponible est alors  $y = q$ . La mesure permet donc de reconstruire tout l'état  $z$  via la relation  $z = (q, v) = (y, \dot{y})$ . Supposons au contraire que l'on dispose d'un capteur de vitesse. La mesure disponible est alors  $y = v$ , et cette mesure ne permet pas a priori de reconstruire  $z$ , puisque  $z(t) = (q(0) + \int_0^t y, y(t))$  et que  $q(0)$  est a priori inconnu. Ainsi se pose la question de l'observabilité : est-il possible, à partir de la connaissance de  $y$ , de déterminer  $z$  ?

Dans la suite de notre étude, on s'intéressera essentiellement à la question de l'observabilité pour différentes mesures sur un même système.

#### 2.1.1. Autour de la notion d'observabilité

Introduisons la notion d'observabilité de façon plus précise que dans la section précédente. Nous adoptons ici une version moins formelle de la définition proposée par M. Tucsnak et G. Weiss dans [TW09]. Soit  $X, Y$  deux espaces vectoriels normés. Soit  $F \in \mathcal{L}(X, X)$ ,  $H \in \mathcal{L}(X, Y)$  deux opérateurs linéaires continus. Pour tout  $z_0 \in X$ ,

considérons le système dynamique

$$\begin{cases} \dot{z} = Fz \\ z(0) = z_0 \\ y = Hz. \end{cases} \quad (2.1)$$

Soit  $\tau > 0$ . Considérons l'application  $\Psi_\tau : z_0 \mapsto y|_{[0,\tau]}$ , appelé opérateur de mesure, ou opérateur d'observation. La question de l'observabilité au temps  $\tau$  est liée à l'injectivité de  $\Psi_\tau$  : est-il possible de déterminer un unique  $z_0$  correspondant à la valeur mesurée par  $y$  jusqu'à l'instant  $\tau$ ? Afin de pouvoir mettre en place une procédure algorithmique robuste capable de reconstruire  $z_0$  à partir de  $y$ , la continuité du pseudo-inverse de  $\Psi_\tau$  (c'est-à-dire l'inverse de  $\Psi_\tau|_{\text{Im } \Psi_\tau}$ , la co-restriction de  $\Psi_\tau$  à  $\text{Im } \Psi_\tau$ ), qui existe dès lors que  $\Psi_\tau$  est injective, est également une question fondamentale. En effet, si cet opérateur n'est pas continu, une petite perturbation de  $y$  peut entraîner une grande perturbation sur son antécédent par  $\Psi_\tau$ . Or  $y$  est toujours soumis à un bruit de mesure. Pour toutes ces raisons, on dira que le système (2.1) (ou, de manière équivalente, que le couple  $(F, H)$ ) est exactement observable au temps  $\tau > 0$  si et seulement si  $\Psi_\tau$  est inférieurement bornée.

**Définition 2.1.2.** Le système (2.1) est dit exactement observable au temps  $\tau > 0$  si et seulement il existe  $k_\tau > 0$  tel que

$$\forall z_0 \in X, \int_0^\tau \|\Psi_\tau(z_0)\|_Y^2 dt \geq k_\tau \|z_0\|_X^2. \quad (2.2)$$

Après s'être assuré de l'observabilité d'un système pour une certaine mesure, le problème de la reconstruction efficiente de l'état à partir de la mesure se pose. Dans la partie suivante, nous exposons une stratégie envisageable, basée sur un observateur, pour parvenir à cet objectif.

### 2.1.2. Observateur de Luenberger pour les systèmes linéaires en dimension finie

Soit  $n, p \in \mathbb{N}^*$ . On considère le système dynamique linéaire en dimension finie suivant :

$$\begin{cases} \dot{z} = Fz \\ z(0) \in \mathbb{R}^n \\ y = Hz. \end{cases} \quad (2.3)$$

où  $z \in \mathbb{R}^n$  représente l'état du système,  $y \in \mathbb{R}^p$  la mesure,  $F \in \mathbb{R}^{n \times n}$  et  $H \in \mathbb{R}^{n \times p}$ .

L'objectif de la méthode introduite par Luenberger dans [Lue64] est de reconstruire l'état à partir de la mesure via un observateur. On procède pour cela en deux étapes.

**Étape 1 :** On cherche à reconstruire une transformation linéaire  $Tz$  de l'état. Pour  $m \in \mathbb{N}^*$ ,  $A \in \mathbb{C}^{m \times m}$ ,  $B \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^p, \mathbb{C}^{m \times p})$ , on considère le système suivant :

$$\begin{cases} \dot{\zeta} = A\zeta + By \\ \zeta(0) \in \mathbb{C}^{m \times p}. \end{cases} \quad (2.4)$$

pour  $\zeta \in \mathbb{C}^{m \times p}$ . Soit  $T \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^n, \mathbb{C}^{m \times p})$ .

**Théorème 2.1.3.** Si  $TF = AT + BH$  où  $A$  est une matrice de Hurwitz (i.e. telle que toutes ses valeurs propres ont une partie réelle strictement négative), alors  $\zeta - Tz \xrightarrow{+∞} 0$ .

*Démonstration.* Supposons que  $TF = AT + BH$  et que  $A$  est de Hurwitz. On a alors :

$$\begin{aligned}\widehat{\zeta - Tz} &= A\zeta + By - ATz - BHz \\ &= A(\zeta - Tz).\end{aligned}$$

Or  $A$  est Hurwitz, donc  $(\zeta - Tz)(t) \xrightarrow[t \rightarrow +\infty]{} 0$ . □

**Étape 2 :** On cherche à inverser  $T$  pour obtenir une approximation de  $z$ . En particulier, si  $T$  est injective, posons  $T^- = (T|_{\text{Im } T})^{-1} \in \mathcal{L}(\text{Im } T, \mathbb{R}^n)$  l'inverse de la co-restriction de  $T$  à son image. Comme  $T^-$  est linéaire et continue sur  $\text{Im } T \subset \mathbb{C}^{m \times p}$ , d'après le théorème de Hahn-Banach,  $T^-$  admet un prolongement linéaire et continu sur  $\mathbb{C}^{m \times p}$  de même norme, que l'on notera encore  $T^- \in \mathcal{L}(\mathbb{C}^{m \times p}, \mathbb{R}^n)$ . Dès lors, on obtient en posant  $\hat{z} = T^- \zeta$  :

$$(\hat{z} - z)(t) \xrightarrow[t \rightarrow +\infty]{} 0.$$

Dans la Section 4.2, nous tenterons d'introduire un observateur de Luenberger pour reconstruire l'état du système qui nous intéressera.

## 2.2. Introduction aux problèmes inverses

Introduisons dans cette section certains concepts liés à la résolution de problèmes inverses dont nous aurons besoin par la suite (à partir de la Section 4.2.3). Les théorèmes cités sont des résultats classiques sur les problèmes inverses. Ils sont issus de la référence [Ker02].

### 2.2.1. Équation intégrale

Soit  $E, F$  deux espaces de Hilbert. Soit  $K \in \mathcal{L}(E, F)$ . On s'intéresse à la résolution du problème inverse

$$K\varphi = f. \tag{2.5}$$

où l'inconnue  $\varphi \in E$  est à déterminer en fonction de l'opérateur  $K$  et du second membre  $f \in F$ . Dans cette partie, on cite les résultats théoriques d'existence et d'unicité de solutions, tandis que dans la partie suivante, nous proposerons une méthode de résolution de ce problème. Clairement, ce problème ne peut admettre de solutions que si  $f \in \text{Im } K$ . Cette condition est trop restrictive, car la donnée  $f$  peut être bruitée. On remplace donc le problème (2.5) par le problème aux moindres carrés (2.6)

$$\underset{\varphi \in E}{\operatorname{argmin}} \|K\varphi - f\|_F^2. \tag{2.6}$$

On peut alors montrer que si  $K$  est bijectif, alors l'unique solution  $\varphi = K^{-1}f$  de (2.5) est également l'unique solution du problème (2.6). De plus, on a les théorèmes suivants sur le problème (2.6).

**Théorème 2.2.1** (Unicité, [Ker02, Lemme 4.1]). *Si  $K$  est injectif, le problème (2.6) admet au plus une solution.*

**Théorème 2.2.2** (Existence, [Ker02, Proposition 4.1]). *Le problème (2.6) admet au moins une solution si et seulement si  $f \in (\text{Im } K) \oplus (\text{Im } K)^\perp$ .*

**Théorème 2.2.3** (Solution de norme minimale, [Ker02, Proposition 4.1 et Corollaire 4.1]). *Si  $f \in (\text{Im } K) \oplus (\text{Im } K)^\perp$ , alors*

- *l'ensemble des solutions du problème (2.6) est un ensemble fermé, convexe et non vide.*
- *(2.6) admet une unique solution de norme minimale.*

Dans la suite de ce rapport, on fera appel à ces théorèmes dans le cas particulier où  $K$  est un opérateur à noyau. Soit  $(a, b, c, d) \in \mathbb{R}^4$  tels que  $b > a$  et  $d > c$ . Soit  $k \in L^2([c, d] \times [a, b])$ .

**Théorème 2.2.4** ([Ker02, Théorèmes 3.1 et 3.2]). *L'opérateur*

$$K : \begin{cases} L^2(a, b) & \longrightarrow L^2(c, d) \\ \varphi & \longmapsto x \mapsto \int_a^b k(x, y)\varphi(y)dy \end{cases}$$

*est un opérateur linéaire, continu et compact. On dira que  $K$  est un opérateur intégral de première espèce de noyau  $k$ .*

Remarquons que si  $E$  et  $F$  sont de dimension infinie, et si  $K$  est compact, le problème (2.5) est mal posé même lorsque que  $K$  est inversible. En effet, l'inverse d'un opérateur compact n'est pas continu, car sinon l'identité  $\text{id} = KK^{-1}$  serait compacte et donc la boule unité le serait.

## 2.2.2. Méthode de régularisation de Tikhonov

Nous exposons dans cette partie les bases d'une méthode classique pour la résolution de problèmes inverses mal posés : la méthode de régularisation de Tikhonov. Soit  $\delta > 0$ , appelé coefficient de régularisation. La méthode consiste à remplacer le problème (2.6) par le problème régularisé

$$\underset{\varphi \in E}{\operatorname{argmin}} \|K\varphi - f\|_F^2 + \delta^2 \|\varphi - \varphi_0\|_E^2. \quad (2.7)$$

où  $\varphi_0 \in E$  est une estimation a priori de  $\varphi$ . Si on ne dispose pas d'estimation a priori, on pose  $\varphi_0 = 0$ . On peut alors montrer que ce nouveau problème est bien posé.

**Théorème 2.2.5** ([Ker02, Proposition 6.1]). *Le problème (2.7) admet une unique solution, qui dépend continûment de  $f$ .*

Le choix du paramètre de régularisation  $\delta$  est crucial pour appliquer cette méthode : en effet, si  $\delta \rightarrow +\infty$ , alors la solution de (2.7) tend vers 0, et si  $\delta \rightarrow 0$ , alors le problème (2.7) se rapproche du problème (2.6) et est donc mal posé. Un compromis doit donc être fait. En pratique,  $\delta$  sera choisi expérimentalement lors des simulations numériques pour assurer ce compromis. On a toutefois le résultat théorique suivant :

**Théorème 2.2.6** ([Ker02, Théorème 6.1]). Soit  $f \in \text{Im } K$ . Soit  $\varphi_0 \in E$ . Soit  $\varphi$  la solution de (2.6) la plus proche de  $\varphi_0$ . Soit  $(f_n)_{n \in \mathbb{N}} \in F^{\mathbb{N}}$  telle que  $f_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} f$ . Pour tout  $n \in \mathbb{N}$ , soit  $\varepsilon_n = \|f_n - f\|$ . On a alors  $\varepsilon_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} 0$ . Soit  $(\delta_n)_{n \in \mathbb{N}} \in (\mathbb{R}_+^*)^{\mathbb{N}}$  une suite de coefficients de régularisation tels que  $\delta_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} 0$ . Pour chaque  $n \in \mathbb{N}$ , soit  $\varphi_n$  la solution du problème (2.7) associée au second membre  $f_n$  et au coefficient de régularisation  $\delta_n$ . Alors :

- $\|K\varphi_n - f_n\| \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} 0$  ;
- $\frac{\varepsilon_n}{\delta_n} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} 0 \quad \Rightarrow \quad \|K\varphi_n - f_n\| = \mathcal{O}(\varepsilon_n) \quad \text{et} \quad \varphi_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} \varphi$ ;
- $\frac{\varepsilon_n}{\delta_n^2} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} 0, \varphi \in \text{Im } K^* \quad \Rightarrow \quad \|K\varphi_n - f_n\| = \mathcal{O}(\varepsilon_n^2) \quad \text{et} \quad \|\varphi_n - \varphi\| = \mathcal{O}(\varepsilon_n)$ .

### 3. Modélisation du procédé de cristallisation

Afin d'étudier mathématiquement le problème de l'observabilité au cours du temps d'un procédé de cristallisation, il nous faut dans un premier temps déterminer un modèle de ce procédé. Nous nous basons pour cela sur le travail développé dans [Ucc11], en raisonnant sur des équations de bilan. Une fois le modèle déterminé, nous montrerons le caractère bien posé du problème direct, i.e. l'existence et l'unicité de la solution du modèle. Deux approches sont proposées pour parvenir à ce résultat.

#### 3.1. Bilan de population

Dans un premier temps, il nous faut construire un modèle du procédé de cristallisation. Nous nous basons pour cela essentiellement sur la thèse [Ucc11] réalisée par B. Uccheddu. Supposons que les cristaux sont sphériques, ou du moins que leur géométrie est describable par un unique paramètre  $x$  (appelé taille du cristal) tel que le volume d'un cristal paramétrisé par  $x$  vérifie  $V = k_v x^3$  où  $k_v$  est une constante liée à la géométrie des cristaux ( $k_v = \frac{4\pi}{3}$  si les cristaux sont sphériques). Notons  $z(t, \cdot)$  la distribution en taille des cristaux (DTC) à l'instant  $t$ , de sorte que  $\int_{x_1}^{x_2} z(t, x) dx$  représente le nombre de cristaux dans le réacteur ayant une taille comprise entre  $x_1$  et  $x_2$  à l'instant  $t$ . Soit  $[t_0, t_1]$  la plage de temps sur laquelle se déroule la cristallisation.

Nous supposons que les cristaux n'atteignent jamais une certaine taille maximale  $x_{\max}$ , quitte à supposer que cette taille correspond à la contenance du réacteur dans lequel se déroule la cristallisation :

$$\forall t \in [t_0, t_1], \quad z(t, x_{\max}) = 0.$$

Nous choisissons un modèle pour la germination, c'est-à-dire pour la formation de nouveaux germes de cristaux. Nous considérons ici que tous les cristaux se forment à une certaine taille  $x_{\min}$ , et on note  $u(t)$  le taux d'apparition de nouveaux cristaux de taille  $x_{\min}$  à un instant  $t$ , de sorte que :

$$\forall t \in [t_0, t_1], \quad z(t, x_{\min}) = u(t).$$

Enfin, notons  $G(t, x) \geq 0$  le taux de croissance des cristaux, c'est-à-dire la vitesse à laquelle grandit un cristal de taille  $x$  à un instant  $t$ . Le bilan de population s'écrit alors

$$\forall t \in ]t_0, t_1[, \quad \forall x \in ]x_{\min}, x_{\max}[, \quad \partial_t z(t, x) + \partial_x (Gz)(t, x) = 0. \quad (3.1)$$

L'hypothèse de McCabe permet de supposer  $G$  indépendant de  $x$ . L'équation (3.1) se transforme alors en

$$\forall t \in ]t_0, t_1[, \quad \forall x \in ]x_{\min}, x_{\max}[, \quad \partial_t z(t, x) + G(t) \partial_x z(t, x) = 0. \quad (3.2)$$

L'équation (3.2) est une équation de transport en dimension 1. Nous pouvons y ajouter une condition initiale nulle (car il n'y a pas de cristaux au début du procédé de cristallisation) :

$$\forall x \in [x_{\min}, x_{\max}], \quad z(t_0, x) = 0.$$

Cependant, pour les besoins de l'étude théorique de l'EDP, nous fixons une condition initiale quelconque  $z_0$  :

$$\forall x \in [x_{\min}, x_{\max}], \quad z(t_0, x) = z_0(x).$$

À ce stade, nous disposons d'un modèle suffisant pour décrire l'évolution de la DTC :

$$\begin{cases} \partial_t z(t, x) = -G(t) \partial_x z(t, x) & \forall t \in ]t_0, t_1[, \forall x \in ]x_{\min}, x_{\max}[ \\ z(0, x) = z_0(x) & \forall x \in ]x_{\min}, x_{\max}[ \\ z(t, 0) = u(t) & \forall t \in ]t_0, t_1[ \end{cases} \quad (3.3)$$

Nous pouvons donc nous atteler à l'étude de l'EDP (3.3).

## 3.2. Caractère bien posé du problème

Considérons le système dynamique (3.3) obtenu dans la partie précédente. Démontrons dans un contexte fonctionnel plus précis l'existence d'un unique état  $z$  solution de ce système. Nous proposons plusieurs approches différentes pour parvenir à ce résultat.

### 3.2.1. Cas de l'équation de transport à vitesse constante

Commençons par étudier le cas de l'équation de transport à vitesse constante. Les résultats utilisés sont ceux développés dans [Cor07, Section 2.1]. Ils reposent directement sur la théorie des semi-groupes d'opérateurs linéaires et son application aux systèmes avec contrôle au bord. On pourra par exemple se référer à [TW09] pour une approche plus complète de cette théorie.

Posons  $t_0 = 0$  et considérons dans un premier temps le problème de Cauchy avec vitesse constante ( $G = 1$ )

$$\begin{cases} \partial_t z(t, x) = -\partial_x z(t, x) & \forall t \in ]0, t_1[, \forall x \in ]0, x_{\max}[ \\ z(0, x) = z_0(x) & \forall x \in ]0, x_{\max}[ \\ z(t, 0) = u(t) & \forall t \in ]0, t_1[ \end{cases} \quad (3.4)$$

où  $t_1 > 0$ ,  $x_{\max} > 0$ ,  $z_0 \in L^2(0, x_{\max})$ ,  $u \in L^2(0, t_1)$  sont fixés. Posons, pour tout  $t \in [0, t_1]$ ,  $\Omega_t = ]0, t[ \times ]0, x_{\max}[$ , et  $\Omega = \Omega_{t_1}$ .

Soit  $z \in C^1(\overline{\Omega})$ . Supposons que  $z$  est solution de (3.4). Soit  $t \in [0, t_1]$  et  $\varphi \in C^1(\overline{\Omega}_t)$ . En multipliant (3.4) par  $\varphi$  et en intégrant, on obtient :

$$\int_0^t \int_0^{x_{\max}} (\partial_t z(s, x) + \partial_x z(s, x)) \varphi(s, x) dx ds = 0.$$

D'où, en intégrant par parties :

$$\begin{aligned}
 0 &= - \int_0^t \int_0^{x_{\max}} (\partial_t \varphi(s, x) + \partial_x \varphi(s, x)) z(s, x) dx ds \\
 &\quad + \int_0^t [z(s, x) \varphi(s, x)]_0^{x_{\max}} ds + \int_0^{x_{\max}} [z(s, x) \varphi(s, x)]_0^t dx \\
 &= - \int_0^t \int_0^{x_{\max}} (\partial_t \varphi(s, x) + \partial_x \varphi(s, x)) z(s, x) dx ds \\
 &\quad + \int_0^t z(s, x_{\max}) \varphi(s, x_{\max}) ds - \int_0^t u(s) \varphi(s, 0) ds \\
 &\quad + \int_0^{x_{\max}} z(t, x) \varphi(t, x) dx - \int_0^{x_{\max}} z_0(x) \varphi(0, x) dx,
 \end{aligned}$$

ce qui motive la définition suivante.

**Définition 3.2.1** ([Cor07, Définition 2.1]). Soit  $t_1 > 0$ ,  $x_{\max} > 0$ ,  $z_0 \in L^2(0, x_{\max})$ ,  $u \in L^2(0, t_1)$ . On dit que  $z \in C^0([0, t_1]; L^2(0, x_{\max}))$  est solution du problème de Cauchy (3.4) si et seulement si pour tout  $t \in [0, t_1]$  et pour tout  $\varphi \in C^1(\bar{\Omega}_t)$  tel que  $\varphi(s, x_{\max}) = 0$  pour tout  $s \in [0, t]$ , on a :

$$\begin{aligned}
 0 &= - \int_0^t \int_0^{x_{\max}} (\partial_t \varphi(s, x) + \partial_x \varphi(s, x)) z(s, x) dx ds \\
 &\quad + \int_0^{x_{\max}} z(t, x) \varphi(t, x) dx - \int_0^{x_{\max}} z_0(x) \varphi(0, x) dx \\
 &\quad - \int_0^t u(s) \varphi(s, 0) ds. \tag{3.5}
 \end{aligned}$$

J.M. Coron démontre alors, de deux façons différentes, dont l'une repose sur la théorie plus générale des semi-groupes d'opérateurs, le théorème suivant.

**Théorème 3.2.2** ([Cor07, Théorème 2.4]). Soit  $t_1 > 0$ ,  $x_{\max} > 0$ ,  $z_0 \in L^2(0, x_{\max})$ ,  $u \in L^2(0, t_1)$ . Le problème de Cauchy (3.4) admet une unique solution

$$z \in C^0([0, t_1]; L^2(0, x_{\max})).$$

De plus  $z$  vérifie :

$$\forall (t, x) \in \bar{\Omega}, \quad z(t, x) = \begin{cases} z_0(x - t) & \text{si } t \leq x \\ u(t - x) & \text{si } t > x. \end{cases} \tag{3.6}$$

Sous des hypothèses de régularité plus fortes, on trouve également le résultat suivant.

**Théorème 3.2.3** ([TW09, Proposition 10.1.8]). Soit  $t_1 > 0$ ,  $x_{\max} > 0$ ,  $z_0 \in H^1(0, x_{\max})$ ,  $u \in H^1(0, t_1)$ . Supposons que  $u(0) = z_0(0)$ . Alors le problème de Cauchy (3.4) admet une unique solution  $z \in C^0([0, t_1]; L^2(0, x_{\max}))$ . De plus,

$$z \in C^0([0, t_1]; H^1(0, x_{\max})) \cap C^1([0, t_1]; L^2(0, x_{\max})).$$

### 3.2.2. Approche par changement de temps

Avec cette approche, nous cherchons à nous ramener, via un changement de temps, à une équation de transport de vitesse constante. Nous pourrons ainsi appliquer directement les résultats précédents d'existence et d'unicité pour cette équation, puis les transférer à l'équation à vitesse variable qui nous intéresse. Considérons maintenant le problème de Cauchy avec vitesse variable  $G \in C^0([t_0, t_1]; \mathbb{R}_+)$  :

$$\begin{cases} \partial_t z(t, x) = -G(t)\partial_x z(t, x) & \forall t \in ]0, t_1[, \forall x \in ]0, x_{\max}[ \\ z(0, x) = z_0(x) & \forall x \in ]0, x_{\max}[ \\ z(t, 0) = u(t) & \forall t \in ]0, t_1[ \end{cases} \quad (3.7)$$

où  $t_1 > t_0 \geq 0$ ,  $x_{\max} > x_{\min} \geq 0$ ,  $z_0 \in L^2(x_{\min}, x_{\max})$ , et  $u \in L^2(t_0, t_1)$  sont fixés. Posons, pour tout  $t \in [t_0, t_1]$ ,  $\Omega_t = ]t_0, t[\times]x_{\min}, x_{\max}[$ , et  $\Omega = \Omega_{t_1}$ .

De manière analogue au cas où  $G = 1$ , on peut montrer la pertinence de la notion de solution suivante en réalisant des intégrations par parties.

**Définition 3.2.4.** Soit  $t_1 > t_0 \geq 0$ ,  $x_{\max} > x_{\min} \geq 0$ ,  $z_0 \in L^2(x_{\min}, x_{\max})$ ,  $u \in L^2(t_0, t_1)$ ,  $G \in C^0([t_0, t_1]; \mathbb{R}_+)$ . On dit que  $z \in C^0([t_0, t_1]; L^2(x_{\min}, x_{\max}))$  est solution du problème de Cauchy (3.7) si et seulement si pour tout  $t \in [t_0, t_1]$  et pour tout  $\varphi \in C^1(\bar{\Omega}_t)$  tel que  $\varphi(s, x_{\max}) = 0$  pour tout  $s \in [t_0, t]$ , on a :

$$\begin{aligned} 0 = & - \int_{t_0}^t \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} (\partial_t \varphi(s, x) + G(s)\partial_x \varphi(s, x)) z(s, x) dx ds \\ & + \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z(t, x) \varphi(t, x) dx - \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z_0(x) \varphi(0, x) dx \\ & - \int_{t_0}^t G(s) u(s) \varphi(s, 0) ds. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Nous proposons maintenant un changement de temps afin d'appliquer les résultats précédents à l'équation de transport à vitesse variable et ainsi démontrer le principal résultat de ce chapitre :

**Théorème 3.2.5.** Soit  $t_1 > t_0 \geq 0$ ,  $x_{\max} > x_{\min} \geq 0$ ,  $z_0 \in H^1(x_{\min}, x_{\max})$ ,  $u \in H^1(t_0, t_1)$ ,  $G \in C^0([t_0, t_1])$ . Supposons que  $u(t_0) = z_0(x_{\min})$  et qu'il existe  $\mu > 0$  tel que  $G \geq \mu$ . Alors le problème de Cauchy (3.7) admet une unique solution

$$z \in C^0([t_0, t_1]; H^1(x_{\min}, x_{\max})) \cap C^1([t_0, t_1]; L^2(x_{\min}, x_{\max})).$$

*Démonstration.* Posons  $X = L^2(x_{\min}, x_{\max})$ ,  $Z = H^1(x_{\min}, x_{\max})$ . Soit  $G \in C^0([t_0, t_1])$ ,  $z_0 \in Z$ ,  $u \in H^1(t_0, t_1)$  et

$$\mathfrak{G} : \begin{cases} \bar{\Omega} & \longrightarrow \bar{\Omega} \\ (t, x) & \longmapsto (\mathfrak{G}_1(t), \mathfrak{G}_2(x)) = \left( \int_{t_0}^t G(\tau) d\tau, x - x_{\min} \right) \end{cases}$$

avec  $\tilde{\Omega} = ]0, \tilde{t}_1[\times]0, \tilde{x}_{\max}[$ ,  $\tilde{t}_1 = \mathfrak{G}_1(t_1)$ ,  $\tilde{x}_{\max} = \mathfrak{G}_2(x_{\max})$ . Supposons de plus qu'il existe  $\mu > 0$  tel que  $G \geq \mu$  et que  $u(t_0) = z_0(x_{\min})$ . Comme  $G \geq \mu > 0$ ,  $\mathfrak{G}$  est bien défini et  $\mathfrak{G}$  est un  $C^1$ -difféomorphisme. Soit  $z \in C^0(t_0, t_1, X)$ .

Posons  $\tilde{z} = z \circ \mathfrak{G}^{-1}$ ,  $\tilde{X} = L^2(0, \tilde{x}_{\max})$  et  $\tilde{Z} = H^1(0, \tilde{x}_{\max})$ . Montrons que  $z$  est solution de (3.7) si et seulement si  $\tilde{z}$  est solution de (3.9)

$$\begin{cases} \partial_t \tilde{z}(\tilde{t}, \cdot) = -\partial_x \tilde{z}(\tilde{t}, \cdot) & \text{dans } \tilde{Z}, \forall \tilde{t} \in ]0, \tilde{t}_1[ \\ \tilde{z}(0, \cdot) = z_0 \circ \mathfrak{G}_2^{-1} & \text{dans } \tilde{Z} \\ \tilde{z}(\tilde{t}, 0) = u \circ \mathfrak{G}_1^{-1}(\tilde{t}) & \forall \tilde{t} \in ]0, \tilde{t}_1[. \end{cases} \quad (3.9)$$

On a :

—  $\tilde{z}(0, \cdot) = z(\mathfrak{G}^{-1}(0, \cdot)) = z(t_0, \mathfrak{G}_2^{-1}(\cdot))$ . Donc

$$\tilde{z}(0, \cdot) = z_0 \circ \mathfrak{G}_2^{-1} \iff z(t_0, \cdot) = z_0.$$

—  $\forall \tilde{t} \in [0, \tilde{t}_1]$ ,  $\tilde{z}(\tilde{t}, 0) = z(\mathfrak{G}^{-1}(\tilde{t}, 0)) = z(\mathfrak{G}_1^{-1}(\tilde{t}), x_{\min})$ . Donc

$$\tilde{z}(\tilde{t}, 0) = u \circ \mathfrak{G}_1^{-1}(\tilde{t}) \iff z(t, x_{\min}) = u(t).$$

—  $\forall \tilde{t} \in ]0, \tilde{t}_1[$ ,  $\begin{cases} \partial_t \tilde{z}(\tilde{t}, \cdot) = (\mathfrak{G}_1^{-1})'(\tilde{t}) \partial_t z(\mathfrak{G}^{-1}(\tilde{t}, \cdot)) = \frac{1}{G(\mathfrak{G}_1^{-1}(\tilde{t}))} \partial_t z(\mathfrak{G}^{-1}(\tilde{t}, \cdot)) \\ \partial_x \tilde{z}(\tilde{t}, \cdot) = (\mathfrak{G}_2^{-1})'(\cdot) \partial_x z(\mathfrak{G}^{-1}(\tilde{t}, \cdot)) = \partial_x z(\mathfrak{G}^{-1}(\tilde{t}, \cdot)) \end{cases}$ .

Donc :

$$\begin{aligned} \partial_t \tilde{z}(\tilde{t}, \cdot) = -\partial_x \tilde{z}(\tilde{t}, \cdot) \text{ dans } \tilde{Z}, \forall \tilde{t} \in ]0, \tilde{t}_1[ \\ \iff \\ \partial_t z(t, \cdot) = -G(t) \partial_x z(t, \cdot) \text{ dans } Z, \forall t \in ]t_0, t_1[. \end{aligned}$$

Donc  $z$  est solution de (3.7) si et seulement si  $\tilde{z}$  est solution de (3.9). Or  $z_0 \circ \mathfrak{G}_2^{-1} \in \tilde{Z}$  et  $u \circ \mathfrak{G}_1^{-1} \in H^1(0, \tilde{t}_1)$ . En effet, on a d'une part

$$\begin{aligned} \int_0^{\tilde{x}_{\max}} |z_0 \circ \mathfrak{G}_2^{-1}(\tilde{x})|^2 d\tilde{x} &= \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z_0(x)^2 dx && (x = \mathfrak{G}_2^{-1}(\tilde{x})) \\ &< +\infty && (\text{car } z_0 \in Z) \end{aligned}$$

et d'autre part

$$\begin{aligned} \int_0^{\tilde{t}_1} |u \circ \mathfrak{G}_1^{-1}(\tilde{t})|^2 d\tilde{t} &= \int_{t_0}^{t_1} u(t)^2 G(t) dt && (t = \mathfrak{G}_1^{-1}(\tilde{t})) \\ &< +\infty && (\text{car } u \in L^2(t_0, t_1) \text{ et } G \in L^\infty(t_0, t_1)) \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \int_0^{\tilde{t}_1} |(u \circ \mathfrak{G}_1^{-1})'(\tilde{t})|^2 d\tilde{t} &= \int_0^{\tilde{t}_1} \left| (\mathfrak{G}_1^{-1})'(\tilde{t}) u'(\mathfrak{G}_1^{-1}(\tilde{t})) \right|^2 d\tilde{t} \\ &= \int_0^{\tilde{t}_1} \left| \frac{u'(\mathfrak{G}_1^{-1}(\tilde{t}))}{G(\mathfrak{G}_1^{-1}(\tilde{t}))} \right|^2 d\tilde{t} \\ &= \int_{t_0}^{t_1} \frac{u'(t)^2}{G(t)} dt && (t = \mathfrak{G}_1^{-1}(\tilde{t})) \\ &< +\infty. && (\text{car } u \in H^1(t_0, t_1) \text{ et } G \geq \mu) \end{aligned}$$

Donc d'après le Théorème 3.2.3, (3.9) admet une unique solution  $\tilde{z} \in C^0([0, \tilde{t}_1], \tilde{X})$ . De plus,  $\tilde{z} \in C^0([0, \tilde{t}_1], \tilde{Z}) \cap C^1([0, \tilde{t}_1], \tilde{X})$ . Donc (3.7) admet une unique solution  $z = \tilde{z} \circ \mathfrak{G}$  et

$z \in C^0([t_0, t_1]; Z) \cap C^1([t_0, t_1]; X)$ .

De plus, d'après le Théorème 3.2.2,  $\tilde{z}$  vérifie :

$$\begin{aligned} \forall (\tilde{t}, \tilde{x}) \in \bar{\Omega}, \quad \tilde{z}(\tilde{t}, \tilde{x}) &= \begin{cases} \tilde{z}(0, \tilde{x} - \tilde{t}) & \text{si } \tilde{x} \geq \tilde{t} \\ \tilde{z}(\tilde{t} - \tilde{x}, 0) & \text{sinon.} \end{cases} \\ &= \begin{cases} z_0 \circ \mathfrak{G}_2^{-1}(\tilde{x} - \tilde{t}) & \text{si } \tilde{x} \geq \tilde{t} \\ u \circ \mathfrak{G}_1^{-1}(\tilde{t} - \tilde{x}) & \text{sinon.} \end{cases} \end{aligned}$$

D'où pour tout  $(t, x) \in \bar{\Omega}$ ,

$$z(t, x) = \tilde{z}(\mathfrak{G}_1(t), \mathfrak{G}_2(x)) = \begin{cases} z_0(x - \mathfrak{G}_1(t)) & \text{si } x - x_{\min} \geq \mathfrak{G}_1(t) \\ u \circ \mathfrak{G}_1^{-1}(\mathfrak{G}_1(t) - x + x_{\min}) & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.10)$$

□

### 3.2.3. Approche directe

Une autre manière de procéder pour étudier l'existence et l'unicité de la solution de (3.7) est d'adapter la preuve donnée par J.M. Coron du Théorème 3.2.2. Adapter la preuve basée sur les semi-groupes serait une méthode plus générale. Cependant, dans le cas de la vitesse variable, il faudrait introduire le formalisme des familles d'évolution, qui permet de généraliser la théorie des semi-groupes d'opérateurs au cas où ces opérateurs dépendent du temps. C'est par exemple le point de vue adopté dans [Paz83, Chapitre 5]. Nous préférons dans ce rapport appliquer une méthode moins générale en adaptant la première preuve donnée par J.M. Coron du Théorème 3.2.2 ([Cor07, Théorème 2.4, première preuve]).

**Théorème 3.2.6.** Soit  $t_1 > t_0 \geq 0$ ,  $x_{\max} > x_{\min} \geq 0$ ,  $z_0 \in L^2(x_{\min}, x_{\max})$ ,  $u \in L^2(t_0, t_1)$  et  $G \in C^0([t_0, t_1]; \mathbb{R}_+)$ . Alors le problème de Cauchy (3.7) admet une unique solution  $z \in C^0([t_0, t_1]; L^2(x_{\min}, x_{\max}))$  au sens de la Définition 3.2.4. De plus,  $z$  vérifie :

$$\forall (t, x) \in \bar{\Omega}, \quad z(t, x) = \begin{cases} z_0(x - \mathfrak{G}_1(t)) & \text{si } x - x_{\min} \geq \mathfrak{G}_1(t) \\ u \circ \mathfrak{G}_1^{-1}(\mathfrak{G}_1(t) - x + x_{\min}) & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.11)$$

où  $\mathfrak{G}_1 : [t_0, t_1] \ni t \mapsto \int_{t_0}^t G(\tau) d\tau$ . De plus, si  $z_0 \in H^1(x_{\min}, x_{\max})$ ,  $u \in H^1(t_0, t_1)$  et  $u(t_0) = z_0(x_{\min})$ , alors

$$z \in C^0([t_0, t_1]; H^1(x_{\min}, x_{\max})) \cap C^1([t_0, t_1]; L^2(x_{\min}, x_{\max})).$$

*Démonstration.* Démontrons d'abord l'unicité de la solution. Soit  $z_1, z_2$  deux solutions de (3.7) et posons  $z = z_1 - z_2$ . D'après la Définition 3.2.4,  $z$  vérifie alors pour tout  $t \in [t_0, t_1]$  et pour tout  $\varphi \in C^1(\bar{\Omega}_t)$  tel que  $\varphi(\cdot, x_{\max}) = 0$ ,

$$-\int_{t_0}^t \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} (\partial_t \varphi(s, x) + G(s) \partial_x \varphi(s, x)) z(s, x) dx ds + \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z(t, x) \varphi(t, x) dx = 0.$$

Soit  $t \in [t_0, t_1]$ . Soit  $(f_n)_{n \in \mathbb{N}} \in C^1(\mathbb{R})^{\mathbb{N}}$  telle que

$$\begin{cases} \forall n \in \mathbb{N}, \quad f_n|_{[x_{\max}, +\infty[} = 0 \\ f_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} z(t, \cdot) \text{ dans } L^2(x_{\min}, x_{\max}). \end{cases} \quad (3.12)$$

Une telle suite existe car  $C^1([x_{\min}, x_{\max}])$  est dense dans  $L^2(x_{\min}, x_{\max})$ . Pour tout  $n \in \mathbb{N}$ , on pose  $\varphi_n : (s, x) \in \bar{\Omega}_t \mapsto f_n \left( x + \int_s^t G(\tau) d\tau \right)$ . On a alors  $\varphi_n \in C^1(\bar{\Omega}_t)$  et  $\varphi_n(\cdot, x_{\max}) = 0$  car  $G \geq 0$ . De plus, pour tout  $n \in \mathbb{N}$ , et pour tout  $(s, x) \in \Omega_t$ ,

$$\partial_t \varphi_n(s, x) + G(s) \partial_x \varphi_n(s, x) = 0. \quad (3.13)$$

De là,

$$\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z(t, x) f_n(t, x) dx = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z(t, x) \varphi_n(t, x) dx = 0. \quad (3.14)$$

D'où, en passant à la limite,

$$\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} |z(t, x)|^2 dx = 0.$$

Donc, pour tout  $t \in [t_0, t_1]$ ,  $z(t, \cdot) = 0$  dans  $L^2(x_{\min}, x_{\max})$ .

Pour l'existence d'une solution, posons directement

$$\forall (t, x) \in \bar{\Omega}, \quad z(t, x) = \begin{cases} z_0(x - \mathfrak{G}_1(t)) & \text{si } x - x_{\min} \geq \mathfrak{G}_1(t) \\ u \circ \mathfrak{G}_1^{-1}(\mathfrak{G}_1(t) - x + x_{\min}) & \text{sinon.} \end{cases}$$

et vérifions que  $z$  est solution de (3.7). Soit  $t \in [t_0, t_1]$ . Soit  $\varphi \in C^1(\bar{\Omega}_t)$  vérifiant  $\varphi(\cdot, x_{\max}) = 0$ . On a alors :

- $\forall x \in [x_{\min}, x_{\max}]$ ,  $z(t_0, x) = z_0(x)$  car  $\mathfrak{G}_1(t_0) = 0$ .
- $\forall t \in [t_0, t_1]$ ,  $z(t, x_{\min}) = u(t)$  car  $\mathfrak{G}_1 \geq 0$ .

De plus,

$$\begin{aligned} \forall (t, x) \in \bar{\Omega}, \quad \partial_t z(t, x) &= \begin{cases} -\mathfrak{G}'_1(t) z'_0(x - \mathfrak{G}_1(t)) & \text{si } x - x_{\min} \geq \mathfrak{G}_1(t) \\ \mathfrak{G}'_1(t) (u \circ \mathfrak{G}_1^{-1})'(\mathfrak{G}_1(t) - x + x_{\min}) & \text{sinon.} \end{cases} \\ &= -G(t) \partial_t z(t, x). \end{aligned}$$

Donc  $z$  est solution de (3.7).

Enfin, si  $z_0 \in H^1(x_{\min}, x_{\max})$ ,  $u \in H^1(t_0, t_1)$  et  $u(t_0) = z_0(x_{\min})$ , alors d'après l'expression explicite de  $z$ , on a bien

$$z \in C^0([t_0, t_1]; H^1(x_{\min}, x_{\max})) \cap C^1([t_0, t_1]; L^2(x_{\min}, x_{\max})).$$

□

*Remarque 3.2.7.* Notons que l'approche directe permet de se passer de l'hypothèse

$$\exists \mu > 0 / G \geq \mu. \quad (3.15)$$

Le résultat semble donc plus fort que celui donné par la méthode par changement de temps. Cependant, il aurait été possible de raffiner la méthode par changement de temps et d'éliminer cette hypothèse. Pour cela, il aurait fallu procéder plus finement, en notant que si  $G = 0$  sur un ouvert,  $z(\cdot, x)$  est constante sur cet ouvert pour presque tout  $x \in [x_{\min}, x_{\max}]$ . Cela reviendrait à appliquer les théorèmes 3.2.2 et 3.2.3 sur des espaces fonctionnels munis d'une autre mesure prenant directement en compte le changement de temps.

Dans les chapitres suivants, nous conserverons le formalisme adopté dans cette partie, et nous nous reposerons sur le Théorème 3.2.6.

### 3.3. Propriétés de la solution

Dans la suite de ce rapport, nous conserverons le formalisme adopté dans la Section 3.2.3. Nous avons montré, dans la modélisation développée dans la Section 3.1, qu'il fallait ajouter au système (3.7) la condition

$$z(t, x_{\max}) = 0, \quad \forall t \in [t_0, t_1] \quad (3.16)$$

puisque  $x_{\max}$  est choisi de sorte à satisfaire cette condition. Déterminons des conditions suffisantes sur  $z_0$  et  $t_1$  pour que cette condition soit vérifiée.

**Proposition 3.3.1.** *Plaçons nous sous les hypothèses du Théorème 3.2.6, de façon à garantir l'existence et l'unicité de la solution  $z \in C^0([t_0, t_1]; L^2(x_{\min}, x_{\max}))$  de (3.7). Supposons de plus qu'il existe  $\bar{x} \in [x_{\min}, x_{\max}]$  tel que  $z_0(x) = 0$  pour tout  $x \in [\bar{x}, x_{\max}]$ . Alors pour tout  $t \in [t_0, t_1]$  vérifiant*

$$\bar{x} + \mathfrak{G}_1(t) < x_{\max}, \quad (3.17)$$

*et pour tout  $s \in [t_0, t]$ , on a  $z(s, x) = 0$  pour tout  $x \in [\bar{x} + \int_{t_0}^s G(u)du, x_{\max}]$*

*Démonstration.* Soit  $t \in [t_0, t_1]$  vérifiant (3.17),  $s \in [t_0, t]$  et  $x \in [\bar{x} + \mathfrak{G}_1(t), x_{\max}]$ . On a

$$x - \mathfrak{G}_1(s) \geq \bar{x} + \mathfrak{G}_1(t) - \mathfrak{G}_1(s) \geq \bar{x} \geq x_{\min}.$$

Donc d'après la forme explicite de  $z$  obtenue dans (3.10), on obtient directement

$$z(s, x) = z_0(x - \mathfrak{G}_1(s)) = 0$$

car  $x - \mathfrak{G}_1(s) \geq \bar{x}$ . □

*Remarque 3.3.2.* En particulier, si il existe  $\bar{x} \in [x_{\min}, x_{\max}]$  tel que  $z_0(x) = 0$  pour tout  $x \in [\bar{x}, x_{\max}]$  et si  $\bar{x} + \mathfrak{G}_1(t_1) < x_{\max}$ , alors  $z(t, \cdot)$  est à support compact dans  $[x_{\min}, x_{\max}]$  pour tout  $t \in [t_0, t_1]$ .

Moins formellement, si  $z_0$  est à support compact dans  $[x_{\min}, x_{\max}]$ , et si  $x_{\max}$  est assez grand (ou bien si  $t_1$  est assez petit), alors  $z(t, \cdot)$  est à support compact dans  $[x_{\min}, x_{\max}]$  pour tout  $t \in [t_0, t_1]$ . Quitte à fixer  $x_{\max}$  suffisamment grand, il est donc toujours possible de supposer que  $z(t, \cdot)$  est à support compact dans  $[x_{\min}, x_{\max}]$ . Dans la suite du rapport, nous supposons dès que cela est nécessaire que cette propriété est vérifiée.

### 3.4. Conclusion

Ainsi, nous disposons d'une modélisation du procédé de cristallisation. Nous avons fixé un cadre formel pour l'analyse de ce modèle, et avons démontré, de plusieurs façons, l'existence et l'unicité de la solution de ce modèle, qui représente l'évolution de la distribution en taille des cristaux au cours du temps. Enfin, nous avons montré que l'hypothèse  $z(\cdot, x_{\max}) = 0$  pouvait être faite, à condition de choisir  $x_{\max}$  suffisamment grand.

Cette analyse théorique du modèle étant accomplie, nous sommes en mesure d'aborder dans un cadre précis l'objectif visé d'observation de la DTC à partir d'une mesure. Dans le chapitre suivant, la mesure utilisée est la mesure de la concentration en solide dans le réacteur de cristallisation. Nous présentons cette mesure, et proposons une méthode, basée sur un observateur de type Luenberger, pour atteindre cet objectif.

## 4. Observateur de Luenberger basé sur la concentration en solide

Nous développons dans ce chapitre la première méthode mise en œuvre pour tenter de répondre à l'objectif présenté dans la Section 1.2. La stratégie consiste à utiliser exclusivement la mesure de la concentration en solide en mettant en place un observateur de type Luenberger. Nous analysons les propriétés d'observabilité du système avec cette mesure, et concluons en présentant les résultats numériques obtenus sur des données simulées.

### 4.1. Mesure de la concentration en solide

Déterminons d'abord une expression de la mesure de la concentration en solide en fonction de la DTC. Les notations adoptées sont celles de [Ucc11]. Soit  $z$  la DTC solution du système (3.7). Pour chaque  $t \in \mathbb{R}_+$ , soit  $C_s(t)$  la concentration en solide dans le réacteur à l'instant  $t$ , c'est-à-dire le rapport entre la masse des cristaux dans le réacteur au temps  $t$  et la masse du solvant. Soit  $\rho_s$  la masse volumique du soluté sous forme solide et  $M_e$  la masse du solvant. On a alors :

$$C_s(t) = \frac{\rho_s}{M_e} V_s(t)$$

où  $V_s(t)$  est le volume occupé par les cristaux à l'instant  $t$ . Si les cristaux sont sphériques, on a

$$V_s(t) = \frac{4\pi}{3} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z(t, x) x^3 dx$$

car le volume d'une sphère de rayon  $r$  est  $\frac{4\pi}{3}r^3$ . Plus généralement, on peut supposer que les cristaux sont mono-paramétrés, c'est-à-dire qu'il existe une constante  $k_v > 0$ , appelée facteur de forme du cristal, tel que pour tout paramètre  $r > 0$ , le volume d'un cristal de paramètre  $r$  est  $k_v r^3$ . Dès lors, on a

$$\forall t \in [t_0, t_1], \quad C_s(t) = \frac{\rho_s k_v}{M_e} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z(t, x) x^3 dx. \quad (4.1)$$

Notons  $C(t)$  la concentration en soluté dans le réacteur à l'instant  $t$ , c'est-à-dire le rapport entre la masse de soluté dans le réacteur au temps  $t$  et la masse du solvant. On a alors directement la relation

$$C_s(t) + C(t) = C(t_0). \quad (4.2)$$

Supposons que la mesure de  $C(t)$  est accessible à tout instant, c'est-à-dire qu'on procède à une mesure en ligne de la concentration en soluté durant le procédé de cristallisation. Nous pouvons alors directement avoir accès à  $C_s(t)$  via la relation (4.2). Supposons de plus que le cristal est mono-paramétré et que la constante  $\frac{\rho_s k_v}{M_e}$  est connue. On peut alors associer au système (3.7) la mesure  $y$  définie par

$$\forall t \in [t_0, t_1], \quad y(t) = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z(t, x) x^3 dx. \quad (4.3)$$

Est-il possible de reconstruire l'état  $z$  du système à partir de la connaissance du modèle (3.3) et de  $y$  à chaque instant ? La stratégie adoptée dans un premier temps et développée dans la section suivante consiste à réaliser un observateur de type Luenberger (voir Section 2.1.2) basé sur la concentration. Nous verrons cependant par la suite que cette méthode ne peut pas aboutir car la concentration n'est pas une mesure suffisante (i.e. rendant le système observable).

## 4.2. Mise en place de l'observateur

Dans cette section, nous mettons en place un observateur de type Luenberger de l'état  $z$  du système (3.7) basé sur la mesure  $y$  vérifiant (4.3). Bien que le système dynamique considéré soit linéaire en l'état, il s'agit d'un système en dimension infinie puisque  $z(t) \in L^2(x_{\min}, x_{\max})$  pour tout  $t \in [t_0, t_1]$ . Il s'agit donc d'adapter la méthode de Luenberger au cas de la dimension infinie. L'idée, qui a motivé ce stage, est de chercher à reconstruire une transformation linéaire  $Tz$  de l'état sous la forme particulière

$$T : \begin{cases} C^1([t_0, t_1]; L^2(x_{\min}, x_{\max})) \\ z \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} C^1([t_0, t_1]) \\ Tz : t \mapsto \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} a(t, x)z(t, x)dx \end{cases}$$

où  $a \in C^1([t_0, t_1]; L^2(x_{\min}, x_{\max}))$  est à déterminer. Poursuivant l'idée de Luenberger, on cherche à fixer  $a$  de sorte que

$$\frac{dTz}{dt}(t) = \lambda Tz(t) + y(t), \quad \forall t \in [t_0, t_1], \quad (4.4)$$

pour un certain  $\lambda \in \mathbb{C}$ . Supposons la condition (4.4) vérifiée et considérons le système dynamique :

$$\begin{cases} \dot{\zeta} = \lambda\zeta + y, \\ \zeta(t_0) \in \mathbb{C}. \end{cases} \quad (4.5)$$

On a alors :

$$\begin{aligned} \overline{\zeta - Tz} &= \lambda\zeta + y - \lambda Tz - y \\ &= \lambda(\zeta - Tz) \end{aligned} \quad (4.6)$$

de sorte que si  $\text{Re } \lambda < 0$ ,  $\zeta - Tz \xrightarrow{+\infty} 0$ . Il sera donc possible d'approcher  $Tz$  en simulant le système dynamique sur  $\zeta$ . On aura donc complété la première étape de la stratégie de Luenberger.

Déterminons maintenant  $a$  de façon à satisfaire (4.4). Pour tout  $t \in [t_0, t_1]$ , on a

$$\begin{aligned} \frac{dTz}{dt}(t) &= \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z(t, x)\partial_t a(t, x)dx + \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} a(t, x)\partial_t z(t, x)dx \\ &= \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z(t, x)\partial_t a(t, x)dx - G(t) \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} a(t, x)\partial_x z(t, x)dx \\ &= \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z(t, x)\partial_t a(t, x)dx + G(t) \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z(t, x)\partial_x a(t, x)dx \\ &\quad - \left[ a(t, x)z(t, x) \right]_{x=x_{\min}}^{x=x_{\max}} \\ &= \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z(t, x)(\partial_t a(t, x) + G(t)\partial_x a(t, x))dx - \left[ a(t, x)z(t, x) \right]_{x=x_{\min}}^{x=x_{\max}}. \end{aligned}$$

Il suffit donc de choisir  $a \in C^1([t_0, t_1]; L^2(x_{\min}, x_{\max}))$  vérifiant l'EDP hyperbolique

$$\begin{cases} \partial_t a(t, x) + G(t) \partial_x a(t, x) = \lambda a(t, x) + x^3 & \forall t \in ]t_0, t_1[, \forall x \in ]x_{\min}, x_{\max}[ \\ a(t_0, x) = 0 & \forall x \in ]x_{\min}, x_{\max}[ \\ a(t, x_{\min}) = 0 & \forall t \in ]t_0, t_1[, \end{cases} \quad (4.7)$$

pour que l'équation (4.4) soit vérifiée. Notons que la connaissance de  $G$  est une condition nécessaire à la résolution de cette équation. Il faut donc être dans un premier temps être en mesure d'estimer  $G$ .

Reste enfin à savoir si la donnée de  $Tz$ , pour une famille de  $a$  admissibles, est suffisante pour reconstruire  $z$ , c'est-à-dire si la seconde étape de la méthode de Luenberger est réalisable pour l'opérateur  $T$  que l'on s'est donné.

#### 4.2.1. Estimation de $G$

Pour estimer  $G$ , nous nous basons une nouvelle fois sur la thèse [Ucc11]. Le modèle proposé pour  $G$  s'écrit, pour tout temps  $t \in [t_0, t_1]$ ,

$$G(t) = k_g \frac{C(t) - C^*(t)}{C^*(t)} \quad (4.8)$$

avec

- $G(t)$  la vitesse de croissance des cristaux à l'instant  $t$ ,
- $k_g$  une constante de croissance connue,
- $C^*(t)$  la solubilité à l'instant  $t$ ,
- $C(t)$  la concentration en soluté à l'instant  $t$ .

Or  $C^*(t)$  dépend de la température à l'instant  $t$  et  $C(t)$  vérifie  $\dot{C}(t) = -\dot{C}_s(t)$ . Par conséquent, en ajoutant comme mesure un capteur de température *in situ* et la concentration en soluté initiale, la vitesse  $G$  de croissance des cristaux peut être estimée en ligne.

#### 4.2.2. Existence et unicité de $a$

Dans le même esprit que la Définition 3.2.4, nous adoptons la définition suivante.

**Définition 4.2.1.** Soit  $t_1 > t_0 \geqslant 0$ ,  $x_{\max} > x_{\min} \geqslant 0$ ,  $\lambda < 0$ ,  $G \in C^0([t_0, t_1]; \mathbb{R}_+)$ . On dit que  $a \in C^0([t_0, t_1]; L^2(x_{\min}, x_{\max}))$  est solution du problème de Cauchy (4.7) si et seulement si pour tout  $t \in [t_0, t_1]$  et pour tout  $\varphi \in C^1(\overline{\Omega}_t)$  tel que  $\varphi|_{[t_0, t] \times \{x_{\max}\}} = 0$  on a

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_t} (\lambda a(s, x) + x^3) \varphi(s, x) dx ds &= - \int_{\Omega_t} (\partial_t \varphi(s, x) + G(s) \partial_x \varphi(s, x)) a(s, x) dx ds \\ &\quad + \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} a(t, x) \varphi(t, x) dx. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Fixons  $\lambda < 0$  pour la suite de cette section. Montrons l'existence et l'unicité de la solution  $a$  de (4.7).

**Théorème 4.2.2.** Soit  $t_1 > t_0 \geqslant 0$ ,  $x_{\max} > x_{\min} \geqslant 0$ ,  $G \in C^0([t_0, t_1]; \mathbb{R}_+)$ . Alors il existe une unique solution  $a \in C^0([t_0, t_1]; L^2(x_{\min}, x_{\max}))$  de l'équation aux dérivées partielles (4.7). De plus, pour tout  $(t, x) \in \overline{\Omega}$ ,  $a(t, x)$  vérifie :

$$a(t, x) = \begin{cases} \int_{t_0}^t (x - \mathfrak{G}_1(s))^3 e^{\lambda(t-s)} ds & \text{si } x - x_{\min} \geqslant \mathfrak{G}_1(t) \\ \int_{\mathfrak{G}_1^{-1}(\mathfrak{G}_1(t) - x + x_{\min})}^t (x - \mathfrak{G}_1(s))^3 e^{\lambda(t-s)} ds & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.10)$$

avec  $\mathfrak{G}_1 : [t_0, t_1] \ni t \mapsto \int_{t_0}^t G(\tau) d\tau$ . De plus,

$$a \in C^0([t_0, t_1]; H^1(x_{\min}, x_{\max})) \cap C^1([t_0, t_1]; L^2(x_{\min}, x_{\max})). \quad (4.11)$$

*Démonstration.* Nous donnerons seulement les idées principales de la preuve, car elle est très similaire à celle du Théorème 3.2.6. L'existence de la solution et la propriété (4.11) sont données directement par la formule (4.10). Il suffit de vérifier que la fonction  $a$  définie par (4.10) est solution de l'équation (4.9). Pour obtenir l'équation (4.10), il suffit de mettre en place la méthode des caractéristiques sur l'EDP de transport (4.7). Pour montrer l'unicité de la solution, posons  $a$  la différence de deux solutions de (4.7) et montrons que  $a = 0$ . On a

$$\begin{cases} \partial_t a(t, x) + G(t) \partial_x a(t, x) = \lambda a(t, x) & \forall t \in ]t_0, t_1[, \forall x \in ]x_{\min}, x_{\max}[ \\ a(t_0, x) = 0 & \forall x \in ]x_{\min}, x_{\max}[ \\ a(t, x_{\min}) = 0 & \forall t \in ]t_0, t_1[. \end{cases} \quad (4.12)$$

Il suffit donc d'effectuer un changement de temps similaire à celui de la Section 3.2.2 puis d'invoquer le Théorème A.1 du livre [BC16], qui est une version étendue du Théorème 3.2.2, pour montrer que l'unique solution de (4.12) est  $a = 0$ , ce qui conclut la preuve.  $\square$

#### 4.2.3. Inversion de $T$

Soit  $\lambda_{\min} < \lambda_{\max} < 0$ . Pour chaque  $\lambda \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$ , on note  $a(\lambda, \cdot)$  la solution de (4.7) associée au paramètre  $\lambda$  et  $T(\lambda)$  l'opérateur défini par (4.4) associé. Supposons connue, pour chaque  $t \in [t_0, t_1]$ , une approximation de  $T(\lambda)z(t)$ . On cherche à reconstruire l'état  $z$ . Ce problème inverse peut se formuler à chaque instant  $t$  sous la forme d'une équation intégrale (voir Section 2.2.1). Fixons  $t \in [t_0, t_1]$ . Il s'agit de résoudre

$$K(t)(z(t))(\lambda) = T(\lambda)z(t) \quad (4.13)$$

où  $K(t) : L^2(x_{\min}, x_{\max}) \ni z(t) \longmapsto \left( \lambda \mapsto \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} a(\lambda, t, x) z(t, x) dx \right)$  est un opérateur intégral de noyau  $a(\cdot, t, \cdot)$  de  $L^2(x_{\min}, x_{\max})$  à valeurs dans  $L^2(\lambda_{\min}, \lambda_{\max})$ . Dans la pratique, nous ne connaîtrons qu'une approximation de  $T(\lambda)z(t)$  donnée par la solution  $\zeta(\lambda)$  du système dynamique (4.5) associée au paramètre  $\lambda$ . La résolution doit donc être robuste. C'est la raison pour laquelle nous appliquerons la méthode de Tikhonov exposée dans la Section 2.2.2.

Avant de mener une expérimentation numérique de cette méthode, analysons plus en détail les propriétés de la mesure associée à la concentration en solide.

### 4.3. Analyse de l'injectivité de la mesure

Dans cette section, nous montrons que la mesure  $y$  de la concentration n'est pas suffisante pour déterminer  $z$  solution de (3.7). Nous montrons d'abord la non observabilité du système pour cette mesure, puis nous nous intéressons à l'injectivité de différentes applications.

### 4.3.1. Non observabilité de la mesure en concentration

Montrons dans un premier temps que la mesure de la concentration en solide ne rend pas le système (3.7) observable au sens de la définition 2.1.2.

**Définition 4.3.1.** Soit  $t_1 > t_0 \geqslant 0$ ,  $x_{\max} > x_{\min} \geqslant 0$ , et  $\tau \in ]t_0, t_1]$ . Posons  $X = L^2(x_{\min}, x_{\max}) \times L^2(t_0, \tau)$ . Soit  $Y$  un espace vectoriel normé. Soit  $G \in C^0([t_0, t_1]; \mathbb{R}_+)$ . Le système (3.7) est dit exactement observable au temps  $\tau$  pour l'opérateur de mesure  $\Psi_\tau \in \mathcal{L}(X, L^2(t_0, \tau; Y))$  si et seulement si il existe une constante  $k_\tau > 0$  telle que

$$\forall z_0 \in L^2(x_{\min}, x_{\max}), \forall u \in L^2(t_0, \tau), \|\Psi_\tau(z_0, u)\|_{L^2}^2 \geqslant k_\tau (\|z_0\|_{L^2}^2 + \|u\|_{L^2}^2). \quad (4.14)$$

**Théorème 4.3.2.** Supposons qu'il existe  $\mu > 0$  tel que  $G \geqslant \mu$ . Soit  $k \in L^\infty(x_{\min}, x_{\max}; Y)$ ,  $\tau \in ]t_0, t_1]$ . Définissons l'opérateur de mesure

$$\Psi_\tau : \begin{cases} X & \longrightarrow L^2(t_0, \tau; Y) \\ (z_0, u) & \longmapsto t \mapsto \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} k(x) z(t, x) dx \end{cases}$$

où  $z$  est la solution de (3.7) associée à la condition initiale  $z_0$  et à la condition au bord  $u$ . Alors le système (3.7) n'est pas exactement observable au temps  $\tau$  pour cet opérateur de mesure.

Le Théorème 4.3.2 est l'un de nos principaux résultats. On en déduit immédiatement le corollaire suivant en posant  $k : [x_{\min}, x_{\max}] \ni x \mapsto x^3$  et  $Y = \mathbb{R}$ .

**Corollaire 4.3.3.** La mesure de la concentration en solide ne rend le système (3.7) exactement observable pour aucun temps  $\tau \in ]t_0, t_1]$ .

*Démonstration du Théorème 4.3.2.* Soit  $k \in L^\infty(x_{\min}, x_{\max}; Y)$ . Posons  $M = \|k\|_{L^\infty}$ . Soit  $\tau \in ]t_0, t_1]$ . Il suffit de trouver une suite  $(z_0^n)_{n \in \mathbb{N}^*} \in L^2(x_{\min}, x_{\max})^{\mathbb{N}}$  telle que

$$\left\{ \begin{array}{ll} \|z_0^n\|_{L^2}^2 & \not\rightarrow 0 \\ \|\Psi_\tau(z_0^n, 0)\|_{L^2}^2 & \underset{n \rightarrow +\infty}{\longrightarrow} 0. \end{array} \right. \quad (4.15)$$

Posons, pour tout  $n \in \mathbb{N}^*$ ,  $y^n = \Psi_\tau(z_0^n, 0)$  dans  $L^2(t_0, \tau; Y)$  et  $z^n$  l'unique solution de (3.7) associée à la condition initiale  $z_0^n$  et à la condition au bord nulle. Soit  $n \in \mathbb{N}^*$ . On sait que  $z^n$  vérifie

$$\forall (t, x) \in \bar{\Omega}, z^n(t, x) = \begin{cases} z_0^n(x - \mathfrak{G}_1(t)) & \text{si } x - x_{\min} \geqslant \mathfrak{G}_1(t) \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (4.16)$$

où  $\mathfrak{G}_1 : t \in [t_0, t_1] \mapsto \int_{t_0}^t G(s) ds$ .

On a donc

$$\begin{aligned}
 \|\Psi_\tau(z_0^n, 0)\|_{L^2}^2 &= \int_{t_0}^\tau \|y^n\|_Y^2 dt \\
 &= \int_{t_0}^\tau \left\| \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} k(x) z^n(t, x) dx \right\|_Y^2 dt \\
 &\leq \int_{t_0}^\tau \left( \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \|k(x)\|_Y |z^n(t, x)| dx \right)^2 dt \\
 &\leq \|k\|_{L^\infty} \int_{t_0}^\tau \left( \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z^n(t, x) dx \right)^2 dt \\
 &\leq \|k\|_{L^\infty} \int_{t_0}^\tau \left( \int_{x_{\min} + \mathfrak{G}_1(t)}^{x_{\max}} z_0^n(x - \mathfrak{G}_1(t)) dx \right)^2 dt \\
 &= \|k\|_{L^\infty} \int_{t_0}^\tau \left( \int_{x_{\min}}^{x_{\max} - \mathfrak{G}_1(t)} z_0^n(\xi) d\xi \right)^2 dt \quad (\xi = x - \mathfrak{G}_1(t)) \\
 &= \|k\|_{L^\infty} \int_0^{\mathfrak{G}_1(\tau)} \left( \int_{x_{\min}}^{x_{\max} - s} z_0^n(\xi) d\xi \right)^2 \frac{ds}{G(\mathfrak{G}_1^{-1}(s))} \quad (s = \mathfrak{G}_1(t)) \\
 &\leq \mu \|k\|_{L^\infty} \int_0^{\mathfrak{G}_1(\tau)} \left( \int_{x_{\min}}^{x_{\max} - s} z_0^n(\xi) d\xi \right)^2 ds.
 \end{aligned}$$

Posons, pour tout  $n \in \mathbb{N}^*$  et pour tout  $x \in [x_{\min}, x_{\max}]$ ,

$$z_0^n(x) = \begin{cases} 2n^3(x - x_{\min}) & \text{si } x < x_{\min} + \frac{1}{2n^2}, \\ 2n(1 - n^2(x - x_{\min})) & \text{si } x \in \left[x_{\min} + \frac{1}{2n^2}, x_{\min} + \frac{1}{n^2}\right], \\ 0 & \text{si } x > x_{\min} + \frac{1}{n^2}. \end{cases} \quad (4.17)$$

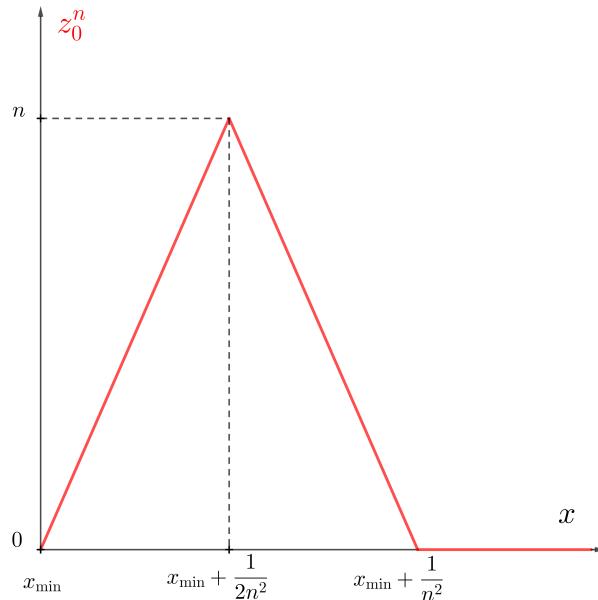


FIGURE 4.1. – Graphe de  $z_0^n$ .

On a bien, pour tout  $n \in \mathbb{N}^*$ ,  $z_0^n \in L^2(x_{\min}, x_{\max})$ . Vérifions que cette suite vérifie bien

les conditions (4.15). Pour tout  $x \in [x_{\min}, x_{\max}]$ , on a

$$z_0^n(x)^2 = \begin{cases} 4n^6(x - x_{\min})^2 & \text{si } x < x_{\min} + \frac{1}{2n^2}, \\ 4n^2(1 - n^2(x - x_{\min}))^2 & \text{si } x \in \left[x_{\min} + \frac{1}{2n^2}, x_{\min} + \frac{1}{n^2}\right] \\ 0 & \text{si } x > x_{\min} + \frac{1}{n^2} \end{cases}$$

Soit  $N \in \mathbb{N}^*$  tel que  $x_{\min} + \frac{1}{N^2} < x_{\max}$ . Pour  $n \geq N$ , on a :

$$\begin{aligned} \|z_0^n\|_{L^2}^2 &= \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z_0^n(x)^2 dx \\ &= 4n^6 \left[ \frac{(x - x_{\min})^3}{3} \right]_{x_{\min}}^{x_{\min} + \frac{1}{2n^2}} - 4 \left[ \frac{(1 - n^2(x - x_{\min}))^3}{3} \right]_{x_{\min} + \frac{1}{2n^2}}^{x_{\min} + \frac{1}{n^2}} \\ &= \frac{1}{3} \\ &\underset{n \rightarrow +\infty}{\not\rightarrow} 0. \end{aligned}$$

D'autre part :

$$\begin{aligned} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z_0^n(x) dx &= 2n^3 \left[ \frac{(x - x_{\min})^2}{2} \right]_{x_{\min}}^{x_{\min} + \frac{1}{2n^2}} + 2n \left[ \frac{(1 - n^2(x - x_{\min}))^2}{2} \right]_{x_{\min} + \frac{1}{2n^2}}^{x_{\min} + \frac{1}{n^2}} \\ &= \frac{1}{2n}. \end{aligned}$$

D'où :

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^{\tau} y_{z_0^n}(s)^2 ds &\leq \mu \|k\|_{L^\infty} \int_0^{\mathfrak{G}_1(\tau)} \left( \int_{x_{\min}}^{x_{\max}-s} z_0^n(\xi) d\xi \right)^2 ds \\ &\leq \mu \|k\|_{L^\infty} \int_0^{\mathfrak{G}_1(\tau)} \left( \frac{1}{2n} \right)^2 ds \\ &\leq \frac{\mu \|k\|_{L^\infty} \mathfrak{G}_1(\tau)}{4n^2} \\ &\underset{n \rightarrow +\infty}{\longrightarrow} 0. \end{aligned}$$

Donc les conditions (4.15) sont bien vérifiées, ce qui conclut la preuve.  $\square$

Dans la suite de ce chapitre, on posera  $Y = \mathbb{R}$  et  $k : [x_{\min}, x_{\max}] \ni x \mapsto x^3$ , de sorte que  $\Psi_\tau$  désigne l'opérateur de mesure jusqu'au temps  $\tau \in ]t_0, t_1]$  associé à la concentration en solide.

#### 4.3.2. Non injectivité de $(z_0, u) \mapsto y$

Montrons dans cette partie que, dans le cas de la mesure de la concentration en solide, l'opérateur de mesure  $\Psi_\tau$  associé n'est pas injectif (ce qui fournit une preuve alternative de sa non observabilité, c'est-à-dire du Corollaire 4.3.3).

**Théorème 4.3.4.** Soit  $\tau \in ]t_0, t_1]$ . Supposons  $G > 0$  constant et  $\tau G < x_{\max}$ . Alors  $\Psi_\tau$  défini par le Théorème 4.3.2 avec  $k : x \mapsto x^3$  n'est pas injectif.

*Démonstration.* Soit  $X_{u=0} = \{(z_0, 0) / z_0 \in H^1(x_{\min}, x_{\max}), \text{ supp } z_0 \subset [x_{\min}, x_{\max} - G\tau]\}$  un sous espace vectoriel de  $X$ . Il suffit de montrer que

$$\Psi_\tau|_{X_{u=0}} : \begin{cases} X_{u=0} & \longrightarrow L^2(t_0, \tau) \\ (z_0, u) & \longmapsto t \mapsto \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} x^3 z(t, x) dx \end{cases}$$

n'est pas injectif, où  $z$  est la solution de (3.7) associée à la condition initiale  $z_0$  et à la condition au bord  $u$ . Soit  $(z_0, u) \in X_{u=0}$ . Alors d'après le Théorème 3.2.6, (3.7) admet une unique solution  $z \in C^0([t_0, t_1]; H^1(x_{\min}, x_{\max})) \cap C^1([t_0, t_1]; L^2(x_{\min}, x_{\max}))$ . Posons  $y = \Psi_\tau(z_0, u)$ . On a  $y \in C^1([t_0, \tau])$ . De plus,  $z(\cdot, x_{\min}) = 0$  car  $u = 0$  et  $z(\cdot, x_{\max}) = 0$  d'après la Proposition 3.3.1. D'où, pour tout  $t \in [t_0, \tau]$ ,

$$\begin{aligned} y'(t) &= \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} x^3 \partial_t z(t, x) dx \\ &= -G \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} x^3 \partial_x z(t, x) dx \\ &= 3G \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} x^2 z(t, x) dx - G \left[ x^3 z(t, x) \right]_{x_{\min}}^{x_{\max}} \\ &= 3G \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} x^2 z(t, x) dx. \quad (\text{car } z(\cdot, x_{\min}) = z(\cdot, x_{\max}) = 0) \end{aligned}$$

Donc  $y \in C^2([t_0, \tau])$  et pour tout  $t \in [t_0, \tau]$ ,

$$\begin{aligned} y^{(2)}(t) &= 3G \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} x^2 \partial_t z(t, x) dx \\ &= -3G^2 \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} x^2 \partial_x z(t, x) dx \\ &= 6G^2 \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} x z(t, x) dx - 3G^2 \left[ x^2 z(t, x) \right]_{x_{\min}}^{x_{\max}} \\ &= 6G^2 \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} x z(t, x) dx. \quad (\text{car } z(\cdot, x_{\min}) = z(\cdot, x_{\max}) = 0) \end{aligned}$$

Donc  $y \in C^3([t_0, \tau])$  et pour tout  $t \in [t_0, \tau]$ ,

$$\begin{aligned} y^{(3)}(t) &= 6G^2 \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} x \partial_t z(t, x) dx \\ &= -6G^3 \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} x \partial_x z(t, x) dx \\ &= 6G^3 \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z(t, x) dx - 6G^3 \left[ x z(t, x) \right]_{x_{\min}}^{x_{\max}} \\ &= 6G^3 \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z(t, x) dx. \quad (\text{car } z(\cdot, x_{\min}) = z(\cdot, x_{\max}) = 0) \end{aligned}$$

Donc  $y \in C^4([t_0, \tau])$  et pour tout  $t \in [t_0, \tau]$ ,

$$\begin{aligned} y^{(4)}(t) &= 6G^3 \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \partial_t z(t, x) dx \\ &= -6G^4 \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \partial_x z(t, x) dx \\ &= -6G^4 \left[ z(t, x) \right]_{x_{\min}}^{x_{\max}} \\ &= 0. \quad (\text{car } z(\cdot, x_{\min}) = z(\cdot, x_{\max}) = 0) \end{aligned}$$

Ainsi,  $\text{Im } \Psi_\tau|_{X_{u=0}} \subset \mathbb{R}_3[t]$  (l'espace des fonctions polynomiales de degré inférieur ou égal à trois) donc  $\text{rg } \Psi_\tau|_{X_{u=0}} \leqslant 4$ . Or  $\dim X_{u=0} = +\infty$ . Donc d'après le théorème du rang,  $\dim \text{Ker } \Psi_\tau|_{X_{u=0}} = +\infty$ . Donc  $\ker \Psi_\tau|_{X_{u=0}} \neq \emptyset$ , donc  $\Psi_\tau|_{X_{u=0}}$  n'est pas injectif. Donc  $\Psi_\tau$  n'est pas injectif.  $\square$

Remarquons que ce résultat repose essentiellement sur le fait que  $z(\cdot, x_{\max}) = 0$ . La non injectivité de la mesure provient donc du fait que le système est observé sur un temps trop court pour que la condition initiale soit transportée « en-dehors » du domaine  $[x_{\min}, x_{\max}]$ . Si le système était observé sur un temps suffisamment long, voire sur  $[t_0, +\infty[$ , on pourrait montrer par une technique similaire l'injectivité de la mesure. En effet,  $y^{(4)}$  s'exprimerait linéairement en fonction de  $z(\cdot, x_{\max})$ , ce qui permettrait de reconstruire  $z_0$  en utilisant la forme explicite de la solution de l'équation de transport. Dans la section suivante, nous utilisons cette méthode pour démontrer l'injectivité de la mesure dans le cas où  $z_0 = 0$  et  $u$  est inconnu.

#### 4.3.3. Injectivité de $u \mapsto y$ pour $z_0 = 0$

Dans cette section, on montre l'injectivité de la mesure  $\Psi_\tau$  étudiée dans la partie précédente sur un sous espace vectoriel de  $X$  où la condition initiale est nulle.

**Proposition 4.3.5.** Soit  $\tau \in ]t_0, t_1]$ . Supposons  $G > 0$  constant. Soit  $X_{z_0=0} = \{(0, u) \in X / u \in H^4(t_0, \tau)\}$ . Alors  $\Psi_\tau|_{X_{z_0=0}}$  est injectif.

Nous proposons deux preuves de cette proposition. La première permet de relier explicitement, via une équation différentielle ordinaire, un élément de  $X_{z_0=0}$  à son image par  $\Psi_\tau$ . La seconde fait appel au théorème de convolution de Titchmarsh.

*Démonstration.* La preuve repose sur des intégrations par parties successives similaires à celles utilisées dans la preuve du Théorème 4.3.4. Soit  $(0, u) \in X_{z_0=0}$ . D'après le Théorème 3.2.6, (3.7) admet une unique solution  $z \in C^0([t_0, \tau]; H^1(x_{\min}, x_{\max})) \cap C^1([t_0, \tau]; L^2(x_{\min}, x_{\max}))$ . Posons  $y = \Psi_\tau(z_0, u)$ . On a alors  $y \in C^1([t_0, \tau])$ . De plus,  $z(\cdot, x_{\min}) = u$  et  $z(\cdot, x_{\max}) = 0$  d'après la Proposition 3.3.1 car  $G\tau < x_{\max}$  et  $z_0 = 0$ . En reprenant les calculs menés dans la démonstration du Théorème 4.3.4, on obtient pour tout  $t \in [t_0, \tau]$ ,

$$\begin{aligned} y'(t) &= 3G \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} x^2 z(t, x) dx - G \left[ x^3 z(t, x) \right]_{x_{\min}}^{x_{\max}} \\ &= 3G \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} x^2 z(t, x) dx + G x_{\min}^3 u(t). \quad (\text{car } z(\cdot, x_{\min}) = u \text{ et } z(\cdot, x_{\max}) = 0) \end{aligned}$$

Or  $H^4(t_0, \tau)$  s'injecte de façon compacte dans  $C^3([t_0, \tau])$ . Donc  $y \in C^2([t_0, \tau])$  et pour tout  $t \in [t_0, \tau]$ ,

$$\begin{aligned} y^{(2)}(t) &= 6G^2 \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} x z(t, x) dx + 3G^2 \left[ x^2 z(t, x) \right]_{x_{\min}}^{x_{\max}} - G x_{\min}^3 u'(t) \\ &= 6G^2 \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} x z(t, x) dx + 3G^2 x_{\min}^2 u(t) + G x_{\min}^3 u'(t). \end{aligned}$$

Donc  $y \in C^3([t_0, \tau])$  et pour tout  $t \in [t_0, \tau]$ ,

$$\begin{aligned} y^{(3)}(t) &= 6G^3 \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z(t, x) dx - 6G^3 \left[ x z(t, x) \right]_{x_{\min}}^{x_{\max}} + 3G^2 x_{\min}^2 u'(t) + G x_{\min}^3 u^{(2)}(t) \\ &= 6G^3 \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z(t, x) dx + 6G^3 x_{\min} u(t) + 3G^2 x_{\min}^2 u'(t) + G x_{\min}^3 u^{(2)}(t). \end{aligned}$$

Donc  $y \in C^4([t_0, \tau])$  et pour tout  $t \in [t_0, \tau]$ ,

$$\begin{aligned} y^{(4)}(t) &= -6G^4 [z(t, x)]_{x_{\min}}^{x_{\max}} + 6G^3 x_{\min} u'(t) + 3G^2 x_{\min}^2 u^{(2)}(t) + G x_{\min}^3 u^{(3)}(t) \\ &= 6G^4 u(t) + 6G^3 x_{\min} u'(t) + 3G^2 x_{\min}^2 u^{(2)}(t) + G x_{\min}^3 u^{(3)}(t). \end{aligned}$$

Distinguons alors deux cas.

**Cas 1 :**  $x_{\min} = 0$ . Alors

$$u = \frac{1}{6G^4} y^{(4)}. \quad (4.18)$$

Donc  $y$  permet de déterminer  $u$  de manière unique.

**Cas 2 :**  $x_{\min} > 0$ . On a alors

$$\begin{cases} y'(t_0) = G x_{\min}^3 u(t_0) \\ y^2(t_0) = 3G^2 x_{\min}^2 u(t_0) + G x_{\min}^3 u'(t_0) \\ y^{(3)}(t_0) = 6G^3 x_{\min} u(t_0) + 3G^2 x_{\min}^2 u'(t_0) + G x_{\min}^3 u^{(2)}(t_0). \end{cases} \quad (4.19)$$

Il s'agit d'un système triangulaire supérieur à diagonale non nulle car  $x_{\min} > 0$ . Donc  $u(t_0)$ ,  $u'(t_0)$  et  $u^{(2)}(t_0)$  sont déterminés de manière unique. De plus,  $u$  satisfait l'équation différentielle ordinaire à coefficients constants d'ordre 3 suivante :

$$6G^4 u + 6G^3 x_{\min} u' + 3G^2 x_{\min}^2 u^{(2)} + G x_{\min}^3 u^{(3)} = y^{(4)} \text{ dans } [t_0, \tau]. \quad (4.20)$$

Donc d'après le théorème de Cauchy-Lipschitz, il existe une unique solution à ce problème de Cauchy. Donc  $y$  détermine  $u$  de manière unique.

Ainsi, dans les deux cas,  $y$  détermine  $u$  de manière unique. Or  $z_0 = 0$ . Donc  $y$  détermine  $(u, z_0)$  de manière unique. Donc  $\Psi_\tau|_{X_{z_0=0}}$  est injectif.  $\square$

*Remarque 4.3.6.* Dans cette preuve, le fait que  $(z_0, u) \in X_{z_0=0} \Rightarrow z_0 = 0$  n'est utilisé qu'à la fin, pour montrer que si  $u$  est connu, alors  $(z_0, u)$  est connu. Ainsi, il aurait suffit de remplacer  $X_{z_0=0}$  par  $X_{z_0=z_0^*} = \{(z_0, u) \in X / z_0 = z_0^*\}$  pour montrer que quelque soit la condition initiale  $z_0$ , la connaissance de la concentration en solide jusqu'au temps  $\tau > 0$  permet de reconstruire la condition au bord  $u$  jusqu'à ce même  $\tau$ . En revanche, conformément au Théorème 4.3.4, la condition initiale n'est quant à elle pas déterminée par cette mesure.

*Remarque 4.3.7.* Cette preuve peut également fournir une expression de l'inverse de  $\Psi_\tau$ , à condition de résoudre l'EDO (4.20) si  $x_{\min} \neq 0$ . De plus, cette preuve montre l'observabilité de l'opérateur  $\Psi_\tau$ , au sens du Théorème 4.3.8, que l'on obtient directement via les équations (4.18) et (4.20).

Cette preuve fournit immédiatement le résultat suivant.

**Théorème 4.3.8.** Soit  $\tau \in ]t_0, t_1]$ . Supposons  $G > 0$  constant. Si  $x_{\min} = 0$ , alors

$$\forall u \in H^4(t_0, \tau), \|\Psi_\tau(0, u)\|_{H^4} \geq 6G^4 \|u\|_{L^2}. \quad (4.21)$$

Sinon, (i.e. si  $x_{\min} > 0$ ), alors

$$\forall u \in H^4(t_0, \tau), \|\Psi_\tau(0, u)\|_{H^4} \geq C, \|u\|_{H^3} \quad (4.22)$$

avec  $C = \min(6G^4, 6G^3 x_{\min}, 3G^2 x_{\min}^2, G x_{\min}^3)$ .

Nous proposons une seconde preuve de la Proposition 4.3.5, qui se base sur le théorème suivant :

**Théorème 4.3.9** (Théorème de convolution de Titchmarsh, [Tit26, Théorème VII]). *Soit  $\kappa > 0$ . Soit  $\varphi, \psi \in L^1(0, \kappa)$ . Si*

$$\int_0^t \varphi(s)\psi(t-s)ds = 0. \quad (4.23)$$

*pour presque tout  $t \in ]0, \kappa[$ , alors il existe  $\lambda, \mu \geq 0$  tels que  $\lambda + \mu \geq \kappa$ ,  $\varphi|_{]0, \lambda[} = 0$  presque partout, et  $\psi|_{]0, \mu[} = 0$  presque partout.*

Avec ce Théorème 4.3.9 dont nous n'exposons pas la preuve (la référence [Tit26] en propose une), nous entamons notre seconde preuve de la Proposition 4.3.5.

*Démonstration de la Proposition 4.3.5.* Soit  $(u_1, u_2) \in H^4(t_0, \tau)$ . Soit  $u = u_1 - u_2$  et  $y = \Psi_\tau(0, u_1) - \Psi_\tau(0, u_2)$ . Supposons que  $y = 0$  et montrons que  $u = 0$ . Soit  $(z_1, z_2)$  les solutions de (3.7) respectivement associées à  $(0, u_1)$  et  $(0, u_2)$ , de sorte que  $z$  est la solution de (3.7) associée à  $(0, u)$ . Rappelons qu'ici  $k : x \in [x_{\min}, x_{\max}] \mapsto x^3$ . On a, pour tout  $t \in [t_0, \tau]$  :

$$\begin{aligned} 0 &= y(t) \\ &= \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} k(x)z(t, x)dx \\ &= \int_{x_{\min}}^{G(t-t_0)+x_{\min}} k(x)u\left(t - \frac{x-x_{\min}}{G}\right)dx \quad (\text{d'après (3.11)}) \\ &= \int_0^{t-t_0} k(G(t-s-t_0) + x_{\min})u(s+t_0)ds. \quad (s = t + t_0 - \frac{x-x_{\min}}{G}) \end{aligned}$$

Posons, pour tout  $s \in [0, t-t_0]$ ,

$$\begin{aligned} \tilde{u}(s) &= u(s+t_0), \\ \tilde{k}(s) &= k(G(s+t_0) + x_{\min}). \end{aligned}$$

On a alors pour tout  $\tilde{t} \in [0, t-t_0]$ ,

$$\int_0^{\tilde{t}} \tilde{k}(\tilde{t}-s)\tilde{u}(s)ds = 0.$$

Or  $\tilde{k}(s) = k(G(s+t_0) + x_{\min}) = (G(s+t_0) + x_{\min})^3 \neq 0$  pour tout  $s > 0$ . Donc d'après le Théorème 4.3.9,  $\tilde{u} = 0$  donc  $u = 0$ , ce qui conclut la preuve.  $\square$

*Remarque 4.3.10.* Notons que dans cette seconde preuve, la seule propriété utilisée sur  $k$  est que  $k$  est presque partout non nul. Par conséquent, la Proposition 4.3.5 peut en réalité s'exprimer sous une forme plus générale, où l'opérateur de mesure  $\Psi_\tau$  est associé à un noyau  $k$  presque partout non nul.

#### 4.3.4. Non injectivité de $(z_0, u, G) \mapsto y$

Intéressons nous dans cette section à un problème d'injectivité différent de ceux évoqués dans les parties précédentes. Supposons que la vitesse  $G$  de croissance des cristaux est « mal connue ». C'est par exemple le cas si l'on estime  $G$  en utilisant la formule (4.8) et la mesure de la concentration en solide, et si la solubilité est une donnée avec une forte incertitude. Montrons qu'alors la mesure de la concentration en solide ne permet pas de déterminer la DTC de manière unique.

**Proposition 4.3.11.** *Supposons  $x_{\min} = 0$ . Soit  $\tau \in ]t_0, t_1]$ . Posons*

$$X = \left\{ z_0 \in L^2(0, x_{\max}) / \text{supp } z_0 \subset \left[0, x_{\max} - \int_{t_0}^{\tau} G(s) ds\right] \right. \\ \times L^2(t_0, \tau) \times C^0([t_0, t_1]; \mathbb{R}_+^*).$$

Soit

$$\Theta_{\tau} : \begin{cases} X & \longrightarrow L^2(t_0, \tau) \\ (z_0, u, G) & \longmapsto t \mapsto \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} x^3 z(t, x) dx \end{cases}$$

où  $z$  est la solution de (3.7) associée à la vitesse  $G$ , à la condition initiale  $z_0$  et à la condition au bord  $u$ . Alors  $\Theta_{\tau}$  n'est pas injectif et pour tout  $(z_0^1, u^1, G^1) \in X$ , il existe  $(z_0^2, u^2, G^2) \in X$  tel que

$$\begin{cases} (z_0^1, u^1, G^1) & \neq (z_0^2, u^2, G^2) \\ \Theta_{\tau}(z_0^1, u^1, G^1) & = \Theta_{\tau}(z_0^2, u^2, G^2). \end{cases} \quad (4.24)$$

*Démonstration.* Soit  $(z_0^1, u^1, G^1) \in X$ . Soit  $C > 1$  tel que

$$\text{supp}(z_0 \circ (C \text{id})) \subset \left[0, x_{\max} - \int_{t_0}^{\tau} G(s) ds\right].$$

Soit  $z^1 \in C^0([t_0, t_1]; L^2(0, x_{\max}))$  la solution de (3.7) associée à  $(z_0^1, u^1, G^1)$ . Posons :

$$z_0^2(x) = \begin{cases} C^4 z_0^1(Cx) & \text{si } x \leq \frac{x_{\max}}{C}, \forall x \in [0, x_{\max}], \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.25)$$

$$u^2 = C^4 u^1, \quad (4.26)$$

$$G^2 = \frac{G^1}{C}. \quad (4.27)$$

On a bien  $(z_0^2, u^2, G^2) \in X$  et  $(z_0^1, u^1, G^1) \neq (z_0^2, u^2, G^2)$ . Posons également

$$z^2(t, x) = \begin{cases} C^4 z^1(t, Cx) & \text{si } x \leq \frac{x_{\max}}{C}, \forall (t, x) \in \bar{\Omega}, \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.28)$$

$$y^i = \Theta_{\tau}(z_0^i, u^i, G^i), \forall i \in \{1, 2\}. \quad (4.29)$$

Montrons que  $z^2$  est la solution de (3.7) associée à  $(z_0^2, u^2, G^2)$  puis que  $y^1 = y^2$ , ce qui achèvera la démonstration. On a bien  $z^2 \in C^0([t_0, t_1]; L^2(0, x_{\max}))$ . On veut montrer que

$$\begin{cases} \partial_t z^2(t, x) = -G^2(t) \partial_x z^2(t, x) & \forall t \in ]t_0, t_1[, \forall x \in ]x_{\min}, x_{\max}[ \\ z^2(0, x) = z_0^2(x) & \forall x \in ]x_{\min}, x_{\max}[ \\ z^2(t, 0) = u^2(t) & \forall t \in ]t_0, t_1[. \end{cases} \quad (4.30)$$

en utilisant les équations (4.25–4.27). Afin de procéder formellement, on utilise la définition 3.2.4 de la notion de solution de l'EDP (4.30). D'après la définition 3.2.4, pour tout  $t \in [t_0, t_1]$  et pour tout  $\varphi \in C^1(\overline{\Omega}_t)$  tel que  $\varphi(s, x_{\max}) = 0$  pour tout  $s \in [t_0, t]$ , on a

$$\begin{aligned}
 0 &= \left( - \int_{t_0}^t \int_0^{x_{\max}} (\partial_t \varphi(s, x) + G^1(s) \partial_x \varphi(s, x)) z^1(s, x) dx ds \right. \\
 &\quad \left. + \int_0^{x_{\max}} z^1(t, x) \varphi(t, x) dx - \int_0^{x_{\max}} z_0^1(x) \varphi(0, x) dx \right. \\
 &\quad \left. - \int_{t_0}^t G^1(s) u^1(s) \varphi(s, 0) ds \right) \times C^4 \quad (\text{d'après (3.8)}) \\
 &= -C \int_{t_0}^t \int_0^{\frac{x_{\max}}{C}} (\partial_t \varphi(s, C\xi) + G^1(s) \partial_x \varphi(s, C\xi)) C^4 z^1(s, C\xi) d\xi ds \\
 &\quad + C \int_0^{\frac{x_{\max}}{C}} C^4 z^1(t, C\xi) \varphi(t, C\xi) d\xi - C \int_0^{\frac{x_{\max}}{C}} C^4 z_0^1(C\xi) \varphi(0, C\xi) d\xi \\
 &\quad - \int_{t_0}^t G^1(s) C^4 u^1(s) \varphi(s, 0) ds \quad (\xi = \frac{x}{C}) \\
 &= -C \int_{t_0}^t \int_0^{\frac{x_{\max}}{C}} (\partial_t \varphi(s, C\xi) + G^1(s) \partial_x \varphi(s, C\xi)) z^2(s, \xi) d\xi ds \\
 &\quad + C \int_0^{\frac{x_{\max}}{C}} z^2(t, \xi) \varphi(t, C\xi) d\xi - C \int_0^{\frac{x_{\max}}{C}} z_0^2(\xi) \varphi(0, C\xi) d\xi \\
 &\quad - C \int_{t_0}^t G^2(s) u^2(s) \varphi(s, 0) ds. \quad (\text{d'après (4.28)})
 \end{aligned}$$

Soit  $t \in [t_0, t_1]$  et  $\psi \in C^1(\overline{\Omega}_t)$  tel que  $\psi(s, x_{\max}) = 0$  pour tout  $s \in [t_0, t]$ . Pour tout  $(t, x) \in [t_0, t_1] \times [0, Cx_{\max}]$ , posons

$$\varphi(t, x) = \begin{cases} \psi(t, \frac{x}{C}) & \text{si } x \leq x_{\max} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.31)$$

On a alors

$$\begin{aligned}
 0 &= - \int_{t_0}^t \int_0^{x_{\max}} \left( \partial_t \varphi(s, C\xi) + \frac{G^2(s)}{C} \partial_x \varphi(s, C\xi) \right) z^2(s, \xi) d\xi ds \\
 &\quad + \int_0^{x_{\max}} z^2(t, \xi) \varphi(t, C\xi) d\xi - \int_0^{x_{\max}} z_0^2(\xi) \varphi(0, C\xi) d\xi \\
 &\quad - \int_{t_0}^t G^2(s) u^2(s) \varphi(s, 0) ds \\
 &= - \int_{t_0}^t \int_0^{x_{\max}} \left( \partial_t \psi(s, \xi) + \frac{G^2(s)}{C} C \partial_x \psi(s, \xi) \right) z^2(s, \xi) d\xi ds \\
 &\quad + \int_0^{x_{\max}} z^2(t, \xi) \psi(t, \xi) d\xi - \int_0^{x_{\max}} z_0^2(\xi) \psi(0, \xi) d\xi \\
 &\quad - \int_{t_0}^t G^2(s) u^2(s) \psi(s, 0) ds \quad (\text{d'après (4.31)}) \\
 &= - \int_{t_0}^t \int_0^{x_{\max}} \left( \partial_t \psi(s, \xi) + G^2(s) \partial_x \psi(s, \xi) \right) z^2(s, \xi) d\xi ds \\
 &\quad + \int_0^{x_{\max}} z^2(t, \xi) \psi(t, \xi) d\xi - \int_0^{x_{\max}} z_0^2(\xi) \psi(0, \xi) d\xi \\
 &\quad - \int_{t_0}^t G^2(s) u^2(s) \psi(s, 0) ds.
 \end{aligned}$$

Donc  $z^2$  est bien la solution de (3.7) associée à  $(z_0^2, u^2, G^2)$ . Il reste donc à montrer que  $y^1 = y^2$ . Soit  $t \in [t_0, \tau]$ . On a

$$\begin{aligned}
 y^2(t) &= \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} x^3 z^2((t, x)) dx \\
 &= \int_{x_{\min}}^{\frac{x_{\max}}{C}} C^4 x^3 z^1(t, Cx) dx && (\text{d'après (4.28)}) \\
 &= C^4 \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \left(\frac{\xi}{C}\right)^3 z^1(t, \xi) \frac{d\xi}{C} && (\xi = Cx) \\
 &= \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} x^3 z^1((t, x)) dx \\
 &= y^1(t).
 \end{aligned}$$

D'où  $\Theta_\tau(z_0^1, u^1, G^1) = \Theta_\tau(z_0^2, u^2, G^2)$ . Donc  $\Theta_\tau$  n'est pas injectif et le système (4.24) est bien vérifié.  $\square$

## 4.4. Simulations numériques

Dans cette section, nous présentons les résultats numériques obtenus par la méthode présentée dans la Section 4.2, bien que nous ayons montré, dans la Section 4.3, les limites de cette méthode.

### 4.4.1. Simulation de l'équation de transport

Nous commençons dans cette partie par mettre en place une méthode numérique pour simuler l'équation de transport. Plusieurs méthodes ont été envisagées. La mise en place d'un schéma numérique simple basé sur les différences finies a été implémenté dans une première approche. Puisque la vitesse de déplacement  $G$  est positive, un schéma décentré à gauche est stable sous condition CFL (Courant–Friedrichs–Lewy). La simulation de l'équation de transport n'étant pas au cœur du travail réalisé, nous nous concentrerons uniquement dans ce rapport sur l'approche finale retenue : une implémentation numérique de la solution explicite obtenue via la méthode des caractéristiques.

Soit  $t_1 > t_0 \geqslant 0$ ,  $x_{\max} > x_{\min} \geqslant 0$ . Soit  $N_t$ ,  $N_x \in \mathbb{N}^*$ . Posons  $\Delta t = \frac{t_1 - t_0}{N_t}$  et  $\Delta x = \frac{x_{\max} - x_{\min}}{N_x}$ . Pour tout  $i \in \llbracket 0, N_t \rrbracket$  et pour tout  $j \in \llbracket 0, N_x \rrbracket$ , on pose  $\mathfrak{t}_i = t_0 + i\Delta t$  et  $\mathfrak{x}_j = x_{\min} + j\Delta x$ . Soit  $z_0 \in C^0([x_{\min}, x_{\max}])$ ,  $u \in C^0([t_0, t_1])$ ,  $G \in C^0([t_0, t_1]; \mathbb{R}_+)$ . On cherche à approcher  $z \in C^0([t_0, t_1] \times [x_{\min}, x_{\max}])$  solution de (3.7) associée à  $z_0$ ,  $u$  et  $G$ . On procède par induction :

- On pose, pour tout  $j \in \llbracket 0, N_x \rrbracket$ ,  $z_{0,j} = z_0(\mathfrak{x}_j)$ . Par définition de  $z$ ,  $z_{0,j}$  est une bonne approximation de  $z(\mathfrak{t}_0, \mathfrak{x}_j)$ .
- Supposons connue une approximation de  $z$  au temps  $\mathfrak{t}_i$  pour un certain  $i \in \llbracket 0, N_t - 1 \rrbracket$ . Déterminons une approximation de  $z$  au temps  $\mathfrak{t}_{i+1}$ .
  - Posons  $z_{i+1,0} = u(\mathfrak{x}_{i+1})$ . Par définition de  $z$ ,  $z_{i+1,0}$  est une bonne approximation de  $z(\mathfrak{t}_{i+1}, \mathfrak{x}_0)$ .
  - Pour tout  $j \in \llbracket 1, N_x \rrbracket$ , posons  $\tilde{z}_{i+1}(\mathfrak{x}_j + G(\mathfrak{t}_i)) = z_{i,j}$ . Notons  $(z_{i+1,j})_{j \in \llbracket 1, N_x \rrbracket}$  l'interpolation linéaire de  $\tilde{z}_{i+1}$  sur la discrétisation  $(\mathfrak{x}_j)_{j \in \llbracket 1, N_x \rrbracket}$ . D'après (3.7),  $z_{i+1,j}$  est une bonne approximation de  $z(\mathfrak{t}_{i+1}, \mathfrak{x}_j)$  pour tout  $j \in \llbracket 0, N_x \rrbracket$ .

La Figure 4.3 représente l'approximation numérique de  $z$  obtenue pour des fonctions  $z_0$ ,  $u$  et  $G$  fixées.

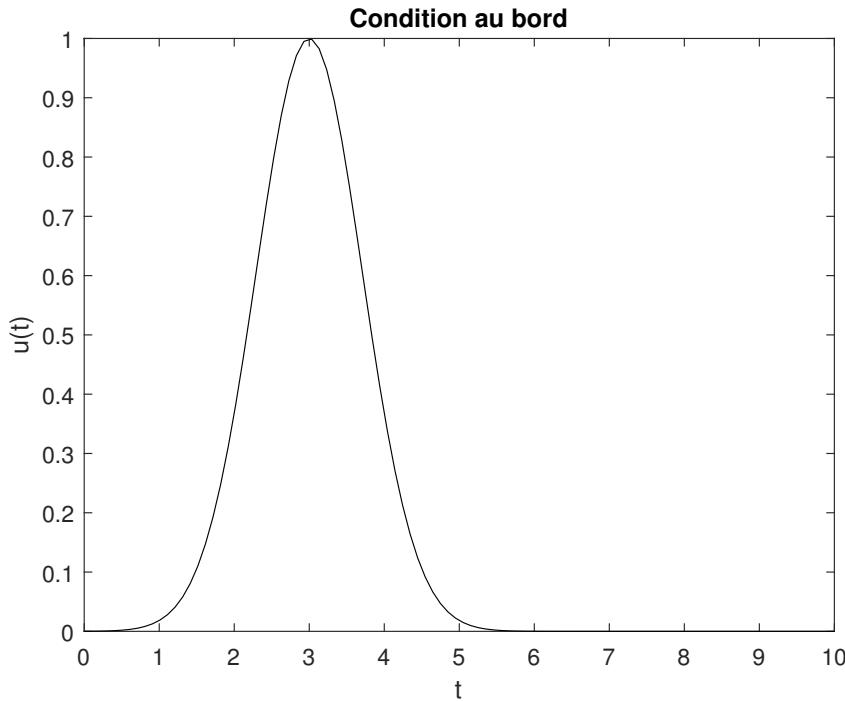


FIGURE 4.2. – Condition au bord de l'équation de transport.

#### 4.4.2. Approximation de l'observateur

Nous testons numériquement dans cette section la première partie de la méthode de Luenberger : l'approximation de la transformation linéaire  $Tz$  de l'état. Nous commençons par ajouter à la simulation de l'équation de transport vue dans la section précédente la mesure en ligne de la concentration en solide. Pour tout  $i \in \llbracket 0, N_t \rrbracket$ , on approche  $y(\mathbb{t}_i) = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} x^3 z(\mathbb{t}_i, x) dx$  par la méthode des rectangles en posant

$$y_i = \Delta x \sum_{j=1}^{N_x} x_j^3 z_{i,j}. \quad (4.32)$$

La Figure 4.4 représente l'évolution de  $y$  pour la solution de l'équation de transport de la Figure 4.3.

Fixons  $\lambda < 0$ . Nous mettons en œuvre une simulation du système (4.5). Nous fixons  $\zeta(t_0) = \zeta_0 = 0$  et nous utilisons un schéma d'Euler implicite :

$$\forall i \in \llbracket 1, N_t \rrbracket, \zeta(\mathbb{t}_i) \approx \zeta_i = \frac{1}{1 - \lambda \Delta t} (\zeta_{i-1} + \Delta t y_i). \quad (4.33)$$

Afin de vérifier que  $\zeta$  est une bonne approximation de  $Tz$ , nous calculons explicitement une approximation  $Tz$  à partir de la connaissance de  $z$ . Nous devons donc obtenir une approximation de  $a$ . Puisque  $a$  satisfait également une équation de transport (4.7) dont on calcule explicitement la solution (4.10) via la méthode des caractéristiques, nous déterminons  $(a_{i,j})_{i \in \llbracket 0, N_t \rrbracket, j \in \llbracket 0, N_x \rrbracket}$  une approximation de  $a$  de la même façon que nous avons

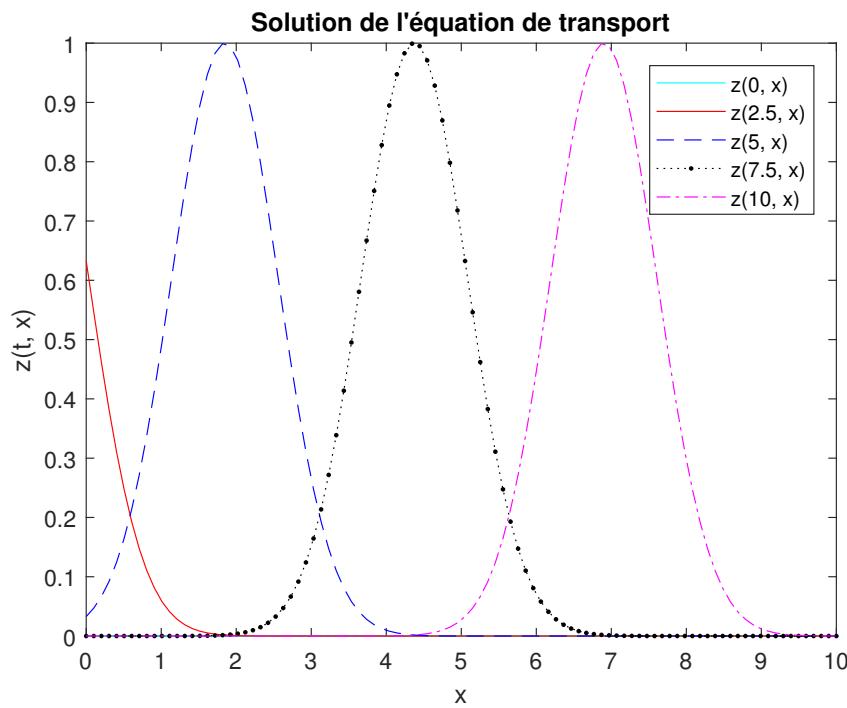


FIGURE 4.3. – Approximation numérique de la solution de l'équation de transport. Les constantes fixées sont  $t_0 = 0$ ,  $t_1 = 10$ ,  $N_t = 100$ ,  $x_{\min} = 0$ ,  $x_{\max} = 10$ ,  $N_x = 100$ . On fixe également la condition initiale  $z_0 = 0$ , la vitesse  $G = 1$  et la condition au bord  $u$  qui est tracée en Figure 4.2. On représente la solution obtenue pour  $t \in \{0, 2.5, 5, 7.5, 10\}$ . Les graphiques sont obtenus à l'aide du logiciel MATLAB®.

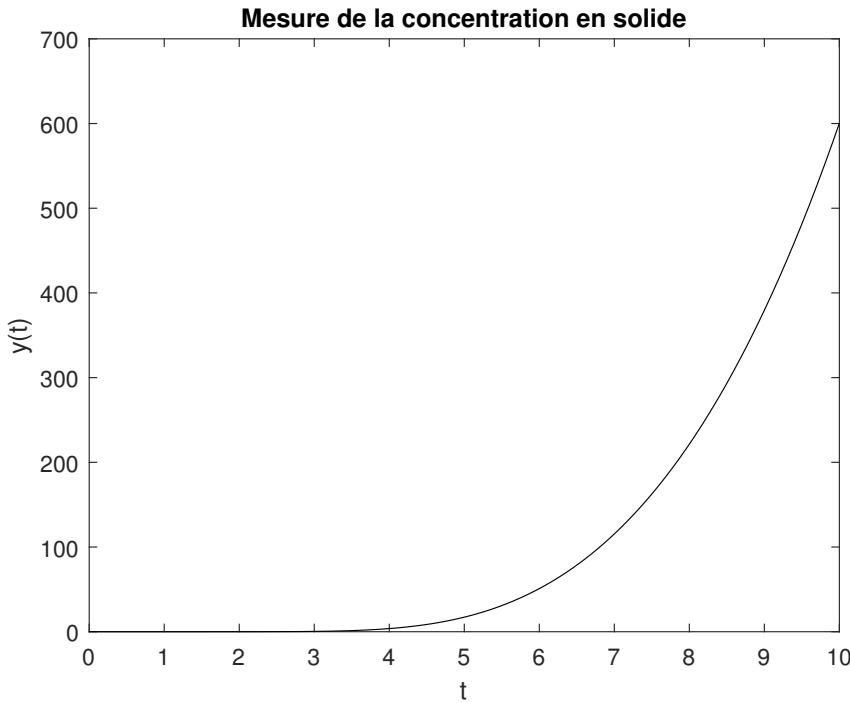


FIGURE 4.4. – Approximation numérique de la mesure  $y$ . Sous les mêmes conditions que dans la Figure 4.3, on trace l'évolution de l'approximation de  $y$  obtenue par la méthode des rectangles.

déterminé une approximation de  $z$  dans la Section 4.4.1. Enfin, pour tout  $i \in \llbracket 0, N_t \rrbracket$ , nous approchons  $Tz(\mathbb{t}_i) = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} a(t, x)z(t, x)dx$  par la méthode des rectangles en posant

$$(Tz)_i = \Delta x \sum_{j=1}^{N_x} a_{i,j} z_{i,j}. \quad (4.34)$$

On peut alors vérifier numériquement sur une simulation de l'équation de transport que  $Tz - \zeta \rightarrow 0$ . La Figure 4.5 représente l'évolution de l'écart entre  $Tz$  et  $\zeta$  au cours du temps pour la solution de l'équation de transport obtenue dans la Figure 4.3.

#### 4.4.3. Reconstruction de l'état

Nous présentons dans cette section une méthode permettant d'accomplir la seconde partie de la stratégie de Luenberger : l'inversion de la transformation linéaire  $T$ . Soit  $\lambda_{\min} < \lambda_{\max} < 0$ . Discrétisons l'intervalle  $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$ . Soit  $N_\lambda \in \mathbb{N}^*$ . Posons  $\Delta\lambda = \frac{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}{N_\lambda}$  et pour tout  $k \in \llbracket 0, N_\lambda \rrbracket$ ,  $\lambda_k = \lambda_{\min} + k\Delta\lambda$ . Pour tout  $(i, j, k) \in \llbracket 0, N_t \rrbracket \times \llbracket 0, N_x \rrbracket \times \llbracket 0, N_\lambda \rrbracket$ , posons  $a_{i,j,k}$  l'approximation de  $a(\mathbb{t}_i, \mathbb{x}_j)$  où  $a$  est la solution de (4.7) associée au paramètre  $\lambda_k$  et  $\zeta_{i,k}$  l'approximation de  $\zeta(\mathbb{t}_i)$  où  $\zeta$  est la solution de (4.5) associée à  $\lambda_k$ . Nous cherchons à reconstruire  $z$  en appliquant la méthode de Tikhonov à chaque instant  $\mathbb{t}_i$  pour  $i \in \llbracket 0, N_t \rrbracket$ .

#### Méthode locale (à $t$ fixé)

Fixons  $i \in \llbracket 0, N_t \rrbracket$ . Supposons connue une approximation de  $T(\lambda_k)z(\mathbb{t}_i)$  pour tout  $k \in \llbracket 0, N_\lambda \rrbracket$  et tentons de reconstruire  $z_{i,j}$  pour tout  $j \in \llbracket 1, N_x \rrbracket$ . Soit  $K = (a_{i,j,k})_{k \in \llbracket 0, N_\lambda \rrbracket, j \in \llbracket 1, N_x \rrbracket}$ ,

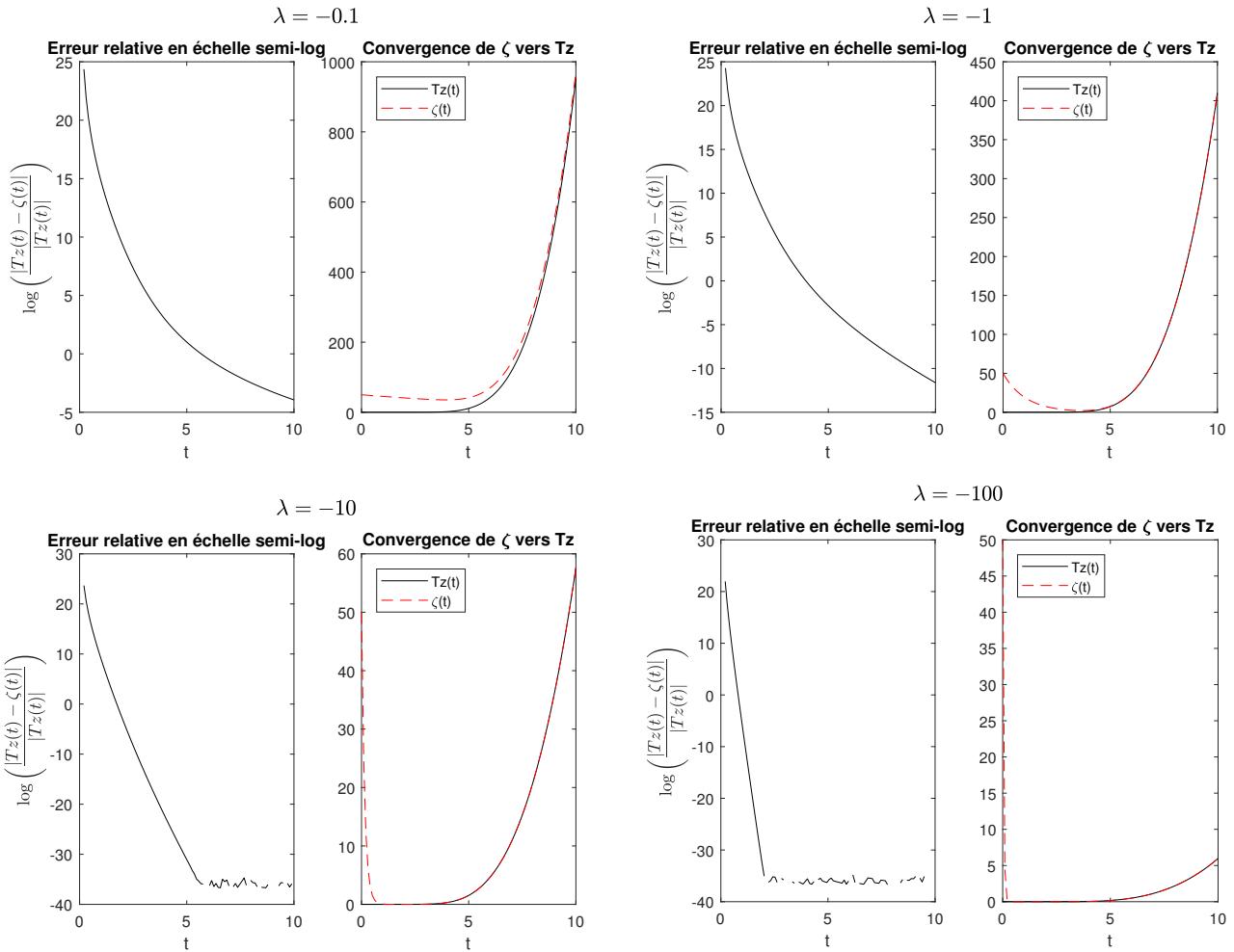


FIGURE 4.5. – Évolution de l'écart entre  $Tz$  et  $\zeta$ . On se place dans le cadre de la simulation de la Figure 4.3. On trace l'évolution de l'écart relatif  $\varepsilon(t) = \frac{|Tz(t) - \zeta(t)|}{|Tz(t)|}$  pour  $\lambda \in \{-100, -10, -1, -0, 1\}$ . Cet écart diminue quand  $t$  augmente, jusqu'à atteindre une valeur à saturation de l'ordre de  $10^{-35}$  due à l'incertitude sur le calcul de  $Tz$ . Dans la pratique, on fixera  $\zeta(t_0) = 0$  car on sait que  $Tz(t_0) = 0$ . Théoriquement, on aurait alors  $\zeta = Tz$ . Numériquement, on a dans ce cas un écart relatif constant de l'ordre de  $10^{-35}$  entre  $\zeta$  et  $Tz$ . Sur ce graphique, on fixe arbitrairement  $\zeta(t_0) \neq 0$  pour vérifier la vitesse de convergence de  $\zeta$  vers  $Tz$ . De cette façon, la vitesse de convergence de  $Tz - \zeta$  vers 0 augmente lorsque  $\lambda$  diminue. En effectuant une régression linéaire avant la saturation on peut

$$\text{estimer la vitesse de convergence à } \begin{cases} \mathcal{O}(e^{-7.6t}) & \text{si } \lambda = -0, 1, \\ \mathcal{O}(e^{-8.3t}) & \text{si } \lambda = -1, \\ \mathcal{O}(e^{-14.1t}) & \text{si } \lambda = -10, \\ \mathcal{O}(e^{-30.9t}) & \text{si } \lambda = -100. \end{cases}$$

$\varphi = (z_{i,j})_{j \in \llbracket 1, N_x \rrbracket}$  et  $f = (\zeta_{i,k})_{k \in \llbracket 0, N_\lambda \rrbracket}$ . Il s'agit alors de résoudre en  $\varphi$  l'équation  $K\varphi = f$ . Fixons un paramètre de régularisation  $\delta > 0$  et résolvons le problème régularisé

$$\underset{\varphi \in (\mathbb{R}_+)^{N_x}}{\operatorname{argmin}} \|K\varphi - f\|_2^2 + \delta^2 \|\varphi - \varphi_0\|_2^2. \quad (4.35)$$

où  $\varphi_0$  est une estimation a priori de  $\varphi$ . Si  $i = 0$ , on pose  $\varphi_0 = 0$ . Sinon,  $\varphi_0$  est l'estimation de  $z(\mathfrak{t}_{i-1}, \cdot)$  transportée à une vitesse  $G(\mathfrak{t}_{i-1})$  sur un intervalle de temps  $\Delta t$ . Ce choix se justifie par la fait que si l'estimation faite à l'instant  $\mathfrak{t}_{i-1}$  est parfaite, alors il suffit de transporter cette solution à la vitesse  $G(\mathfrak{t}_{i-1})$  jusqu'à l'instant  $\mathfrak{t}_i$  pour obtenir une estimation parfaite de  $z(\mathfrak{t}_i, \cdot)$  (hormis en  $x_{\min}$ ).

Il s'agit d'un problème de minimisation quadratique sous contrainte, que l'on résout par exemple avec la méthode du point intérieur (voir par exemple [BV04, Chapitre III.11]). Il ne reste qu'à ajuster  $\delta$  numériquement de façon à faire un compromis entre la minimisation de la norme de  $\varphi$  et la minimisation de l'écart entre  $K\varphi$  et  $f$ . Ce compromis peut s'interpréter comme un niveau de fiabilité de la mesure  $f$  : si la mesure est de très bonne qualité, alors on fixe  $\delta$  petit, quitte à perdre en stabilité. Au contraire, s'il y a une grande incertitude sur  $f$ , on fixe  $\delta$  grand de façon à régulariser la solution. Nous pourrions nous intéresser aux résultats théoriques de convergence de cette méthode obtenus dans la Section 2.2.2, mais nous préférons nous concentrer sur les résultats numériques. La Figure 4.6 illustre les résultats obtenus avec cette méthode.

## Méthode globale

Il est possible d'améliorer les résultats obtenus dans le paragraphe précédent en raisonnant de façon globale en temps, plutôt qu'à chaque instant. En effet, nous savons que la solution de l'équation de transport doit être régulière en temps. Pour chaque  $i \in \llbracket 0, N_t \rrbracket$ , on note  $K_i$ ,  $\varphi_i$  et  $f_i$  la matrice et les vecteurs définis dans le paragraphe précédent. Possons  $K = \operatorname{diag}(K_0, \dots, K_{N_t})$ ,  $\varphi = (\varphi_i)_{i \in \llbracket 0, N_t \rrbracket}$  et  $f = (f_i)_{i \in \llbracket 0, N_t \rrbracket}$ . Pour un paramètre de régularisation (spatiale et temporelle)  $\delta$  fixé, nous cherchons alors à résoudre le problème de minimisation

$$\underset{\varphi \in (\mathbb{R}_+)^{N_x \times (N_t+1)}}{\operatorname{argmin}} \|K\varphi - f\|_2^2 + \delta^2 \|\varphi\|_2^2. \quad (4.36)$$

Ainsi, la pénalisation prend en compte la régularité temporelle de la solution et nous cherchons à minimiser l'écart entre  $K\varphi$  et  $f$  globalement. Nous ne disposons pas d'estimation a priori de  $\varphi$  donc nous fixons  $\varphi_0 = 0$ . Le prix à payer pour cette amélioration est double : d'abord, la complexité spatiale et temporelle de l'algorithme de minimisation est plus élevée. Dans le problème (4.35), la matrice  $K$  à stocker était de taille  $(N_\lambda + 1) \times N_x$ , alors que la matrice  $K$  à stocker dans le problème (4.36) est de taille  $((N_\lambda + 1)(N_t + 1)) \times (N_x(N_t + 1))$ . La dimension du problème d'optimisation augmente de la même façon. Ensuite, cet algorithme ne peut pas s'appliquer en ligne : il faut d'abord posséder les mesures de  $\zeta(t)$  pour tout  $t$  avant de lancer la résolution du problème de minimisation. Par conséquent, ce programme ne répond pas exactement à l'objectif de déterminer en ligne la DTC. Les résultats obtenus sont présentés dans la Figure 4.7.

Une dernière amélioration peut être proposée pour cette méthode globale. Puisque l'approximation de  $T(\lambda)z$  s'améliore (exponentiellement) lorsque  $t$  augmente d'après (4.6),

notre confiance en la mesure  $f$  augmente de la même façon. Par conséquent, nous pouvons choisir de faire décroître (exponentiellement) la pénalisation  $\delta$  au cours du temps, tout en la fixant supérieure à une certaine valeur limite  $\delta_{\min} > 0$  pour conserver le caractère bien posé du problème. Soit  $\delta \in (\mathbb{R}_+)^{N_t+1}$  tel que pour tout  $i \in \llbracket 0, N_t - 1 \rrbracket$ ,  $\delta_i \geq \delta_{i+1} \geq \delta_{\min} > 0$ . Le choix du vecteur  $\delta$  se fera numériquement. Posons  $\boldsymbol{\delta} = \text{diag}(\underbrace{\delta_0, \dots, \delta_0}_{N_x \text{ fois}}, \dots, \underbrace{\delta_{N_t}, \dots, \delta_{N_t}}_{N_x \text{ fois}})$ .

Le problème de minimisation que nous cherchons à résoudre s'écrit alors

$$\underset{\varphi \in (\mathbb{R}_+)^{N_x \times (N_t+1)}}{\operatorname{argmin}} \|K\varphi - f\|_2^2 + \|\boldsymbol{\delta}\varphi\|_2^2. \quad (4.37)$$

### Reconstruction de la solution de l'équation de transport par la méthode locale

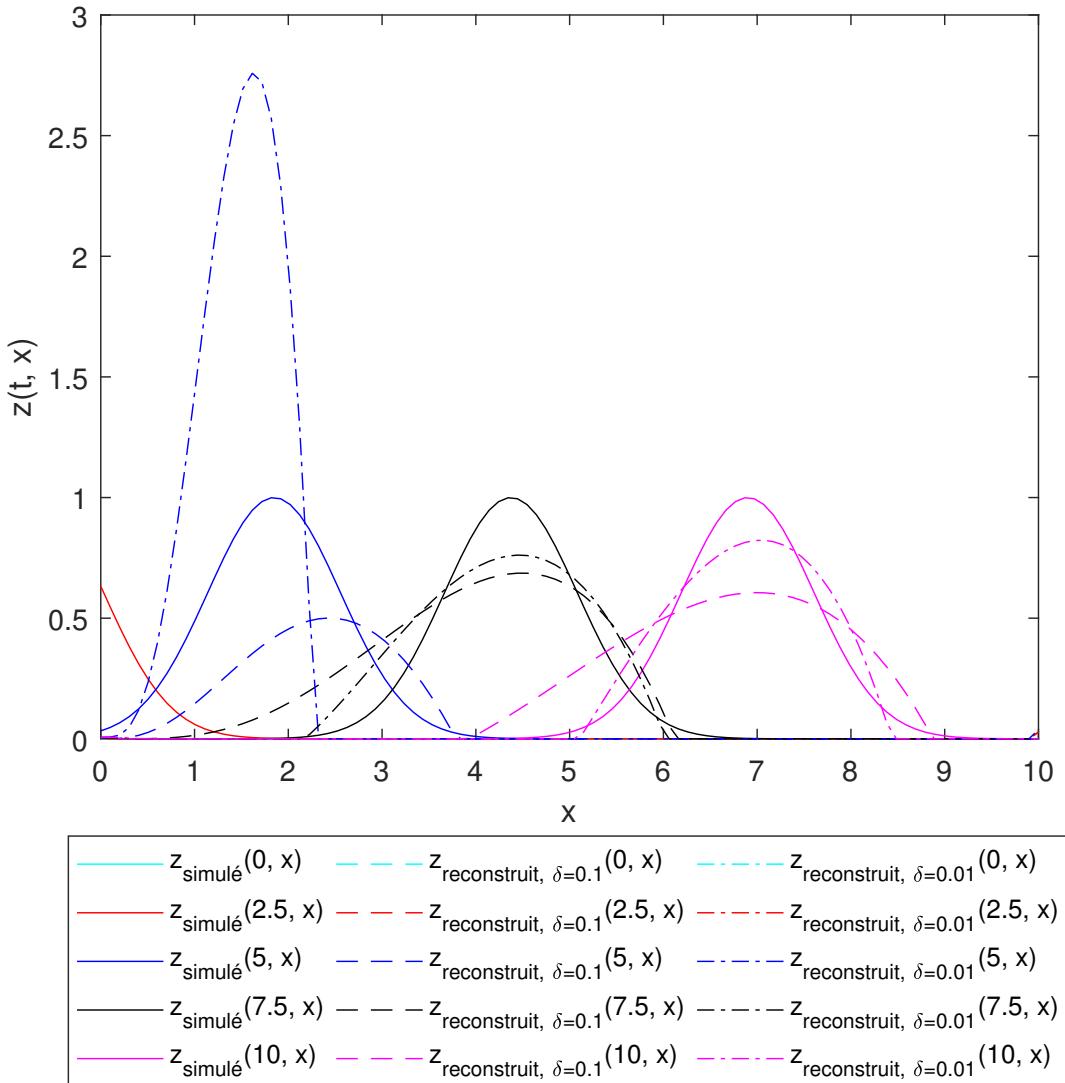


FIGURE 4.6. – Reconstruction de  $z$  à  $t$  fixé. On applique la méthode de Tikhonov locale pour reconstruire la solution de l'équation de transport de la Figure 4.3. On superpose la simulation numérique de  $z$  ( $z_{\text{simulé}}$ , en traits pleins) et sa reconstruction ( $z_{\text{reconstruit}}$ , en traits pointillés) via cette méthode pour  $\delta \in \{10^{-1}, 10^{-2}\}$ . Le problème (4.35) est résolu à chaque pas de temps. Lorsque  $\delta$  est grand, l'affaiblissement de la norme (spatiale) de  $z$  est priorisé et donc la norme en espace de l'approximation de  $z$  obtenue est trop faible. Réciproquement, si  $\delta$  est trop faible, la résolution du problème (4.35) perd en stabilité et donc la reconstruction de  $z$  obtenue est très éloignée de l'objectif. Dans tous les cas, le fait d'utiliser une estimation a priori ne permet pas de garantir la régularité temporelle de l'état reconstruit, et il peut donc varier de façon importante entre deux instants proches comme par exemple pour  $\delta = 0.01$  entre  $t = 5$  et  $t = 7.5$ .

### Reconstruction de la solution de l'équation de transport pour $\delta = 0.001$

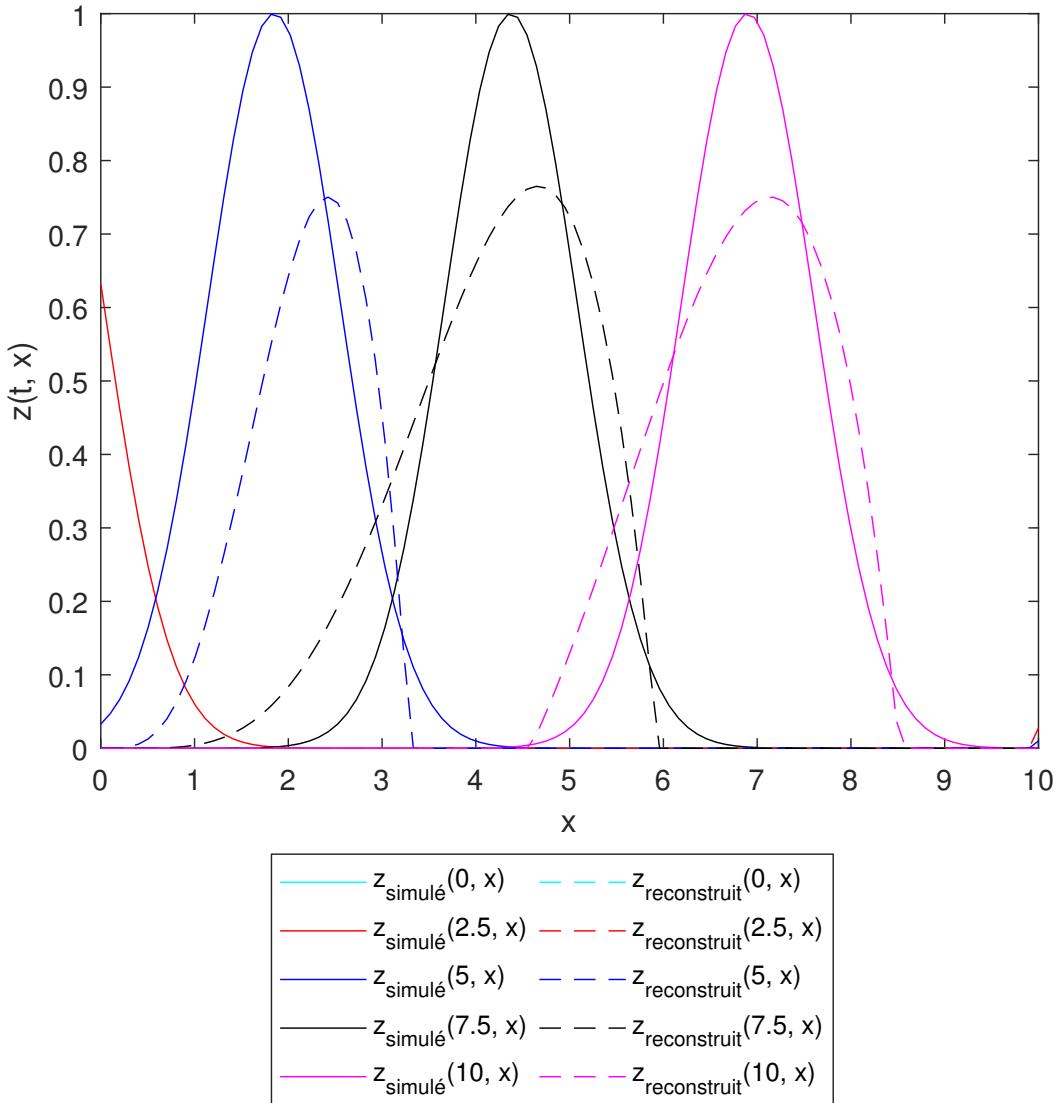


FIGURE 4.7. – Reconstruction globale de  $z$ . On applique la méthode de Tikhonov globale pour reconstruire la solution de l'équation de transport de la Figure 4.3. On superpose la simulation numérique de  $z$  et sa reconstruction via cette méthode pour  $\delta = 10^{-3}$ . La méthode de Tikhonov est appliquée une seule fois, en fin de simulation. Cela permet d'obtenir une meilleure régularité spatiale que dans la méthode locale. En particulier, la solution obtenue pour les temps petits ( $t = 5$  par exemple) est plus proche de la solution idéale que dans la Figure 4.6. L'amélioration de la mesure au cours du temps est également prise en compte : en réalité,  $\delta$  est décroissant au cours du temps et pour tout  $i \in \llbracket 0, N_t \rrbracket$ ,  $\delta_i = \max\left(\frac{0.1}{n+1}, 10^{-3}\right)$ . Cette amélioration permet une meilleure régularisation pour les temps petits.

## 4.5. Conclusion

Nous avons présenté la mesure de la concentration en solide, et proposé une méthode pour l'exploiter. Nous procérons en plusieurs étapes. Dans un premier temps, nous estimons la vitesse de croissance des cristaux  $G$  au cours de la réaction. Puis nous calculons la solution de l'EDP (4.7) pour différentes valeurs de  $\lambda$ , et nous simulons le système dynamique (4.5). Enfin, nous appliquons une méthode de Tikhonov (localement ou globalement) pour reconstruire l'état  $z$  du système. Les résultats que nous obtenons sur les simulations numériques sont contrastés. Nous parvenons à reconstruire une approximation de l'état, qui semble suivre une dynamique similaire. Mais nous nous heurtons à trois problèmes majeurs. D'abord, cette méthode nécessite une bonne connaissance de  $G$ , puisque nous avons montré qu'une incertitude sur  $G$  engendre une forte non injectivité de la mesure (voir Section 4.3.4). Or, en pratique, le modèle proposé pour estimer  $G$  est soumis à une grande incertitude intrinsèque au modèle. Ensuite, si  $z_0$  est non nul, nous avons montré que la mesure n'est pas injective (voir Section 4.3.2) et que dans tous les cas, la mesure ne rend pas le système observable (voir Section 4.3.1). L'algorithme proposé n'est donc pas robuste numériquement : une erreur commise au départ risque de se propager voire de s'amplifier. Enfin, la méthode la plus efficace (méthode globale) est celle qui doit opérer hors ligne. L'intérêt de la méthode est alors limité, puisque certains instruments permettent déjà de mesurer la DTC hors ligne. Nous ne procérons donc pas à des tests sur des données expérimentales.

Pour toutes ces raisons nous cherchons une autre mesure qui viendrait compléter ou remplacer la mesure de la concentration en solide. La sonde FBRM® répond à ce besoin. Déjà utilisée dans l'industrie pour obtenir en ligne une « signature » de la DTC (c'est-à-dire une courbe caractéristique de la DTC), nous proposons dans la partie suivante d'analyser plus précisément les informations fournies par cet instrument, afin de les exploiter pleinement.

## 5. Exploitation de la technologie FBRM®

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à une nouvelle méthode de mesure *in situ* afin de compléter la mesure de la concentration en solide utilisée dans la partie précédente. La technologie qui nous permet d'accéder à cette mesure est la FBRM® (Focused Beam Reflectance Measurement). Dans une première partie, nous expliquons le principe de fonctionnement de cet instrument. Nous étudions ensuite l'information à laquelle il nous permet d'accéder, et comment l'exploiter pour tenter de reconstruire la DTC. Enfin, nous présentons les résultats numériques obtenus sur des données simulées puis sur des données expérimentales.

### 5.1. Principe de la technologie FBRM®

La technologie FBRM® est un instrument de mesure permettant de suivre en ligne au cours d'un procédé de cristallisation une distribution en lien direct avec la DTC. Afin d'analyser plus finement l'observation fournie par cet instrument, présentons succinctement son fonctionnement en nous basant sur les ressources [Met07] et [Met16].

L'instrument est équipé d'une sonde insérée dans le réacteur de cristallisation, il fournit donc des informations *in situ*. La sonde émet un faisceau laser focalisé à une distance fixe, et qui est en rotation autour d'un axe fixe à une vitesse d'environ  $2 \text{ m.s}^{-1}$ . Lorsque le faisceau croise une particule dans le réacteur, la lumière est diffusée en direction de la sonde qui est également équipée d'un capteur capable de détecter cette rétro-diffusion. Au cours du balayage, le détecteur reçoit donc des impulsions lumineuses. Chacune de ces impulsions correspond à un croisement entre le laser et une particule dans le réacteur. La durée de l'impulsion correspond au temps durant lequel le laser est resté au dessus de cette même particule. En faisant l'hypothèse que la vitesse de la particule est négligeable devant la vitesse de rotation du laser (qui est connue) nous pouvons déterminer une longueur sur le cristal : il s'agit de la longueur d'une corde sur le cristal. En répétant cette opération, la sonde FBRM® permet de déterminer en ligne une distribution en longueur de cordes. La Figure 5.1 résume le principe de la mesure.

Il est important de noter que la distribution en longueur de cordes n'est pas égale à la distribution en taille des cristaux. En effet, supposons un instant que tous les cristaux soient sphériques et de même rayon  $R > 0$ . La DTC est alors une distribution de Dirac centrée en  $R$ . La distribution en longueur de cordes est tout à fait différente, puisque les cordes mesurées peuvent avoir des longueurs comprises entre 0 (les extrémités de la corde sont confondues) et  $2R$  (la corde est un diamètre). Puisque notre objectif est de reconstruire la DTC, il faut donc modéliser plus précisément la relation entre la DTC et la distribution en longueur de cordes. Dans ce but, nous mènerons dans la partie suivante une étude probabiliste. Nous faisons donc l'hypothèse que les particules agissent indépendamment les unes des autres, qu'elles sont réparties de façon homogène dans le réacteur et que la sonde détecte un nombre suffisamment grand de particules, afin de pouvoir appliquer la loi des grands nombres. L'étude menée est donc macroscopique.

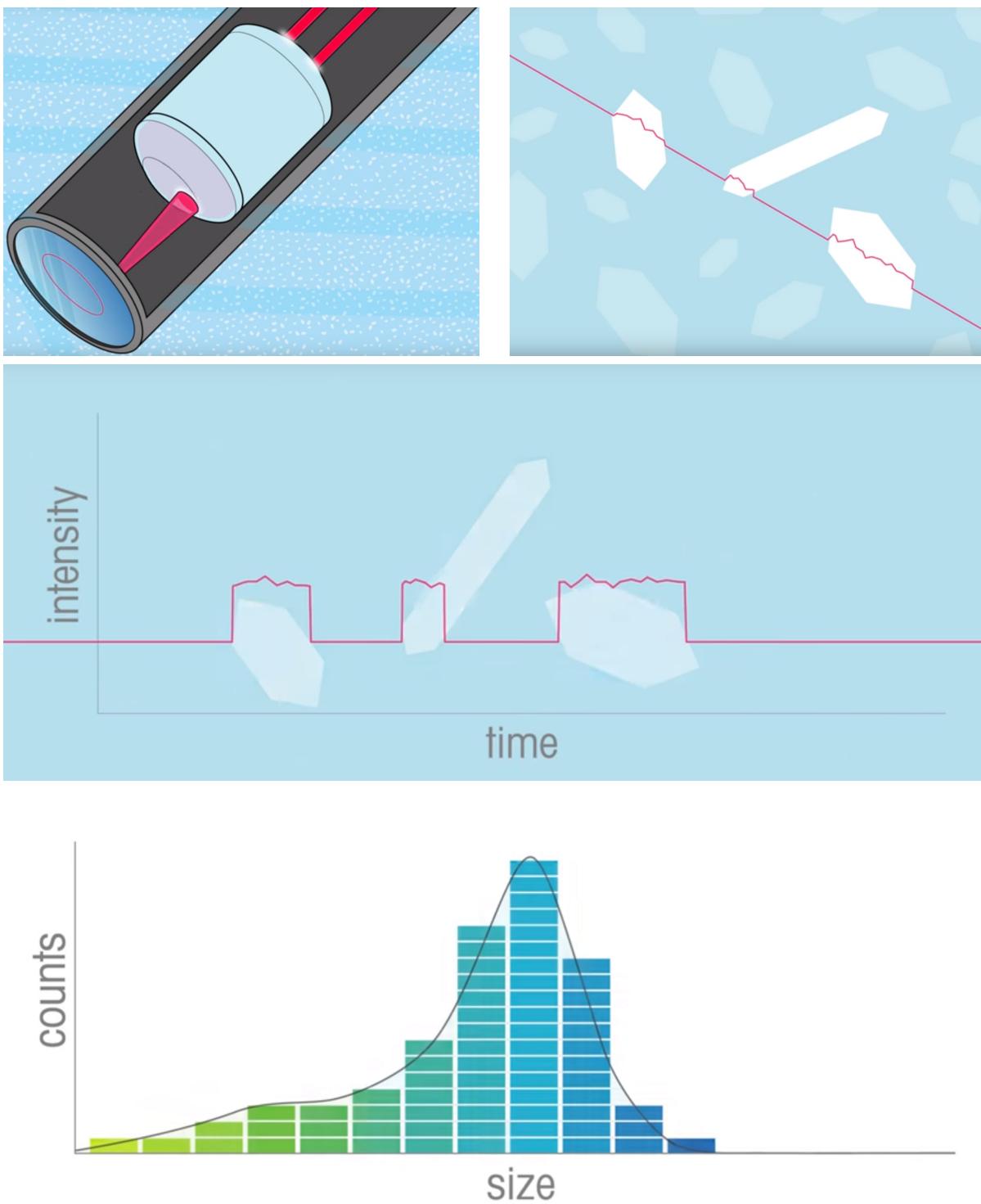


FIGURE 5.1. – Schéma de principe de la sonde FBRM®. Images tirées de la vidéo [Met16]. La sonde FBRM® est composée d'un émetteur de faisceau laser et d'un récepteur. Le laser est en rotation à vitesse constante. Lorsque le laser croise une particule, la lumière est diffusée en direction du récepteur, qui déduit la présence d'une particule. Le temps de l'impulsion lumineuse reçue permet de déduire la longueur d'une corde sur la particule. En combinant toutes les mesures effectuées sur une certaine plage de temps, la FBRM® permet d'obtenir une distribution en longueur de cordes liée aux particules présentes dans le réacteur sur cette plage de temps.

## 5.2. Distribution en longueur de cordes

Dans cette section, nous mettons en œuvre un raisonnement probabiliste pour exprimer la relation entre la distribution en taille de cristaux  $z$  et la distribution en longueur de cordes mesurée  $q$ . Un raisonnement similaire a été mené dans l'article [SLB99] pour analyser cette relation. Nous proposons ici un modèle probabiliste continu, en accord avec les résultats obtenus dans [SLB99]. On adopte les notations suivantes :

- $z \in L^2(x_{\min}, x_{\max}) \subset L^1(x_{\min}, x_{\max})$  est la distribution en taille des cristaux dans le réacteur à un instant fixé. Pour  $x_1, x_2 \in [x_{\min}, x_{\max}]$ ,  $\int_{x_1}^{x_2} z(x)dx$  représente le nombre de cristaux de rayons compris entre  $x_1$  et  $x_2$ .
- $\tilde{z} \in L^2(x_{\min}, x_{\max}) \subset L^1(x_{\min}, x_{\max})$  est la distribution en taille des cristaux vus par la sonde FBRM® à ce même instant.
- $q \in L^2(0, 2x_{\max}) \subset L^1(0, 2x_{\max})$  est la distribution en longueur de cordes vues par la sonde FBRM® à ce même instant. Pour  $(\ell_1, \ell_2) \in [0, 2x_{\max}]$ ,  $\int_{\ell_1}^{\ell_2} q(s)ds$  représente le nombre de cordes vues par la sonde de taille comprise entre  $\ell_1$  et  $\ell_2$ .
- $Q$  est la distribution cumulée en taille de cordes vues par la sonde à cet instant. On a, pour tout  $\ell \in [0, 2x_{\max}]$ ,  $Q(\ell) = \int_0^\ell q(s)ds$ .
- $\mathfrak{z} = \frac{z}{\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z(x)dx}$ ,  $\tilde{\mathfrak{z}} = \frac{\tilde{z}}{\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \tilde{z}(x)dx}$  et  $\mathfrak{q} = \frac{q}{\int_0^{2x_{\max}} q(s)ds}$  sont les fonctions de densité respectivement associées à  $z$ ,  $\tilde{z}$  et  $q$ .
- $\mathfrak{Q}$  est la fonction de répartition associée à la densité  $\mathfrak{q}$  :  $\mathfrak{Q}(\ell) = \int_0^\ell \mathfrak{q}(s)ds \quad \forall \ell \in [0, 2x_{\max}]$ .

Pour tout  $r > 0$ , on pose  $\mathcal{S}_r = \{v \in \mathbb{R}^3 / \|v\|_2 = r\}$  la sphère de  $\mathbb{R}^3$  de rayon  $r$ . Une corde sur  $\mathcal{S}_r$  est un segment  $[v, w]$  de  $\mathbb{R}^3$  tel que  $v, w \in \mathcal{S}_r$ . Soit  $\Omega = \{(r, h), r \in \mathbb{R}_+, h \in [0, r]\}$ , et soit  $\mathcal{F}$  la tribu borélienne sur  $\Omega$ . Pour un rayon  $r$  fixé, la variable  $h$  représente la distance entre le centre de la sphère  $\mathcal{S}_r$  et une corde sur celle-ci. Notons que  $h$  détermine de manière unique la longueur de la corde. Les particules sont supposées uniformément réparties dans le réacteur. Par conséquent, on munit  $(\Omega, \mathcal{F})$  de la probabilité uniforme  $\mathbb{P}$ . Dès lors,  $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$  est un espace probabilisé. Soit  $R$  la variable aléatoire qui représente le rayon d'une sphère :

$$\forall (r, h) \in \Omega, R((r, h)) = r.$$

Soit  $L$  la variable aléatoire qui représente la longueur d'une corde :

$$\forall (r, h) \in \Omega, L((r, h)) = 2\sqrt{r^2 - h^2}.$$

On suppose que le nombre de cristaux dans le réacteur est suffisamment grand, et que les cristaux sont mutuellement indépendants, de sorte que conformément à la loi des grands nombres, les lois de probabilités  $R$  et  $L$  sont proches des statistiques mesurées. On suppose que  $R$  et  $L$  sont des variables aléatoires à densité, de fonctions de densité respectives  $\mathfrak{z}$  et  $\mathfrak{q}$ .  $\mathfrak{Q}$  est alors la fonction de répartition de  $L$ . Déterminons, en fonction de  $\tilde{\mathfrak{z}}$ , une expression de  $\mathfrak{Q}$ . Soit  $\ell \in \mathbb{R}_+$ . On a :

$$\begin{aligned} \mathfrak{Q}(\ell) &= \mathbb{P}(L \leq \ell) \\ &= \mathbb{E}(\mathbb{1}_{L \leq \ell}) \\ &= \mathbb{E}(\mathbb{E}(\mathbb{1}_{L \leq \ell} | R)) \text{ d'après le théorème de l'espérance totale.} \end{aligned}$$

Soit  $r \in [x_{\min}, x_{\max}]$ . Déterminons dans un premier temps  $\mathbb{E}(\mathbb{1}_{L \leq \ell} | R = r) = \mathbb{P}(L \leq \ell | R = r)$ . Soit  $h \in [0, r]$ . On a

$$\begin{aligned} L(r, h) \leq \ell &\Leftrightarrow r^2 - h^2 \leq \left(\frac{\ell}{2}\right)^2 \\ &\Leftrightarrow \ell \geq 2r \text{ ou } \begin{cases} \ell < 2r \\ h \geq \sqrt{r^2 - \left(\frac{\ell}{2}\right)^2}. \end{cases} \end{aligned} \quad (5.1)$$

Or  $h$  est choisi uniformément dans  $[0, r]$ . D'où, en notant  $\lambda$  la mesure de Lebesgue sur  $\mathbb{R}$  :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(L \leq \ell | R = r) &= \begin{cases} 1 & \text{si } \ell \geq 2r \\ \frac{\lambda\left(\left[\sqrt{r^2 - \left(\frac{\ell}{2}\right)^2}, r\right]\right)}{\lambda([0, r])} & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{car } \mathbb{P}_R \text{ est uniforme.}) \\ &= \begin{cases} 1 & \text{si } \ell \geq 2r \\ 1 - \sqrt{1 - \left(\frac{\ell}{2r}\right)^2} & \text{sinon} \end{cases} \\ &= 1 - \mathbb{1}_{[0, 2r]}(\ell) \sqrt{1 - \left(\frac{\ell}{2r}\right)^2}. \end{aligned}$$

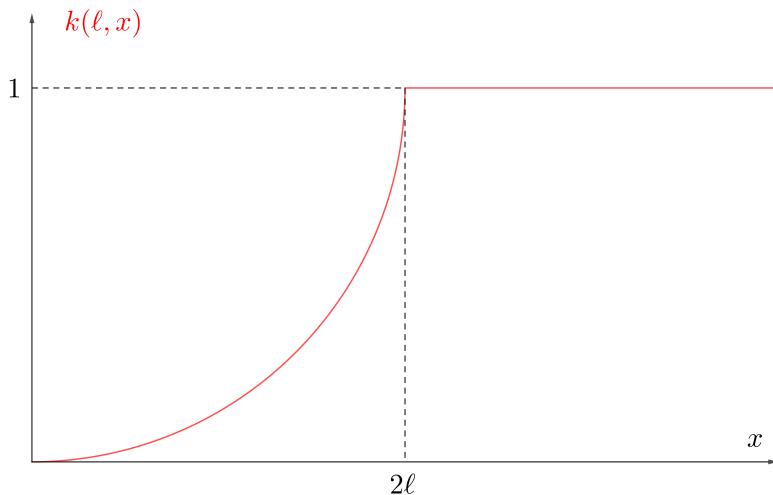


FIGURE 5.2. – Graphe de  $k$  à  $\ell$  fixé.

Posons, pour tout  $\ell \in \mathbb{R}_+$ ,  $r \in [x_{\min}, x_{\max}]$ ,

$$k(\ell, r) = 1 - \mathbb{1}_{[0, 2r]}(\ell) \sqrt{1 - \left(\frac{\ell}{2r}\right)^2}. \quad (5.2)$$

On a ainsi  $\mathbb{E}(\mathbb{1}_{L \leq \ell} | R) = k(\ell, R)$ . Or  $R$  est de densité  $\tilde{\mathfrak{z}}$  donc d'après la formule de transfert :

$$\mathfrak{Q}(\ell) = \mathbb{P}(L \leq \ell) = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} k(\ell, x) \tilde{\mathfrak{z}}(x) dx. \quad (5.3)$$

Déterminons une relation entre  $z$  et  $\tilde{z}$ . Deux hypothèses de modélisation peuvent être faites.

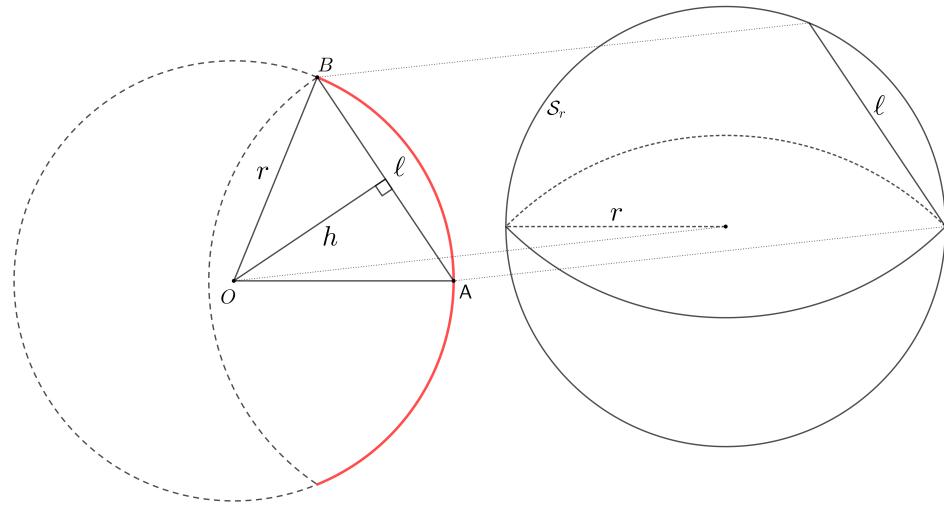


FIGURE 5.3. – Calcul de la probabilité qu'une corde d'une sphère de rayon  $r$  soit de longueur inférieure ou égale à  $\ell$ . Sur le cercle de centre  $O$  et de rayon  $r$ , on fixe un point  $A$ . Pour chaque corde sur la sphère  $S_r$ , on peut trouver une projection qui envoie  $S_r$  sur le cercle de rayon  $r$  et l'une des extrémités de la corde sur  $A$ . Pour chaque point  $B$  sur ce cercle, la corde  $[AB]$  est de longueur inférieure ou égale à  $\ell$  si et seulement si  $B$  appartient à la partie du cercle tracée en trait plein rouge (—). Notons  $h$  la distance entre  $O$  et  $(AB)$ . On a alors  $AB = 2\sqrt{r^2 - h^2}$ . D'où  $AB \leq \ell \Leftrightarrow h \geq \sqrt{r^2 - \left(\frac{\ell}{2}\right)^2}$ .

— On considère que tous les cristaux ont autant de chance d'être mesurés par le laser car ils sont uniformément mélangés dans celui-ci. C'est l'hypothèse communément faite dans les articles traitant de la FBRM® (voir par exemple [LW05] ou [Agi+14]). Dans ce cas on a

$$\tilde{\mathfrak{z}} = \mathfrak{z} \quad (5.4)$$

— On modélise le lieu de la mesure du laser comme un segment dans le réacteur. Dès lors, la probabilité que le laser mesure un cristal donné est proportionnel à la surface occupée par la projection de ce cristal sur un bord du réacteur (voir Figure 5.4). En appliquant de nouveau la formule de transfert, on obtient :

$$\forall x \in [x_{\min}, x_{\max}], \quad \tilde{\mathfrak{z}}(x) = \frac{\int_{x_{\min}}^x \xi^2 d\xi}{\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \xi^2 d\xi} \mathfrak{z}(x) = \frac{x^3 - x_{\min}^3}{x_{\max}^3 - x_{\min}^3} \mathfrak{z}(x). \quad (5.5)$$

Finalement, en posant

$$\forall \ell \in \mathbb{R}_+, \quad \forall x \in [x_{\min}, x_{\max}], \quad \begin{cases} k_1(\ell, x) = k(\ell, x) \\ k_2(\ell, x) = \frac{x^3 - x_{\min}^3}{x_{\max}^3 - x_{\min}^3} k(\ell, x) \end{cases}, \quad (5.6)$$

on obtient :

$$\forall \ell \in \mathbb{R}_+, \quad \mathfrak{Q}(\ell) = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} k_i(\ell, x) \mathfrak{z}(x) dx \quad (5.7)$$

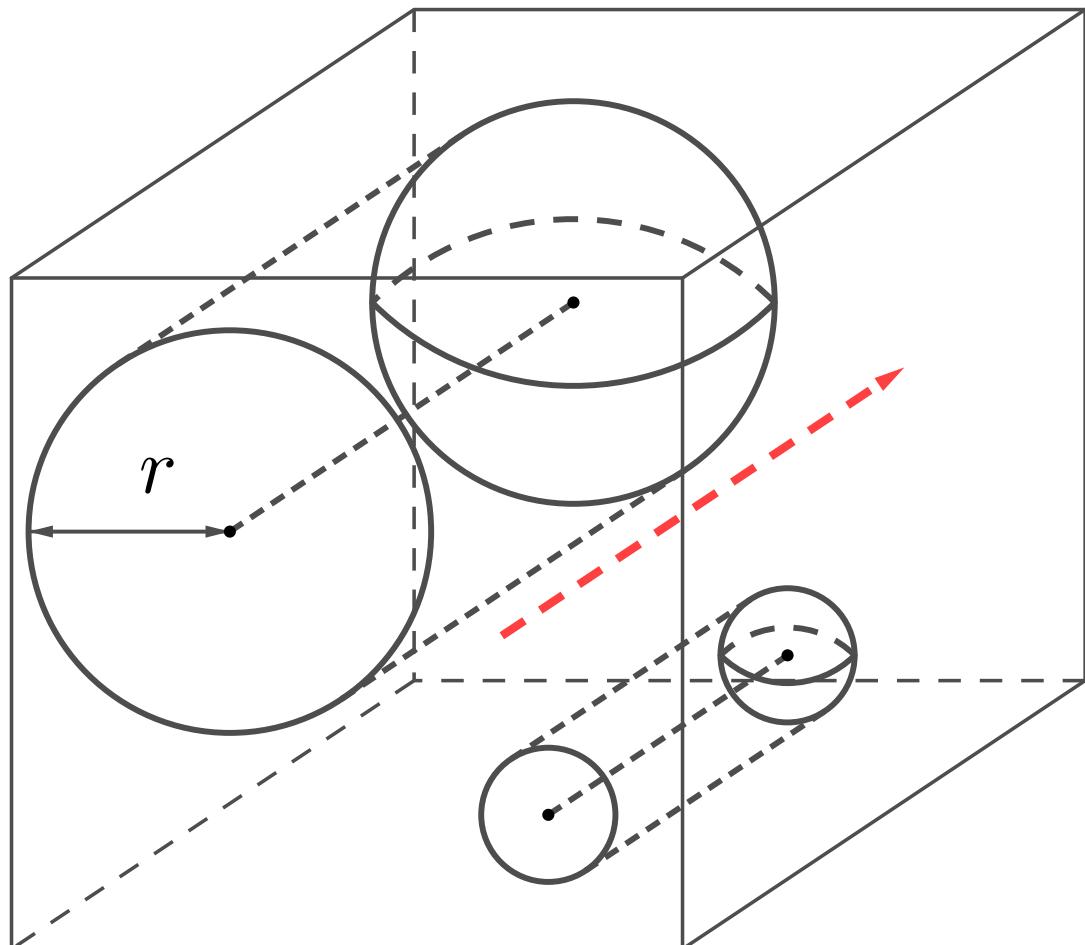


FIGURE 5.4. – Calcul de la probabilité que le laser de la sonde FBRM® traverse une sphère de rayon  $r$ . Dans le réacteur, on modélise les cristaux par des sphères. Le laser de la sonde FBRM® est représenté en pointillé rouge (—). La probabilité que le laser traverse un cristal est proportionnelle à la surface occupée par la projection du cristal sur le bord du réacteur, donc à son rayon au carré.

avec  $i = 1$  (resp.  $i = 2$ ) si l'on fait l'hypothèse (5.4) (resp. l'hypothèse (5.5)). D'où

$$\forall \ell \in \mathbb{R}_+, Q(\ell) = C \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} k_i(\ell, x) z(x) dx \quad (5.8)$$

où

$$C = \frac{\int_0^{2x_{\max}} q(x) dx}{\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z(x) dx}$$

est le rapport entre le nombre de cordes détectées par la FBRM® et le nombre total de cristaux dans le réacteur. Dans la section suivante, on supposera que  $C$  est indépendant du temps, c'est-à-dire que pour un nombre de cristaux donné dans le réacteur, la sonde repère un même nombre de cordes. Dans la suite de notre étude, nous posons  $k = k_1$ .

### 5.3. Mise en œuvre de la méthode de Tikhonov

Rappelons que dans ce chapitre, nous cherchons à reconstruire la solution  $z$  du système (3.7) à partir de la mesure fournie par la FBRM®. Fixons d'abord  $t \in [t_0, t_1]$ . À cet instant, la FBRM® nous fournit la mesure  $q(t, \cdot)$ , distribution en taille des cordes vues par la sonde. On peut donc en déduire  $Q$  la distribution cumulée :

$$\forall t \in [t_0, t_1], \forall \ell \in \mathbb{R}_+, Q(t, \ell) = \int_0^\ell q(t, s) ds.$$

La question est donc de déterminer  $z$  vérifiant l'équation

$$\forall t \in [t_0, t_1], \forall \ell \in [0, 2x_{\max}], Q(t, \ell) = C \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} k(\ell, x) z(t, x) dx. \quad (5.9)$$

En effet, il suffit de se restreindre à  $\ell \in [0, 2x_{\max}]$  car  $Q$  est constante au delà de  $2x_{\max}$ . On procède en deux étapes : on cherche d'abord, pour chaque  $t \in [t_0, t_1]$ ,  $\bar{z} \in L^2(x_{\min}, x_{\max})$  tel que

$$\forall \ell \in [0, 2x_{\max}], Q(t, \ell) = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} k(\ell, x) \bar{z}(x) dx. \quad (5.10)$$

On cherchera ensuite à déterminer  $C$  à l'aide de la mesure en concentration. On aura alors

$$z(t, \cdot) = \frac{\bar{z}}{C}.$$

Détaillons ces étapes.

**Étape 1 :** Détermination de  $\bar{z}$ . Fixons  $t > 0$  et cherchons à déterminer  $\bar{z}$ . Soit

$$K : \begin{cases} L^2(x_{\min}, x_{\max}) & \longrightarrow L^2(0, 2x_{\max}) \\ \bar{z} & \mapsto K\bar{z} : \ell \mapsto \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} k(\ell, x) \bar{z}(x) dx. \end{cases}$$

Le problème (5.10) se réécrit alors

$$K\bar{z} = Q \quad (5.11)$$

où  $K$  est l'opérateur intégral de noyau  $k \in C^0([0, 2x_{\max}] \times [x_{\min}, x_{\max}]) \subset k \in L^2([0, 2x_{\max}] \times [x_{\min}, x_{\max}])$ . Nous sommes donc en présence d'une équation intégrale de la même forme que celle présentée dans la Section 2.2. On met donc en place la méthode de régularisation de Tikhonov, et on résout, pour un paramètre de régularisation  $\delta > 0$  à déterminer, le problème de minimisation quadratique non contraint

$$\operatorname{argmin}_{\bar{z} \in L^2(x_{\min}, x_{\max})} \|K\bar{z} - Q\|_2^2 + \delta^2 \|\bar{z}\|_2^2. \quad (5.12)$$

Les résultats théoriques obtenus dans la partie Section 2.2 peuvent alors s'appliquer. Cependant, nous préférerons une version contrainte de ce problème, en y ajoutant une contrainte de positivité sur  $\bar{z}$  :

$$\operatorname{argmin}_{\bar{z} \in L^2(x_{\min}, x_{\max}) / \bar{z} \geq 0} \|K\bar{z} - Q\|_2^2 + \delta^2 \|\bar{z}\|_2^2. \quad (5.13)$$

En effet,  $z$  représente une distribution donc  $\bar{z} \geq 0$ . Ce problème de minimisation quadratique constraint peut par exemple se résoudre par une méthode du point intérieur (voir par exemple [BV04, Chapitre III.11]). L'idée de cet algorithme est similaire à celle utilisée dans [LW05].

**Étape 2 :** Détermination de  $C$ . Pour chaque  $t \in [t_0, t_1]$ , on notera encore  $\bar{z}(t, \cdot)$  la valeur de  $\bar{z}$  obtenue à l'instant  $t$ . Connaissant une approximation de  $\bar{z}(t, \cdot)$  pour chaque  $t \in [t_0, t_1]$ , nous cherchons maintenant à déterminer  $C$ . Pour cela, nous utilisons la mesure de la concentration en solide, qui vient compléter la mesure par FBRM®. Posons

$$\forall t \in [t_0, t_1], \bar{y}(t) = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \bar{z}(t, x) x^3 dx.$$

On a alors

$$C = \frac{\bar{z}(t, \cdot)}{z(t, \cdot)} = \frac{\bar{y}(t)}{y(t)}, \quad \forall t \in [t_0, t_1].$$

Or on a supposé  $C$  indépendant du temps et  $\bar{y}$  est connu car  $\bar{z}$  a été approché. Théoriquement, il suffit donc de connaître la mesure de la concentration en solide  $y$  à un seul instant pour en déduire  $C$ . En pratique, on mesurera  $y$  à quelques instants par prélèvements, puis on mettra en place une régression linéaire entre  $y$  et  $\bar{y}$  fourni par la méthode de Tikhonov pour déterminer  $C$ .

## 5.4. Résultats numériques

Dans cette partie, nous appliquons la méthode détaillée dans la section précédente pour résoudre le problème de la reconstruction en ligne de la DTC. Dans un premier temps, nous testons la méthode sur des données obtenues en simulation, de la même façon que dans la Section 4.4.1. Puis, nous utilisons des données expérimentales afin de tester l'efficacité réelle de la méthode.

### 5.4.1. Données obtenues en simulation

Appliquons d'abord cette méthode sur des données obtenues par simulation de l'équation de transport par la même méthode que dans la Section 4.4.1. Nous commençons par calculer, pour la simulation présentée en Figure 4.3, la distribution cumulée en taille des cordes associée à la DTC simulée. Notons  $z$  la DTC simulée. La distribution cumulée en taille des cordes associée est alors  $Q = Kz$ , où nous procérons via la méthode des rectangles pour estimer  $Kz$ . La distribution en taille des cordes  $q$  est présentée en Figure 5.5. Nous procérons ensuite à la résolution du problème de minimisation (5.13). Nous fixons  $\delta = 10^{-6}$ . L'écart relatif entre la DTC  $z$  simulée et sa reconstruction est alors de l'ordre de  $10^{-6}$  tout au long de la simulation. L'affichage des courbes n'est donc pas révélateur. La méthode de Tikhonov est donc très efficace. Pour des données simulées, la seconde étape de la méthode est inutile car le facteur  $C$  est connu. Les résultats étant concluants, nous pouvons passer aux tests sur des données expérimentales.

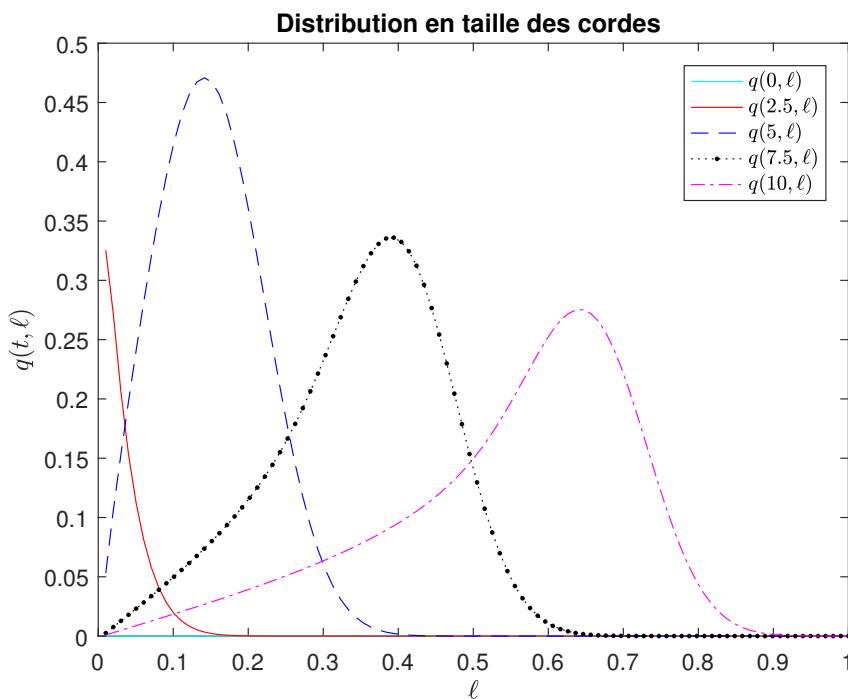


FIGURE 5.5. – Évolution de la distribution en taille des cordes associée à la DTC simulée en Figure 4.3.

### 5.4.2. Données expérimentales

On applique maintenant la méthode à des données obtenus expérimentalement. Commençons par présenter les données dont nous disposons.

#### Présentation des données

Les données dont nous disposons sont issues de la thèse de Y. Tahri [Tah16]. Il s'agit des expériences numérotées LG34 et LG39 décrites dans [Tah16, Chapitre II]. La nature des

produits utilisés, les protocoles expérimentaux et les conditions opératoires sont précisément décrits dans cette référence. Pour chacune de ces deux expériences de cristallisation, nous avons accès :

- au suivi en ligne de la concentration en solide. La mesure est faite par prélèvements espacés d'environ 20 minutes (la durée totale d'une expérience est d'environ 6 heures) ;
- aux données brutes mesurées par la sonde FBRM®. Pour 90 intervalles de longueurs formant une partition de  $[1\mu\text{m}, 1000\mu\text{m}]$ , nous disposons toutes les 20 secondes du nombre de cordes détectées par la sonde par seconde ayant une longueur appartenant à l'intervalle considéré.

La Figure 5.6 représente une interpolation linéaire de l'évolution de la concentration au cours du temps pour les expériences LG34 et LG39. Pour une lecture plus aisée des données fournies par la FBRM®, on regroupe les cordes mesurées en 4 intervalles de longueurs :  $[1\mu\text{m}, 10\mu\text{m}]$ ,  $[10\mu\text{m}, 43\mu\text{m}]$ ,  $[43\mu\text{m}, 100\mu\text{m}]$  et  $[100\mu\text{m}, 1000\mu\text{m}]$ . La Figure 5.7 (resp. Figure 5.8) représente alors l'évolution des tailles des cordes au cours de l'expérience LG34 (resp. LG39).

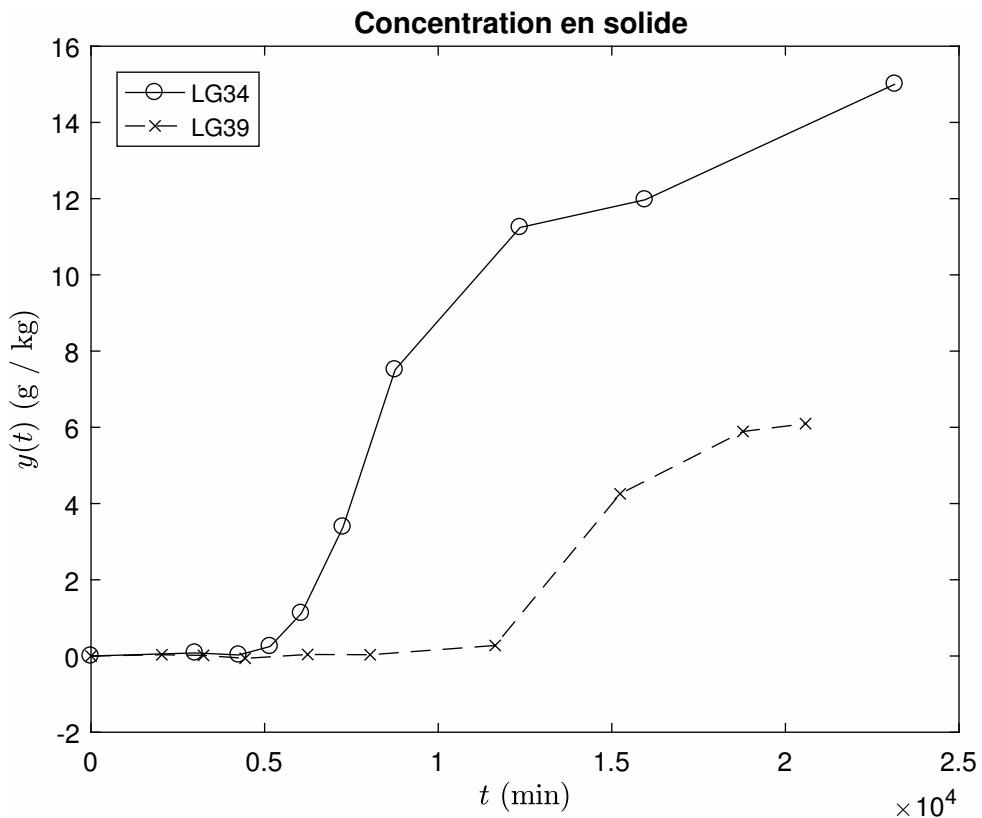


FIGURE 5.6. – Évolution au cours des expériences LG34 et LG39 de la concentration en solide. La concentration en solide  $y(t)$  est donnée en grammes de soluté par kilogrammes de solvant) car il s'agit de la proportion massique occupée par les cristaux dans le réacteur.

## Exploitation des données

Nous exploitons les données précédemment exposées en suivant la méthode en deux étapes proposée dans la section précédente, en vue de reconstruire l'évolution de la DTC

au cours du temps dans les expériences LG34 et LG39. On représentera les distributions en taille des cristaux de la même façon que nous avons représenté les distributions en taille des cordes : en regroupant les tailles en quatre catégories. Cette représentation est plus facile à lire mais possède une bien moins grande quantité d'informations. Notons qu'il est également possible de créer un film de quelques secondes montrant l'évolution des distributions aux cours de l'expérience, voire à l'avenir de tracer ces distributions en ligne au cours de l'expérience.

Pour mesurer la qualité de nos résultats nous mesurons :

- $\varepsilon_q$  : L'erreur relative (en norme 2) entre la distribution en longueurs de cordes fournies par la FBRM® et celle associée à la DTC reconstruite.
- $\varepsilon_y$  : L'erreur relative (en norme 2) entre la concentration en solide mesurée et celle associée à la DTC reconstruite.

La Figure 5.9 (resp. Figure 5.10) représente les résultats obtenus pour l'expérience LG34 (resp. LG39). Nous obtenons  $\varepsilon_q = 2,63\%$  et  $\varepsilon_y = 11,89\%$  pour LG34 et  $\varepsilon_q = 21,09\%$  et  $\varepsilon_y = 23,45\%$  pour LG39. Les résultats sont variables d'une expérience à l'autre, et il faut envisager de conduire d'autres expériences. La reconstruction de la DTC semble toutefois efficace, et permet d'accéder à des informations non immédiatement fournies par la FBRM®. L'algorithme décrit dans ce chapitre est le plus efficace obtenu durant le stage. Il est capable d'estimer en ligne la DTC en utilisant exclusivement la FBRM® et la mesure de la concentration en solide. La qualité de son estimation peut également être estimée en ligne à partir de ces deux mesures.

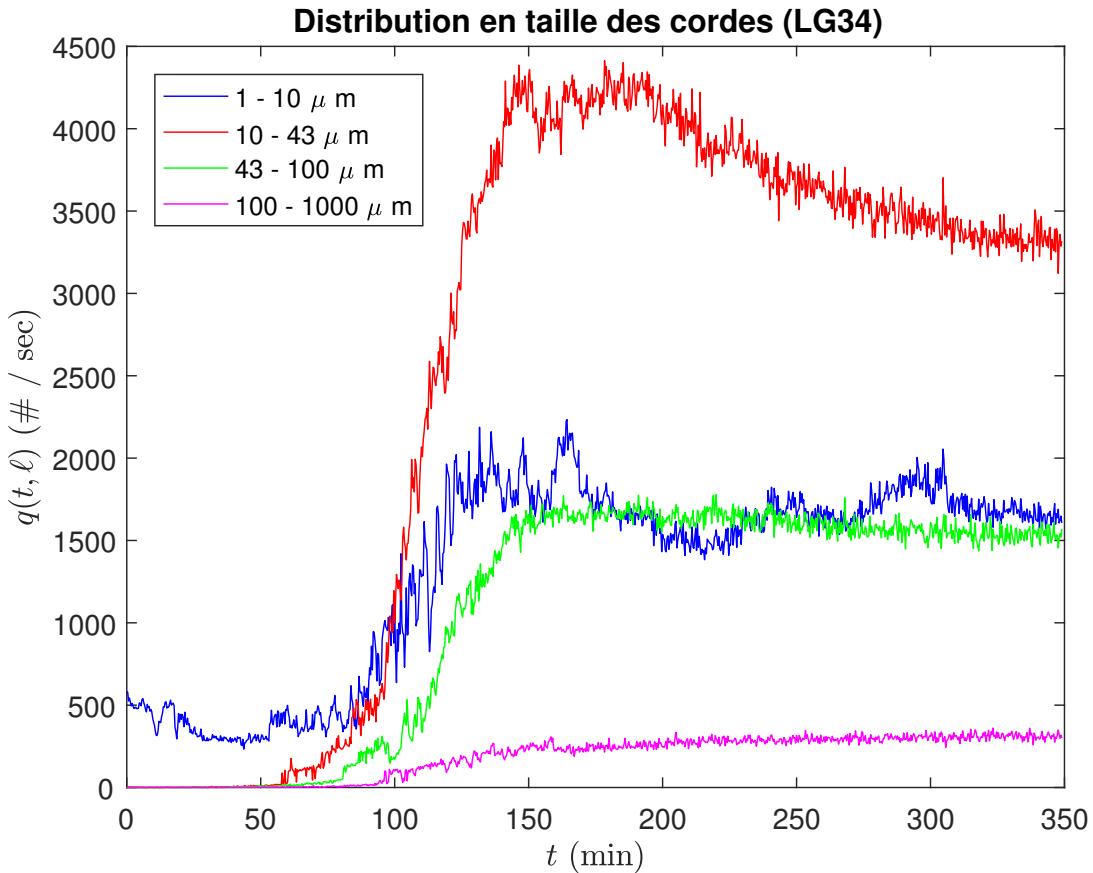


FIGURE 5.7. – Évolution au cours de l'expérience LG34 de la distribution en taille des cordes.

Nous traçons le nombre  $q(t, \ell)$  de cordes détectées par seconde par la sonde à l'instant  $t$  ayant une taille  $\ell$  dans un intervalle fixé. Analysons les informations fournies par ce graphique. Au début du procédé, la sonde détecte déjà des cordes de très petite taille (entre 1 et 10  $\mu\text{m}$ ). Il s'agit probablement d'un bruit de mesure, dû à des impuretés en suspension dans le réacteur. Par la suite, l'ordre d'apparition des différents groupes de cordes est cohérent avec la modélisation par une équation de transport : les cordes les plus petites apparaissent en premier, avant les cordes de plus grande taille. La sonde permet donc de détecter en ligne la germination, c'est-à-dire l'instant où des cristaux commencent à se former. Ici, c'est à  $t \approx 60$  min. Certaines informations ne sont cependant pas accessibles a priori. Par exemple, le nombre important de petites cordes (1 – 10  $\mu\text{m}$ ) à partir de  $t \approx 100$  min est-il dû à de petites particules, ou bien ces cordes appartiennent-elles à des cristaux de grande taille ? Pour répondre à cette question, il faudra reconstruire la DTC.

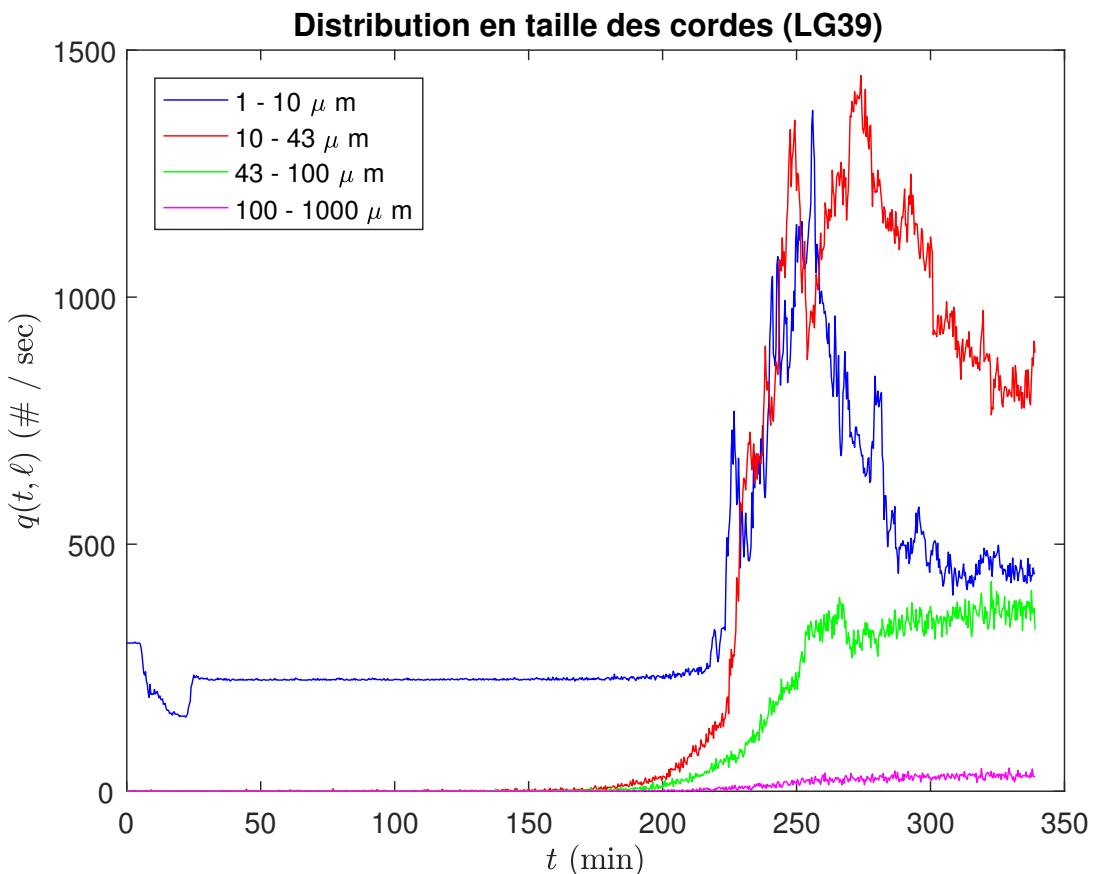


FIGURE 5.8. – Évolution au cours de l'expérience LG39 de la distribution en taille des cordes. Nous traçons le nombre  $q(t, \ell)$  de cordes détectées par seconde par la sonde à l'instant  $t$  ayant une taille  $\ell$  dans un intervalle fixé. Nous pouvons analyser le graphique de la même façon que dans la Figure 5.7. La germination est détectée à  $t \approx 175$  min.

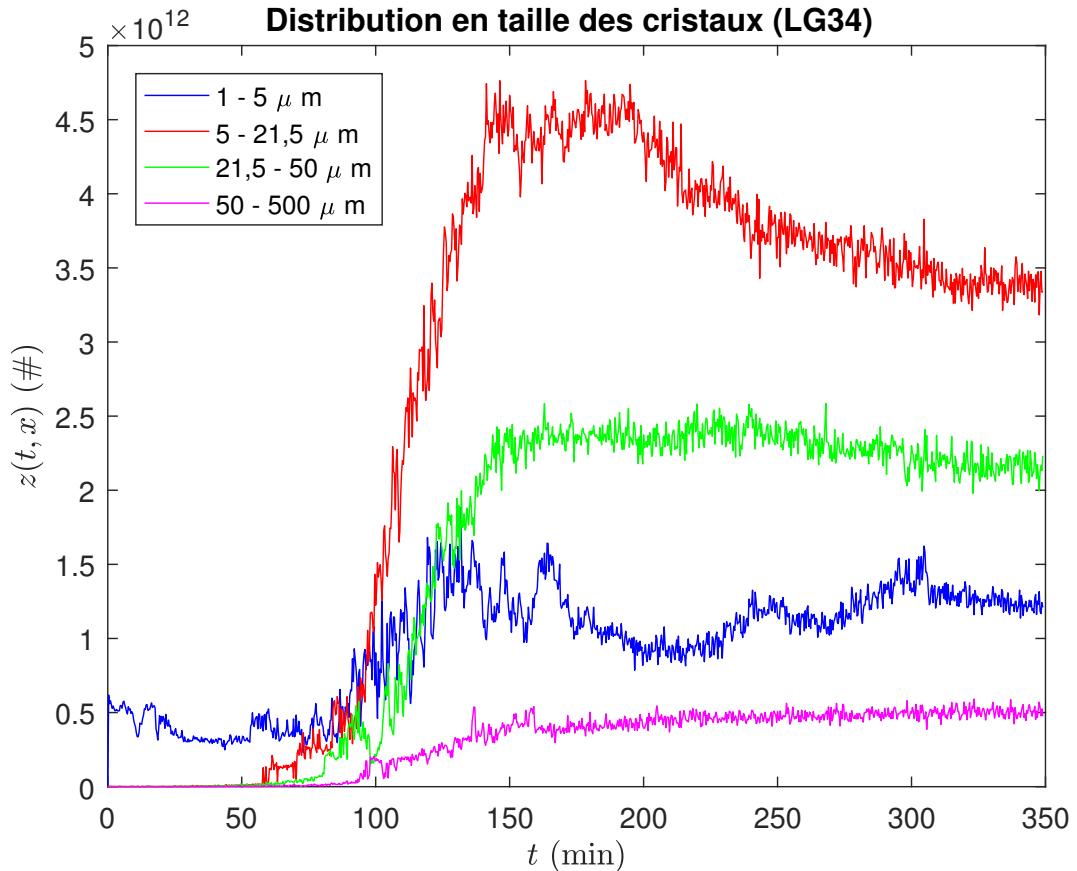


FIGURE 5.9. – Reconstruction en ligne de la DTC pour l'expérience LG34. Nous traçons le nombre  $z(t, x)$  de cristaux à l'instant  $t$  ayant une taille  $x$  dans un intervalle fixé. L'évolution de la DTC est reconstruite via la méthode en deux étapes présentée dans la Section 5.3. Le graphique permet de répondre à la question posée dans la légende de la Figure 5.7 : à partir de  $t \approx 100$  min, le nombre de petits cristaux est insuffisant pour expliquer le nombre de petites cordes ; certaines de ces cordes proviennent donc de cristaux plus importants. C'est ce type d'informations, a priori non fournies directement par la sonde FBRM®, que notre méthode permet d'acquérir. On a  $\varepsilon_q = 2,63\%$  et  $\varepsilon_y = 11,89\%$ .

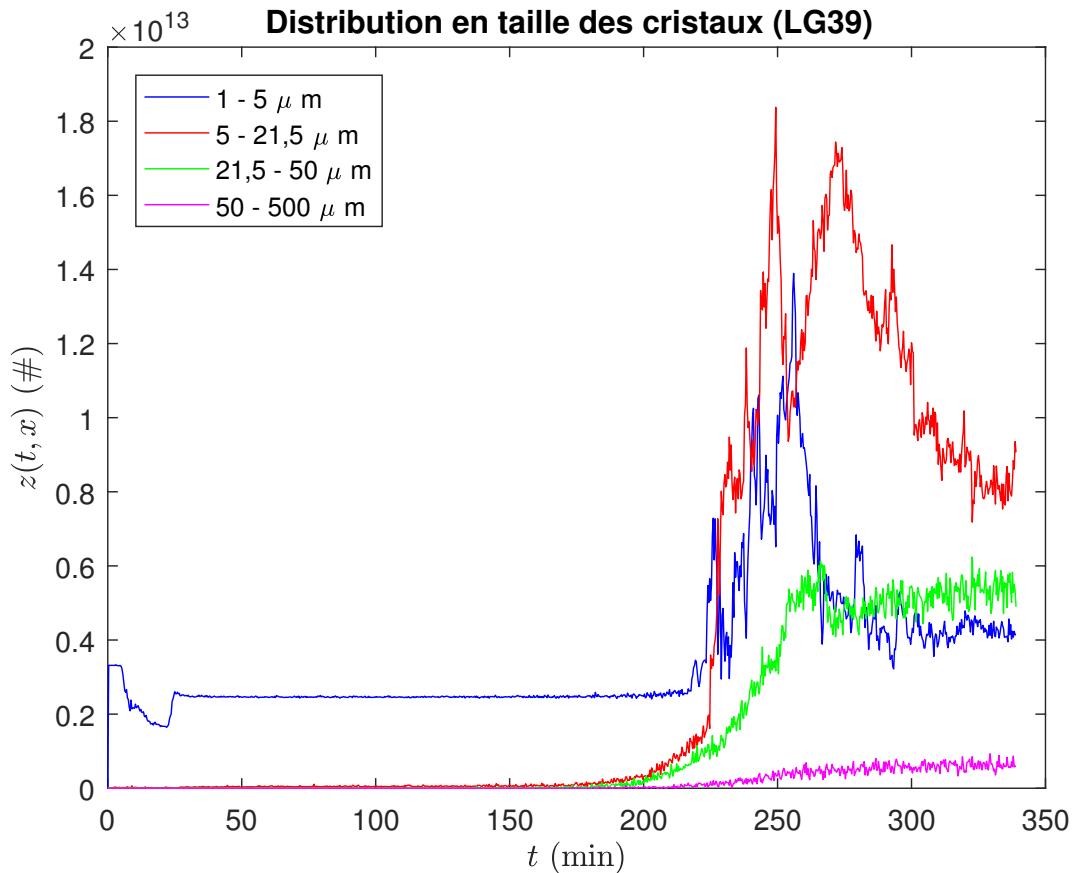


FIGURE 5.10. – Reconstruction en ligne de la DTC pour l'expérience LG39. Nous traçons le nombre  $z(t, x)$  de cristaux à l'instant  $t$  ayant une taille  $x$  dans un intervalle fixé. Il s'agit du même type de graphique que celui de la Figure 5.9, mais appliquée cette fois ci à l'expérience LG39. On a  $\varepsilon_q = 21,09\%$  et  $\varepsilon_y = 23,45\%$ . L'erreur est bien plus élevée que pour l'expérience LG34. Cette erreur élevée peut être due à la courte durée durant laquelle a lieu la germination, ce qui amplifie l'effet des bruits de mesure. Pour palier à cela, on peut renouveler la méthode en lissant les données obtenues par la FBRM® avant de reconstruire la DTC. Pour diminuer l'erreur sur la concentration, nous pouvons ajouter une étape supplémentaire à la procédure, mais cela ne peut se faire que hors ligne. Nous ajoutons comme contrainte à l'algorithme d'optimisation l'écart entre la concentration en solide mesurée et celle reconstruite. En combinant ces deux méthodes, nous obtenons un résultat graphique similaire que nous ne présentons pas, mais l'erreur par rapport à la mesure de la concentration a diminué : on a maintenant  $\varepsilon_y = 15,65\%$ .

## 5.5. Analyse théorique de la méthode FBRM®

### 5.5.1. Non observabilité de la FBRM®

Montrons dans cette section que la mesure obtenue grâce à la technologie FBRM® ne rend pas le système exactement observable. Pour cela, il suffit d'appliquer le Théorème 4.3.2 avec  $Y = L^2(0, 2x_{\max})$  et avec le noyau défini en (5.2) par

$$k : \begin{cases} [x_{\min}, x_{\max}] & \longrightarrow Y \\ x & \longmapsto \ell \mapsto 1 - \mathbb{1}_{[0, 2x]}(\ell) \sqrt{1 - \left(\frac{\ell}{2x}\right)^2}. \end{cases}$$

Comme  $k \leq 1$ , on a bien  $k \in L^\infty(x_{\min}, x_{\max}; Y)$ .

**Corollaire 5.5.1.** *La mesure de la distribution en taille des cordes ne rend le système (3.7) exactement observable pour l'espace d'arrivée  $Y = L^2(0, 2x_{\max})$  pour aucun temps  $\tau > 0$ .*

Ainsi, la mesure fournie par la FBRM® ne permet pas d'obtenir l'exacte observabilité espérée. Cependant, on montre dans la section suivante que l'opérateur de mesure associé est bien injectif.

### 5.5.2. Injectivité de la FBRM®

Dans cette section, nous montrons que l'opérateur à noyau

$$K : \begin{cases} L^2(x_{\min}, x_{\max}) & \longrightarrow L^2(0, 2x_{\max}) \\ z & \longmapsto Kz : \ell \mapsto \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} k(\ell, x) z(x) dx \end{cases}$$

est injectif. Cela signifie qu'à tout instant, la connaissance de la distribution en taille des cordes (mesurée par FBRM®) permet de reconstruire la DTC.

**Théorème 5.5.2.** *L'opérateur  $K$  est injectif.*

*Démonstration.* Soit  $z \in L^2(x_{\min}, x_{\max})$ . Supposons que  $Kz = 0$  dans  $L^2(0, 2x_{\max})$  et montrons que  $z = 0$ . On a pour presque tout  $\ell \in [0, 2x_{\min}]$ ,

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} k(\ell, x) z(x) dx \\ &= \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z(x) dx - \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} z(x) \sqrt{1 - \left(\frac{\ell}{2x}\right)^2} dx. \end{aligned} \tag{5.14}$$

Or,

- Pour tout  $\ell \in ]0, 2x_{\min}[$ ,  $x \mapsto z(x) \sqrt{1 - \left(\frac{\ell}{2x}\right)^2}$  est intégrable sur  $]x_{\min}, x_{\max}[$ .
- Pour tout  $x \in ]x_{\min}, x_{\max}[$ ,  $\ell \mapsto z(x) \sqrt{1 - \left(\frac{\ell}{2x}\right)^2}$  est de classe  $C^\infty$  sur  $]0, 2x_{\min}[$ .

Donc d'après le théorème de dérivation sous l'intégrale sur le borné  $]x_{\min}, x_{\max}[$ ,  $Kz \in C^\infty(]0, 2x_{\min}[)$ . Or  $Kz = 0$  presque partout sur  $]0, 2x_{\min}[$ . Donc pour tout  $\ell \in ]0, 2x_{\min}[$ ,  $Kz(\ell) = 0$  dans  $L^2(x_{\min}, x_{\max})$ . Donc pour tout  $n \in \mathbb{N}$ ,  $(Kz)^{(n)}(0) = 0$ . Déterminons par récurrence une expression de  $(Kz)^{(n)}$ .

Fixons  $x \in [x_{\min}, x_{\max}]$ . Définissons

$$f : \begin{cases} ]0, 2x_{\min}[ & \longrightarrow \mathbb{R} \\ \ell & \longmapsto -\sqrt{4x^2 - \ell^2}. \end{cases}$$

Montrons par récurrence que pour tout entier  $n \geq 1$ , il existe une famille  $(a_{i,j}^n)_{i,j \in \mathbb{N}} \in (\mathbb{R}_+)^{(\mathbb{N}^2)}$  telle que :

- L'ensemble  $\{(i, j) \in (\mathbb{N})^2 / a_{i,j}^n \neq 0\}$  est fini,
- $a_{0,n-1}^n \neq 0$ ,
- $\forall j \in \mathbb{N} \setminus \{n-1\}$ ,  $a_{0,j}^n = 0$ ,
- $f^{(2n)}(\ell) = \sum_{i,j \in \mathbb{N}} a_{i,j}^n \ell^i (4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2j+1}{2}}$  pour tout  $\ell \in ]0, 2x_{\min}[$ .

**Initialisation :** Déterminons  $f^{(2)}$ . On a pour tout  $\ell \in ]0, 2x_{\min}[$ ,

$$\begin{aligned} f'(\ell) &= \ell(4x^2 - \ell^2)^{-\frac{1}{2}}, \\ f^{(2)}(\ell) &= (4x^2 - \ell^2)^{-\frac{1}{2}} + \ell^2(4x^2 - \ell^2)^{-\frac{3}{2}}. \end{aligned}$$

Il suffit donc de poser, pour tout  $(i, j) \in (\mathbb{N}^*)^2$ ,

$$a_{i,j}^1 = \begin{cases} 1 & \text{si } (i, j) \in \{(0, 1), (2, 2)\} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

pour compléter l'initialisation.

**Héritéité :** Soit  $n \geq 1$  et supposons qu'une telle famille  $(a_{i,j}^n)_{i,j \in \mathbb{N}}$  existe. Déterminons une expression de  $f^{(2(n+1))}$ . On a pour tout  $\ell \in ]0, 2x_{\min}[$ ,

$$f^{(2n)}(\ell) = a_{0,n-1}(4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2(n-1)+1}{2}} + \sum_{i \geq 1, j \geq 0} a_{i,j}^n \ell^i (4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2j+1}{2}}. \quad (\text{par hypothèse})$$

Donc

$$\begin{aligned} f^{(2n+1)}(\ell) &= (2(n-1) + 1)a_{0,n-1}\ell(4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2n+1}{2}} \\ &\quad + \sum_{i \geq 1, j \geq 0} ia_{i,j}^n \ell^{i-1} (4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2j+1}{2}} + (2j+1)a_{i,j}^n \ell^{i+1} (4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2(j+1)+1}{2}} \\ &= (2(n-1) + 1)a_{0,n-1}\ell(4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2n+1}{2}} \\ &\quad + \sum_{i \geq 1, j \geq 0} (2j+1)a_{i,j}^n \ell^{i+1} (4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2(j+1)+1}{2}} \\ &\quad + \sum_{j \geq 0} a_{1,j}^n (4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2j+1}{2}} + \sum_{i \geq 2, j \geq 0} ia_{i,j}^n \ell^{i-1} (4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2j+1}{2}}. \end{aligned}$$

D'où

$$\begin{aligned}
 f^{(2n+2)}(\ell) &= (2(n-1)+1)a_{0,n-1}(4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2n+1}{2}} \\
 &\quad + (2(n-1)+1)(2n+1)a_{0,n-1}\ell^2(4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2(n+1)+1}{2}} \\
 &\quad + \sum_{i \geq 1, j \geq 0} (2(j+1)+1)(2j+1)a_{i,j}^n \ell^{i+2}(4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2(j+2)+1}{2}} \\
 &\quad + \sum_{i \geq 1, j \geq 0} (i+1)(2j+1)a_{i,j}^n \ell^i(4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2(j+1)+1}{2}} \\
 &\quad + \sum_{j \geq 0} (2j+1)a_{1,j}^n \ell(4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2(j+1)+1}{2}} \\
 &\quad + \sum_{i \geq 2, j \geq 0} (i-1)ia_{i,j}^n \ell^{i-2}(4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2j+1}{2}} \\
 &\quad + \sum_{i \geq 2, j \geq 0} (2j+1)ia_{i,j}^n \ell^i(4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2(j+1)+1}{2}} \\
 &= (2(n-1)+1)a_{0,n-1}(4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2n+1}{2}} \\
 &\quad + \sum_{j \geq 1} (2j-1)a_{1,j-1}^n \ell(4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2j+1}{2}} \\
 &\quad + \sum_{i \geq 3, j \geq 2} (2(j-1)+1)(2j-3)a_{i-2,j-2}^n \ell^i(4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2j+1}{2}} \\
 &\quad + \sum_{i \geq 1, j \geq 1} (i+1)(2j-1)a_{i,j-1}^n \ell^i(4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2j+1}{2}} \\
 &\quad + (2(n-1)+1)(2n+1)a_{0,n-1}\ell^2(4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2(n+1)+1}{2}} \\
 &\quad + \sum_{i \geq 0, j \geq 0} (i+1)(i+2)a_{i+2,j}^n \ell^i(4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2j+1}{2}} \\
 &\quad + \sum_{i \geq 2, j \geq 1} (2j-1)ia_{i,j-1}^n \ell^i(4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2j+1}{2}}.
 \end{aligned}$$

Posons, pour tout  $(i, j) \in \mathbb{N}^2$ ,

$$\begin{aligned}
 a_{i,j}^{n+1} &= (2n-1)a_{0,n-1}\mathbb{1}_{\{(0,n)\}}(i, j) + (2n-1)(2n+1)a_{0,n-1}\mathbb{1}_{\{1\} \times [1, +\infty[}(i, j) \\
 &\quad + (2j-1)(2j-3)a_{i-2,j-2}^n\mathbb{1}_{[3, +\infty[ \times [2, +\infty[}(i, j) + (i+1)(2j-1)a_{i,j-1}^n\mathbb{1}_{[1, +\infty[ \times [1, +\infty[}(i, j) \\
 &\quad + (2(n-1)+1)(2n+1)a_{0,n-1}\mathbb{1}_{\{(2,n+1)\}}(i, j) + (i+1)(i+2)a_{i+2,j}^n \\
 &\quad + (2j-1)ia_{i,j-1}^n\mathbb{1}_{[2, +\infty[ \times [1, +\infty[}(i, j).
 \end{aligned}$$

On a alors clairement  $a_{i,j}^{n+1} \geq 0$  pour tout  $i, j \geq 0$  car  $(a_{i,j}^n)_{i,j \in \mathbb{N}} \in (\mathbb{R}_+)^{(\mathbb{N}^2)}$ . De plus, l'ensemble  $\{(i, j) \in (\mathbb{N})^2 / a_{i,j}^{n+1} \neq 0\}$  est fini car  $\{(i, j) \in (\mathbb{N})^2 / a_{i,j}^n \neq 0\}$  l'est. Enfin, on a

$$a_{0,n}^{n+1} \geq (2n-1)a_{0,n-1}^n > 0, \quad \forall j \in \mathbb{N} \setminus \{n-1\}, \quad a_{0,j}^{n+1} = 0,$$

et pour tout  $\ell \in ]0, 2x_{\min}[$ ,

$$f^{(2(n+1))}(\ell) = \sum_{i,j \in \mathbb{N}} a_{i,j}^{n+1} \ell^i (4x^2 - \ell^2)^{-\frac{2j+1}{2}}.$$

Cela conclut la récurrence. Par conséquent, puisque  $(Kz)^{(2n)}(0) = 0$  pour chaque  $n \in \mathbb{N}^*$ , on a

$$0 = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} a_{0,n-1}^n \frac{z(x)}{(2x)^{2n}} dx , \quad a_{0,n-1}^n > 0. \quad (5.15)$$

Soit  $n \in \mathbb{N}^*$ . On a donc

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \frac{z(x)}{x^{2n}} dx \\ &= \int_{\frac{1}{x_{\max}}}^{\frac{1}{x_{\min}}} z\left(\frac{1}{\tilde{x}}\right) \tilde{x}^{2n-2} d\tilde{x} && (\tilde{x} = \frac{1}{x}) \\ &= \int_{\frac{1}{x_{\max}}}^{\frac{1}{x_{\min}}} \tilde{z}(\tilde{x}) \tilde{x}^{2n-2} d\tilde{x} && (\text{avec } \tilde{z} : [\frac{1}{x_{\max}}, \frac{1}{x_{\min}}] \ni \tilde{x} \mapsto z(\frac{1}{\tilde{x}})) \\ &= \frac{1}{2} \int_{\frac{1}{x_{\max}^2}}^{\frac{1}{x_{\min}^2}} \frac{\tilde{z}(\sqrt{\bar{x}})}{\sqrt{\bar{x}}} \bar{x}^{n-1} d\bar{x} && (\bar{x} = \tilde{x}^2) \\ &= \frac{1}{2} \int_{\frac{1}{x_{\max}^2}}^{\frac{1}{x_{\min}^2}} \bar{z}(\bar{x}) \bar{x}^{n-1} d\bar{x}. && (\text{avec } \bar{z} : [\frac{1}{x_{\max}^2}, \frac{1}{x_{\min}^2}] \ni \bar{x} \mapsto \sqrt{\bar{x}} \tilde{z}(\sqrt{\bar{x}})) \end{aligned}$$

Or la famille  $(x \mapsto x^n)_{n \in \mathbb{N}}$  est totale dans  $L^2(x_{\min}, x_{\max})$  d'après le théorème de Weierstrass. Donc  $\bar{z} = 0$ . D'où  $z = 0$  dans  $L^2(x_{\min}, x_{\max})$ , ce qui conclut la preuve.  $\square$

## 5.6. Conclusion

Ainsi, nous avons dans ce chapitre exploité les données fournies en ligne par une sonde FBRM® au cours d'un procédé de cristallisation. Après avoir présenté succinctement le principe de fonctionnement de l'instrument, nous avons proposé une modélisation probabiliste précise de la mesure effectuée. Une fois cette modélisation faite, nous avons pu exploiter la méthode de Tikhonov, puis la mesure de la concentration en solide, pour reconstruire la DTC à partir de la distribution en longueur de cordes. Nous avons d'abord testé la méthode proposée sur des données simulées. Les résultats étant concluants, nous avons mené des tests sur des données obtenues expérimentalement au cours d'un procédé de cristallisation. Bien que nous ne disposions pas de la connaissance de la DTC au cours de ces expériences, nous pouvons tester la qualité de l'algorithme en calculant l'écart relatif entre les données fournies par la FBRM® et la distribution en taille des cordes associée à la DTC reconstruite. Pour les deux expériences, cette erreur est respectivement de 3% et de 21%. Cette forte dispersion indique que d'autres expériences devraient être menées, et que les résultats semblent dépendre fortement de l'allure des données de la FBRM®. D'autre part, les DTC reconstruites sont en accord avec les résultats attendus (début de la germination et ordre d'apparition des tailles de cristaux). L'algorithme basé sur la FBRM® détaillé en Section 5.3 est donc celui qui répond le mieux à l'objectif fixé. Il offre une estimation de la DTC dont la qualité peut être mesurée et peut s'effectuer en ligne. Sur des données simulées, il reconstruit parfaitement la DTC.

Nous avons également mené une analyse théorique des informations apportées par la technologie FBRM®. Nous avons montré que cette mesure ne rend pas le système de

contrôle étudié observable, mais qu'elle est en revanche injective. Les observateurs similaires à ceux proposés dans [RTW10] ne s'adaptent donc pas immédiatement car le système n'est pas exactement observable. En revanche, un résultat de [Cel+89] laisse espérer qu'une mesure injective permette de construire un observateur faible (i.e. ne convergeant vers l'état que pour une topologie faible). Un projet intéressant à mettre en place à la suite de ce stage serait de tenter d'adapter les méthodes de [RTW10] au cas d'une mesure injective en nous plaçant dans la topologie faible. Un nouvel algorithme, à comparer avec celui présenté dans ce chapitre, pourrait alors être mis en place. Son avantage majeur serait d'exploiter pleinement la dynamique du système, ce que la méthode de Tikhonov, qui opère indépendamment à chaque instant, ne peut réaliser. Ce travail sera vraisemblablement mené à la suite du stage.

## Conclusion

L'objectif de ce stage était de concevoir un algorithme d'estimation en ligne de la distribution en taille des cristaux au cours d'un procédé de cristallisation. Après avoir effectué des recherches bibliographiques autour de la théorie du contrôle, des problèmes inverses et de la modélisation d'un procédé de cristallisation, nous avons été en mesure de formuler dans un cadre précis le problème mathématique posé. Après s'être assuré de son caractère bien posé, nous avons proposé deux stratégies pour résoudre ce problème d'estimation. Dans un premier temps, nous nous sommes basés sur la mesure de la concentration en solide dans le réacteur de cristallisation. L'idée principale était d'utiliser un observateur de Luenberger, en l'adaptant au contexte de la dimension infinie, puis d'appliquer la méthode de Tikhonov pour reconstruire la DTC. Cette méthode nous a permis de mener des simulations numériques, mais s'est heurtée à plusieurs problèmes importants : la nécessité d'une estimation de la vitesse de cristallisation, le manque d'informations fournies par cette mesure (non injectivité), et la propagation des erreurs. Les limites de cette mesure ont été analysées théoriquement et testées numériquement sur des données simulées.

Nous avons donc réorienté nos recherches vers un nouvel instrument de mesure, qui fournissait des informations a priori plus importantes : la sonde FBRM®. Un nouveau travail bibliographique a été nécessaire pour comprendre et modéliser la mesure effectuée par cette sonde. Poser un cadre probabiliste clair pour cette modélisation nous a permis d'écrire le problème de reconstruction de la DTC à partir de la FBRM® comme un problème inverse. Nous avons donc une nouvelle fois fait appel à la méthode de Tikhonov, et combiné les informations obtenues avec celles fournies par la mesure de la concentration en solide. L'algorithme qui a découlé de ce raisonnement a fait ses preuves aussi bien sur des données obtenues en simulation que sur des données expérimentales. Nous avons également mené une étude théorique du système de contrôle ayant pour sortie les données de la FBRM®. Bien que la FBRM® ne rende pas le système exactement observable, elle est néanmoins injective. Cette propriété laisse envisager une perspective intéressante : la réalisation d'un observateur convergeant faiblement vers la DTC à reconstruire. L'avantage majeur de ce nouvel algorithme serait d'exploiter pleinement la dynamique du système.

## A. Introduction à la cristallisation

Nous présentons dans cette annexe une introduction à la cristallisation basée sur [Ucc11, Chapitre 1]. Durant un procédé de cristallisation en réacteur fermé, l'objectif est de provoquer une solidification d'un produit dissout dans un solvant sans ajouter de produit. Le solide formé étant un cristal, on parle de cristallisation. Afin d'induire ce changement d'état, on procède à une diminution de la température. Dans la première section de cette annexe, nous expliquons en quoi une baisse de la température peut déclencher la cristallisation. Dans la seconde section, les mécanismes de germination et de croissance des cristaux sont exposés.

### A.1. Solubilité et sursaturation

La solubilité est la concentration massique maximale d'un soluté dans un solvant à l'équilibre thermodynamique. Elle représente donc la quantité maximale de produit qui peut être dissoute dans un volume fixé d'un solvant donné. Cette grandeur dépend de la pression et de la température. Dans un milieu isobare, la solubilité est généralement une fonction croissante convexe de la température. Diminuer la température favorise donc la cristallisation du produit.

La sursaturation est la grandeur physique qui représente l'écart entre la concentration en soluté dans le solvant et la solubilité. Pour des raisons cinétiques, il peut arriver que la concentration en soluté dépasse la solubilité, par exemple lors d'une rapide baisse de température. La durée de ce déséquilibre thermodynamique dépend de la valeur de la sursaturation. Si la sursaturation est faible, le temps de retour à l'équilibre peut être très élevé. Au contraire, si la sursaturation est élevée, le système va rapidement évoluer vers l'équilibre. Pour cela, une partie du soluté va cristalliser.

Dans un milieu isobare, on peut représenter comme en Figure A.1 l'état d'équilibre ou de déséquilibre thermodynamique du système en fonction de la concentration en soluté dans le solvant et de la température. Nous commençons par tracer la courbe de solubilité en fonction de la température. En-dessous de cette courbe, le système est à l'équilibre thermodynamique. On parle donc de zone stable. Dans cette zone, si des cristaux sont ajoutés, ils seront dissous tant que la concentration en soluté est inférieure à la solubilité. Au-dessus de cette courbe, le système est en déséquilibre.

Nous traçons ensuite la courbe de sursaturation, qui représente la limite entre la zone instable et la zone métastable. Au-dessus de cette courbe, la sursaturation du système est élevée et il va donc rapidement évoluer vers l'équilibre. Une partie du soluté va donc rapidement cristalliser. Les cristaux déjà présents vont croître, et de nouveaux cristaux vont spontanément apparaître (germination). Entre la courbe de solubilité et la courbe de sursaturation, la cinétique de cristallisation pour le retour à l'équilibre est plus lente, et la croissance de cristaux déjà présents sera avantageée par rapport à la germination de

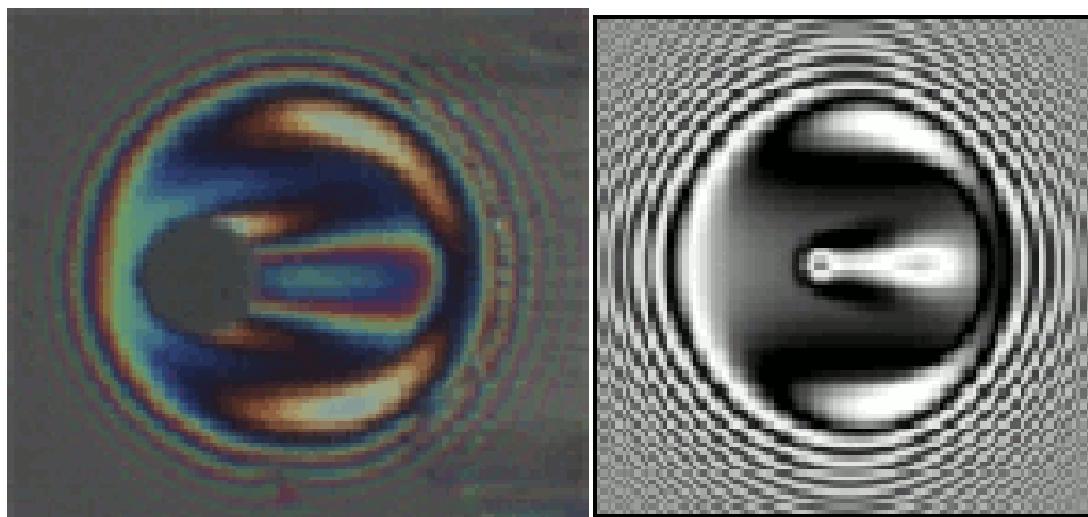


FIGURE A.1. – État du système en fonction de la concentration en soluté et de la température en milieu isobare.

nouveaux cristaux.

## A.2. Germination et croissance

Lorsque le système composé du produit et du solvant dans le réacteur de cristallisation est en déséquilibre thermodynamique, une partie du soluté va cristalliser afin de faire diminuer la concentration en soluté et donc de d'évoluer vers l'équilibre. 2 phénomènes vont ainsi consommer la sursaturation : la germination et la croissance des cristaux.

La germination est le phénomène par lequel de nouveaux cristaux apparaissent. Plusieurs mécanismes peuvent en être à l'origine.

1. La germination primaire : elle intervient lorsque le milieu ne contient pas encore de cristaux.
  - a) La germination primaire hétérogène : lorsque des impuretés sont présentes dans le milieu, les molécules de notre produit peuvent s'agglomérer autour d'une impureté et ainsi former le germe d'un nouveau cristal.
  - b) La germination primaire homogène : lorsque le milieu ne contient pas d'impuretés, les molécules de notre produit à cristalliser peuvent s'agglomérer entre-elles et former un germe qui, en grandissant, formera un cristal.
2. La germination secondaire : elle intervient lorsque le milieu contient déjà des cristaux.
  - a) La germination secondaire de contact : le milieu étant agité, des collisions entre cristaux peuvent avoir lieu. Les débris forment alors de nouveaux germes.
  - b) La germination secondaire de surface : lors de la croissance d'un cristal, une imperfection peut entraîner une brisure d'une partie de celui-ci. Cela forme un nouveau cristal.

Une fois un cristal formé, un phénomène d'adsorption du soluté par le cristal a lieu et entraîne la croissance des dimensions et de la masse du cristal. L'adsorption se caractérise

par l'intégration de molécules du soluté à la surface du cristal qui gardent leur structure moléculaire.

## B. Vérification du modèle de la FBRM®

Durant le stage, nous avons pu procéder au sein du laboratoire à une expérience visant à tester notre modélisation probabiliste de la mesure effectuée par la sonde FBRM®.

### B.1. Protocole expérimental

Nous disposons de billes de polystyrène de diamètres calibrés : des billes de  $30 \mu\text{m}$  de rayon, et des billes de  $300 \mu\text{m}$  de rayon. Nous utilisons deux instruments de mesure :

- un granulomètre Malvern Mastersizer MS3000, qui permet de mesurer la distribution en taille de particules en suspension dans un mélange. Notons que cet instrument ne peut être utilisé en ligne au cours d'une cristallisation, puisqu'il procède sur des échantillons prélevés et non au sein d'un réacteur ;
- une sonde FBRM® ParticleTrack Lasentech.

Pour chacun de ces deux types de billes, nous procédons à la même expérimentation que nous allons maintenant décrire. Nous versons un échantillon de billes dans un bêcher rempli d'eau, et agitons le mélange afin que les particules soient en suspension dans l'eau. Nous procédons à une mesure avec le granulomètre. Cette mesure permet d'une part de vérifier le calibrage des billes, et d'autre part de quantifier la dispersion des billes autour de ce calibrage (c'est-à-dire la variance de la distribution en taille des particules). Nous plongeons ensuite la sonde FBRM® dans le bêcher et procédons à la mesure. Nous pouvons ensuite vérifier la qualité de notre modélisation de la FBRM®. À partir de la distribution en taille de particules fournie par le granulomètre, nous calculons directement la distribution en taille des cordes via les calculs menés dans la Section 5.2. L'écart entre cette distribution en taille des cordes et les données fournies par la FBRM® quantifie l'écart entre la mesure réellement effectuée par la sonde et la modélisation de cette mesure.

### B.2. Résultats

Nous traçons sur les figures B.1 et B.2 les distributions en taille des particules fournies par le granulomètre ainsi que les distributions en taille des cordes mesurées par la sonde FBRM® et reconstruites à partir de la distribution en taille des particules. Les distributions en taille des cordes obtenues révèlent un biais important (46 - 89%) entre les données fournies par la sonde FBRM® et les données reconstruites. Cette erreur signifie que la modélisation faite de la FBRM® n'est pas adaptée : la sonde peut fournir une distribution éloignée de la distribution réelle des tailles des cordes. De nombreux phénomènes physiques peuvent en être la cause (dispersion du faisceau laser incident sur les particules, amas de particules, ...) et sont étudiés dans plusieurs articles (par exemple [Sch13] et [Le +10]). Afin de mener une étude mathématique basée sur la sonde FBRM®, nous faisons le choix (comme dans les articles [LW05] et [SLB99]) de conserver la modélisation de la FBRM® en supposant qu'elle renvoie exactement la distribution en taille des cordes, tout en gardant à l'esprit que cette modélisation peut engendrer un biais important et pourra être améliorée dans des études ultérieures.

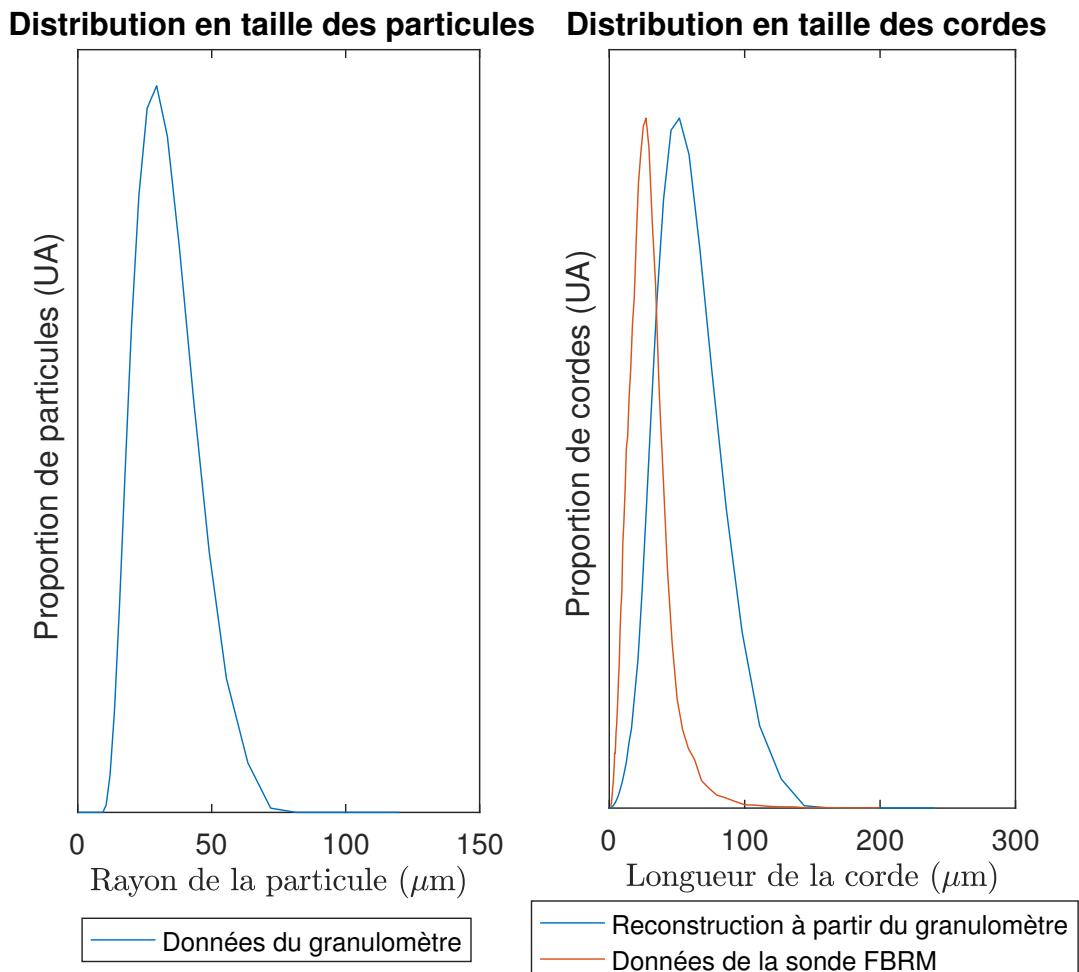


FIGURE B.1. – Distributions en taille des particules et des cordes dans le mélange pour des billes de  $30 \mu\text{m}$  de rayon. Le pic principal de la distribution en taille des particules est bien autour de  $30 \mu\text{m}$ . On constate un décalage de 46% entre les pics des distributions en taille des cordes.

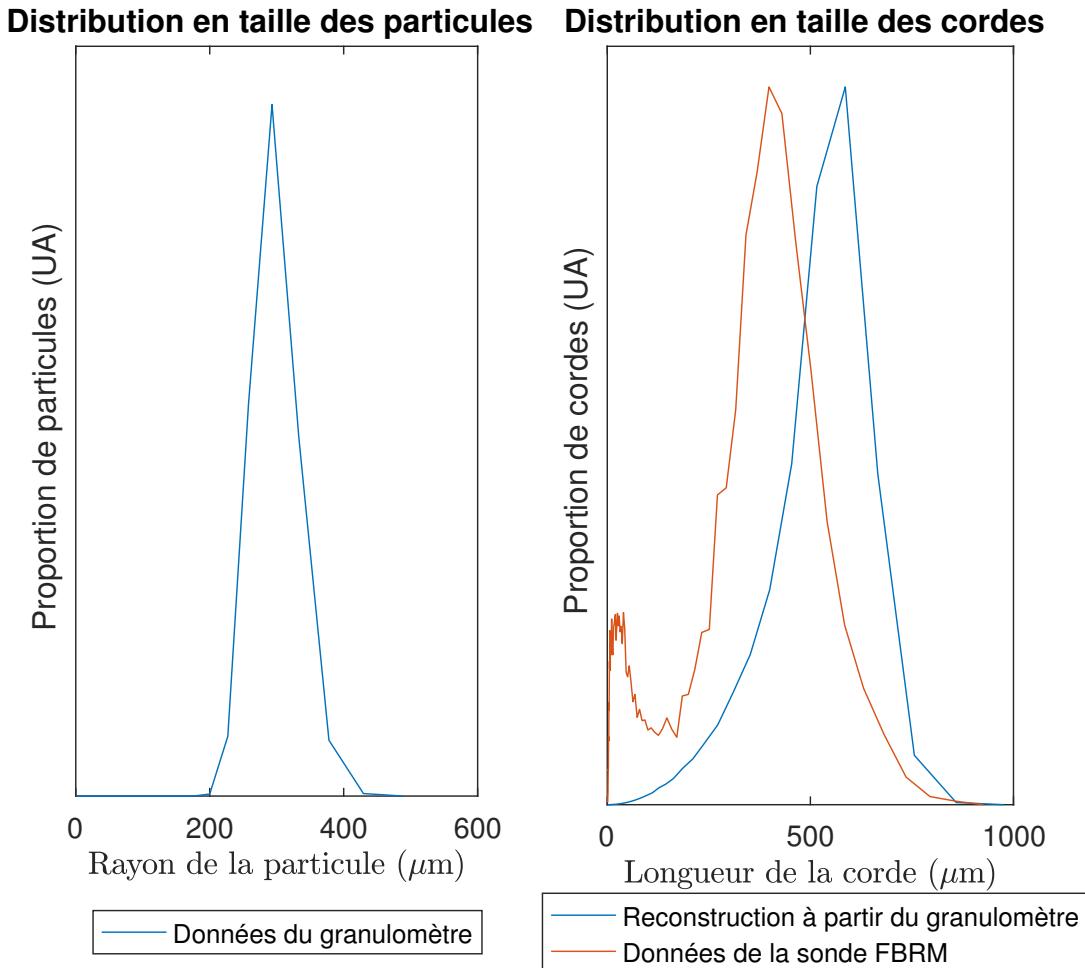


FIGURE B.2. – Distributions en taille des particules et des cordes dans le mélange pour des billes de  $300 \mu\text{m}$  de rayon. Le pic principal de la distribution en taille des particules est bien autour de  $300 \mu\text{m}$ . On constate un décalage de 89% entre les pics des distributions en taille des cordes. Le pic de la FBRM® dans le domaine des très petites cordes s'explique par les poussières possiblement présentes dans le mélange.

## C. Injectivité de la FBRM® sur les fonctions constantes par morceaux

Avant de montrer l'injectivité de la FBRM® telle qu'elle est présentée dans la Section 5.5.2, nous avons obtenu un résultat intermédiaire que nous présentons dans cette annexe. Nous montrons qu'à un instant fixé, si la distribution en taille des cordes est connue, et que la distribution en taille des cristaux est une fonction en escalier sur une discrétisation connue, alors il est possible de reconstruire de manière unique la distribution en taille des cristaux à partir de la distribution en taille des cordes. Bien que ce résultat puisse être vu comme un corollaire du Théorème 5.5.2, nous en proposons ici une démonstration indépendante.

Soit  $n \in \mathbb{N}$ . Soit  $x_{\max} = x_n > x_{n-1} > \dots > x_1 > x_0 = x_{\min} \geq 0$  une discrétisation du segment  $[x_{\min}, x_{\max}]$ . Soit

$$\mathcal{E}_{(x_i)_{i \in \llbracket 0, n \rrbracket}} = \left\{ f \in L^2(x_{\min}, x_{\max}) / \exists (f_i)_{i \in \llbracket 1, n \rrbracket} \in \mathbb{R}^n / f = \sum_{i=1}^n f_i \mathbb{1}_{[x_{i-1}, x_i[} \right\}. \quad (\text{C.1})$$

On dira que  $\mathcal{E}_{(x_i)_{i \in \llbracket 0, n \rrbracket}}$  est l'espace des fonctions en escalier sur la discrétisation  $(x_i)_{i \in \llbracket 0, n \rrbracket}$ .

**Proposition C.0.1.** *Soit  $n \in \mathbb{N}$ . Soit  $x_n > x_{n-1} > \dots > x_1 > x_0 \geq 0$ .  $\mathcal{E}_{(x_i)_{i \in \llbracket 0, n \rrbracket}}$  est un espace vectoriel de dimension  $n$ .*

*Démonstration.*  $\mathcal{E}_{(x_i)_{i \in \llbracket 0, n \rrbracket}}$  est un sous-espace vectoriel des fonctions continues par morceaux. En effet,  $0 \in \mathcal{E}_{(x_i)_{i \in \llbracket 0, n \rrbracket}}$  et si  $f = \sum_{i=1}^n f_i \mathbb{1}_{[x_{i-1}, x_i[}$ ,  $g = \sum_{i=1}^n g_i \mathbb{1}_{[x_{i-1}, x_i[} \in \mathcal{E}_{(x_i)_{i \in \llbracket 0, n \rrbracket}}$  et  $\lambda \in \mathbb{R}$ , alors  $f + \lambda g \in \mathcal{E}_{(x_i)_{i \in \llbracket 0, n \rrbracket}}$  car

$$f + \lambda g = \sum_{i=1}^n (f_i + \lambda g_i) \mathbb{1}_{[x_{i-1}, x_i[}.$$

De plus,  $(\mathbb{1}_{[x_{i-1}, x_i[})_{i \in \llbracket 1, n \rrbracket}$  est clairement une base de  $\mathcal{E}_{(x_i)_{i \in \llbracket 0, n \rrbracket}}$ . Donc  $\mathcal{E}_{(x_i)_{i \in \llbracket 0, n \rrbracket}}$  est bien un espace vectoriel et  $\dim \mathcal{E}_{(x_i)_{i \in \llbracket 0, n \rrbracket}} = n$ .  $\square$

**Théorème C.0.2.** *Soit  $n \in \mathbb{N}$ . Soit  $(x_i)_{i \in \llbracket 0, n \rrbracket}$  une discrétisation du segment  $[x_{\min}, x_{\max}]$ . Soit*

$$K : \begin{cases} L^2(x_{\min}, x_{\max}) & \longrightarrow L^2(0, 2x_{\max}) \\ z & \mapsto \ell \mapsto \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} k(\ell, x) z(x) dx \end{cases}$$

*Alors la restriction  $K|_{\mathcal{E}_{(x_i)_{i \in \llbracket 0, n \rrbracket}}}$  est injective.*

*Démonstration.* Soit  $z \in \mathcal{E}_{(x_i)_{i \in \llbracket 0, n \rrbracket}}$ . Il existe alors  $(z_i)_{i \in \llbracket 1, n \rrbracket} \in \mathbb{R}^n$  tel que

$$z = \sum_{i=1}^n z_i \mathbb{1}_{[x_{i-1}, x_i[}. \quad (\text{C.2})$$

Soit  $y = Kz$ . Déterminons  $z$  en fonction de  $y$ . On a, pour tout  $\ell \in [0, 2x_{\max}]$ ,

$$y(\ell) = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} k(\ell, x) z(x) dx = \sum_{i=1}^n z_i \int_{x_{i-1}}^{x_i} k(\ell, x) dx.$$

Posons, pour tout  $i \in \llbracket 0, n \rrbracket$ ,  $\ell_i = 2x_i$ . Soit  $j \in \llbracket 0, n-1 \rrbracket$ . On a :

$$\begin{aligned} y(\ell_j) &= \sum_{i=1}^n z_i \int_{x_{i-1}}^{x_i} k(\ell_j, x) dx \\ &= \sum_{i=1}^n z_i \int_{x_{i-1}}^{x_i} 1 - \mathbb{1}_{[0, 2x]}(\ell_j) \sqrt{1 - \left(\frac{\ell_j}{2x}\right)^2} dx \\ &= \sum_{i=1}^n z_i (x_i - x_{i-1}) - \sum_{i=1}^n z_i \int_{x_{i-1}}^{x_i} \mathbb{1}_{[0, 2x]}(\ell_j) \sqrt{1 - \left(\frac{x_j}{x}\right)^2} dx \\ &= \sum_{i=1}^n z_i (x_i - x_{i-1}) - \sum_{i=1}^j z_i \int_{x_{i-1}}^{x_i} \sqrt{1 - \left(\frac{x_j}{x}\right)^2} dx \end{aligned}$$

Soit  $Z = (z_i)_{i \in \llbracket 1, n \rrbracket}$  et  $Y = (y_j)_{j \in \llbracket 0, n-1 \rrbracket}$ . Soit

$$M = \begin{bmatrix} \beta_1 & \beta_2 & \dots & \beta_{n-1} & \beta_n \\ \beta_1 - \alpha_{1,1} & \beta_2 & \dots & \vdots & \vdots \\ \beta_1 - \alpha_{1,2} & \beta_2 - \alpha_{2,2} & \dots & \beta_{n-1} & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \beta_1 - \alpha_{1,n-1} & \beta_2 - \alpha_{2,n-1} & \dots & \beta_{n-1} - \alpha_{n-1,n-1} & \beta_n \end{bmatrix},$$

$$\alpha_{i,j} = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \sqrt{1 - \left(\frac{x_j}{x}\right)^2} dx, \quad \beta_i = x_i - x_{i-1}.$$

On a alors  $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$  et

$$Y = MZ. \tag{C.3}$$

Il suffit donc de montrer que  $M$  est inversible. En soustrayant la première ligne de  $M$  aux autres et en réordonnant, on montre que  $M$  est inversible si et seulement si la matrice triangulaire suivante l'est :

$$\begin{bmatrix} -\alpha_{1,1} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & 0 & \vdots \\ -\alpha_{1,n-1} & \dots & -\alpha_{n-1,n-1} & 0 \\ \beta_1 & \dots & \beta_{n-1} & \beta_n \end{bmatrix}.$$

Or, puisque  $\beta_n = x_n - x_{n-1} > 0$  et que tout  $i \in \llbracket 1, n-1 \rrbracket$ ,  $\alpha_{i,i} > 0$ ,  $M$  est inversible.  $\square$

## Bibliographie

- [Agi+14] Okpeafoh S. AGIMELEN et al. « Estimation of Particle Size Distribution and Aspect Ratio of Non-Spherical Particles From Chord Length Distribution ». In : (2014). arXiv : 1408.4399 [physics.data-an] (cf. p. 52).
- [BC16] G. BASTIN et J.M. CORON. *Stability and Boundary Stabilization of 1-D Hyperbolic Systems*. Progress in Nonlinear Differential Equations and Their Applications. Springer International Publishing, 2016. ISBN : 9783319320625. URL : [https://books.google.fr/books?id=hE2%5C\\_DAAAQBAJ](https://books.google.fr/books?id=hE2%5C_DAAAQBAJ) (cf. p. 28).
- [BV04] Stephen BOYD et Lieven VANDENBERGHE. *Convex Optimization*. New York, NY, USA : Cambridge University Press, 2004. ISBN : 0521833787 (cf. p. 43, 55).
- [Cel+89] F. CELLE et al. « Synthesis of nonlinear observers : A harmonic-analysis approach ». In : *Mathematical systems theory* 22.1 (1<sup>er</sup> déc. 1989), p. 291–322. ISSN : 1433-0490. DOI : 10.1007/BF02088304. URL : <https://doi.org/10.1007/BF02088304> (cf. p. 67).
- [Cor07] J.M. CORON. *Control and Nonlinearity*. Mathematical surveys and monographs. American Mathematical Society, 2007. ISBN : 9780821836682. URL : <https://books.google.fr/books?id=aEKv1bpqrKQC> (cf. p. 18, 19, 22).
- [JZ12] Birgit JACOB et Hans ZWART. *Linear Port-Hamiltonian Systems on Infinite-dimensional Spaces*. Jan. 2012 (cf. p. 12).
- [Ker02] Michel KERN. « Problèmes inverses : aspects numériques ». Lecture. 1999 à 2002, École supérieure d'ingénieurs Léonard de Vinci, sept. 2002. URL : <https://cel.archives-ouvertes.fr/cel-00168393> (cf. p. 14–16).
- [Le +10] Hung LE BA et al. « Chord length distributions measurements during crystallization and agglomeration of gas hydrate in a water-in-oil emulsion : Simulation and experimentation ». In : *Chemical Engineering Science* 65.3 (2010), p. 1185–1200. DOI : 10.1016/j.ces.2009.09.074. URL : <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00461966> (cf. p. 72).
- [Lue64] David LUENBERGER. « Observing the State of a Linear System ». In : MIL8 (mai 1964), p. 74–80 (cf. p. 13).
- [LW05] Mingzhong LI et Derek WILKINSON. « Determination of Non-spherical Particle Size Distribution from Chord Length Measurements. Part 1 : Theoretical Analysis ». In : 60 (juin 2005), p. 3251–3265 (cf. p. 52, 55, 72).
- [Met07] METTLER-TOLEDO. *Lasentec D600 Hardware Manual*. 2007 (cf. p. 48).
- [Met16] METTLER TOLEDO AC. *Présentation de la méthode de mesure ParticleTrack*. Youtube. 2016. URL : [https://www.youtube.com/watch?time\\_continue=20&v=55Lu6Z119e0](https://www.youtube.com/watch?time_continue=20&v=55Lu6Z119e0) (cf. p. 48, 49).
- [Paz83] A PAZY. *Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations*. T. 44. Jan. 1983 (cf. p. 22).

- [RTW10] Karim RAMDANI, Marius TUCSNAK et George WEISS. « Recovering the initial state of an infinite-dimensional system using observers ». In : *Automatica* 46.10 (2010), p. 1616–1625. ISSN : 0005-1098. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.automatica.2010.06.032>. URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0005109810002827> (cf. p. 67).
- [Sch13] Stefan SCHELER. « Ray tracing as a supportive tool for interpretation of FBRM signals from spherical particles ». In : 101 (juil. 2013), p. 503–5014 (cf. p. 72).
- [SLB99] M.J.H. SIMMONS, P.A. LANGSTON et A.S. BURBIDGE. « Particle and droplet size analysis from chord distributions ». In : *Powder Technology* 102.1 (1999), p. 75–83. ISSN : 0032-5910. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0032-5910\(98\)00197-1](https://doi.org/10.1016/S0032-5910(98)00197-1). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591098001971> (cf. p. 50, 72).
- [Tah16] Yousra TAHRI. « Vers une meilleure compréhension de la cristallisation en solution de polymorphes : étude expérimentale et modélisation par bilan de population et par équations cinétiques ». 2016LYSE1159. Thèse de doct. 2016. URL : <http://www.theses.fr/2016LYSE1159/document> (cf. p. 56).
- [Tit26] E. C. TITCHMARSH. « The Zeros of Certain Integral Functions ». In : *Proceedings of the London Mathematical Society* s2-25.1 (1926), p. 283–302. DOI : 10.1112/plms/s2-25.1.283. eprint : <https://londmathsoc.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1112/plms/s2-25.1.283>. URL : <https://londmathsoc.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1112/plms/s2-25.1.283> (cf. p. 35).
- [TW09] Marius TUCSNAK et George WEISS. *Observation and Control for Operator Semigroups*. T. 11. Jan. 2009. ISBN : 9783764389932 (cf. p. 12, 18, 19).
- [Ucc11] Basile UCCHEDDU. « Observer for a batch crystallization process ». Theses. Université Claude Bernard - Lyon I, juil. 2011. URL : <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00751922> (cf. p. 17, 25, 27, 69).

