Modélisation et contrôle numérique de systèmes dynamiques en agronomie Partie 3: Identification par moindres carrés

Module de Formation Continue Supagro Montpellier - Cursus Data Science -
16-19 Janvier 2018, Montpellier, France

Céline Casenave[1]
[1]INRA UMR INRA-SupAgro MISTEA, Montpellier, France

Identification de modèles

Objectif

Question: quelles sont les valeurs $\hat{\theta}$ des paramètres θ d'un modèle donné qui permettent d'obtenir des sorties simulées proches des mesures?

Identification de modèles
Objectif

Question: quelles sont les valeurs $\hat{\theta}$ des paramètres θ d'un modèle donné qui permettent d'obtenir des sorties simulées proches des mesures?

Formulation mathématique du problème:
Problème de **minimisation** d'une **fonction objectif** $J(\theta)$, de la forme:

$$\hat{\theta} = \text{argmin}_{\theta \in \Omega} J(\theta)$$

où Ω est l'ensemble des valeurs des paramètres θ admissibles.

Identification de modèles
Objectif

Question: quelles sont les valeurs $\hat{\theta}$ des paramètres θ d'un modèle donné qui permettent d'obtenir des sorties simulées proches des mesures?

Formulation mathématique du problème:
Problème de **minimisation** d'une **fonction objectif** $J(\theta)$, de la forme:

$$\hat{\theta} = \text{argmin}_{\theta \in \Omega} J(\theta)$$

où Ω est l'ensemble des valeurs des paramètres θ admissibles.

$\Rightarrow$ notion de proximité à clarifier: "proches" en quel sens? selon quelle distance?

Identification de modèles
Notion de distance en mathématiques

Objectif: pour quantifier l'éloignement entre deux objets de même nature.

Identification de modèles
Notion de distance en mathématiques

Objectif: pour quantifier l'éloignement entre deux objets de même nature.

Distance "intuitive" = distance euclidienne
définie comme la racine de la somme des différences au carré

$$d(x,y) = \sqrt{\sum_{i=1}^{N} (x_i - y_i)^2}$$

où

- $x = (x_1, ..., x_N)^T \in \mathbb{R}^N$: vecteur de **données simulées** (avec le modèle et donc dépendantes des **paramètres** θ)
- $y = (y_1, ..., y_N)^T \in \mathbb{R}^N$: vecteur des **données mesurées** expérimentalement

Identification de modèles
Notion de distance en mathématiques

Objectif: pour quantifier l'éloignement entre deux objets de même nature.

Distance "intuitive" = distance euclidienne pondérée
définie comme la racine de la somme des différences au carré

$$d(x,y) = \sqrt{\sum_{i=1}^{N} \beta_i (x_i - y_i)^2}$$

où • β_i sont des poids positifs

- $x = (x_1, ..., x_N)^T \in \mathbb{R}^N$: vecteur de **données simulées** (avec le modèle et donc dépendantes des **paramètres** θ)
- $y = (y_1, ..., y_N)^T \in \mathbb{R}^N$: vecteur des **données mesurées** expérimentalement

Problème de moindres carrés
Formulation

Problème de minimisation:

$$\hat{\theta} = \text{argmin}_{\theta \in \Omega} J(\theta) \text{ avec } J(\theta) = \sum_{i=1}^{N} \beta_i (y_i(\theta) - y_i)^2$$

où
- θ est le **vecteur de paramètres** du modèle
- N est le **nombre d'instants** t_i d'observation
- y_i est le **vecteur des observations (mesures)** à l'instant t_i
- $y_i(\theta)$ est le **vecteur des estimations données** par le modèle à l'instant t_i en fonction de θ
- β_i est un **coefficient de pondération** pouvant être différent selon l'instant d'observation

Problème de moindres carrés
Formulation

Problème de minimisation:

$$\hat{\theta} = \text{argmin}_{\theta \in \Omega} J(\theta) \text{ avec } J(\theta) = \sum_{i=1}^{N} \beta_i (y_i(\theta) - y_i)^2$$

où
- θ est le **vecteur de paramètres** du modèle
- N est le **nombre d'instants** t_i d'observation
- y_i est le **vecteur des observations (mesures)** à l'instant t_i
- $y_i(\theta)$ est le **vecteur des estimations données** par le modèle à l'instant t_i en fonction de θ
- β_i est un **coefficient de pondération** pouvant être différent selon l'instant d'observation

$\Rightarrow$ **solution et méthode à utiliser dépendent du modèle utilisé**

Modèles de regression linéaire
Solution du problème de moindres carrés

Forme des modèles: modèles linéaires par rapport à θ:

$$y_i(\theta) = \phi_i^T \theta$$

où ϕ_i est un vecteur de même taille que θ appelé **régresseur**.

Modèles de regression linéaire
Solution du problème de moindres carrés

Forme des modèles: modèles linéaires par rapport à θ:

$$y_i(\theta) = \phi_i^T \theta$$

où ϕ_i est un vecteur de même taille que θ appelé **régresseur**.

Problème de moindres carrés:

$$\min_{\theta \in \Omega} J(\theta) = \sum_{i=1}^{N} \beta_i (\phi_i^T \theta - y_i)^2$$

Modèles de regression linéaire
Solution du problème de moindres carrés

Forme des modèles: modèles linéaires par rapport à θ:

$$y_i(\theta) = \phi_i^T \theta$$

où ϕ_i est un vecteur de même taille que θ appelé **régresseur**.

Problème de moindres carrés:

$$\min_{\theta \in \Omega} J(\theta) = \sum_{i=1}^{N} \beta_i (\phi_i^T \theta - y_i)^2$$

Solution analytique appelée **estimateur des moindres carrés**:

$$\hat{\theta} = \left[\sum_{i=1}^{N} \beta_i \phi_i \phi_i^T \right]^{-1} \sum_{i=1}^{N} \beta_i \phi_i y_i$$

sous condition que la matrice $\sum_{i=1}^{N} \beta_i \phi_i \phi_i^T$ est inversible.

Modèles de régression linéaire

Exemple: taux de croissance

Fonction de Monod: $\mu(S) = k\dfrac{S}{a+S}$

Problème: trouver les paramètres a et k de la fonction à partir de N mesures bruitées S_i et μ_i, $i = 1 : N$ de $S(t_i)$ et $\mu(S(t_i))$

Modèles de régression linéaire

Exemple: taux de croissance

Fonction de Monod: $\mu(S) = k\dfrac{S}{a+S}$

Problème: trouver les paramètres a et k de la fonction à partir de N mesures bruitées S_i et μ_i, $i = 1 : N$ de $S(t_i)$ et $\mu(S(t_i))$

Méthode 1: résoudre le problème de moindres carrés:

$$(\hat{a}, \hat{k}) = \text{argmin}_{(a,k)\in\Omega} \sum_{i=1}^{N} \beta_i \left(\mu_i - k\frac{S_i}{a+S_i}\right)^2$$

Modèles de régression linéaire
Exemple: taux de croissance

Fonction de Monod: $\mu(S) = k\dfrac{S}{a+S}$

Problème: trouver les paramètres a et k de la fonction à partir de N mesures bruitées S_i et μ_i, $i = 1 : N$ de $S(t_i)$ et $\mu(S(t_i))$

Méthode 1: résoudre le problème de moindres carrés:

$$(\hat{a}, \hat{k}) = \text{argmin}_{(a,k)\in\Omega} \sum_{i=1}^{N} \beta_i \left(\mu_i - k\frac{S_i}{a+S_i} \right)^2$$

$\Rightarrow$ modèle non linéaire par rapport à a

$\Rightarrow$ utilisation de méthodes non linéaires

Modèles de régression linéaire

Exemple: taux de croissance

Fonction de Monod: $\mu(S) = k\dfrac{S}{a+S}$

Problème: trouver les paramètres a et k de la fonction à partir de N mesures bruitées S_i et μ_i, $i = 1 : N$ de $S(t_i)$ et $\mu(S(t_i))$

Méthode 2: transformer le problème pour le rendre linéaire

Modèles de régression linéaire
Exemple: taux de croissance

Fonction de Monod: $\mu(S) = k\dfrac{S}{a+S}$

Problème: trouver les paramètres a et k de la fonction à partir de N mesures bruitées S_i et μ_i, $i = 1 : N$ de $S(t_i)$ et $\mu(S(t_i))$

Méthode 2: transformer le problème pour le rendre linéaire
Par exemple:

$$\mu(S) = k\frac{S}{a+S} \iff (a+S)\mu(S) = kS \iff S\mu(S) = kS - a\mu(S)$$

$$\iff S\mu(S) = [S \mid -\mu(S)] \begin{bmatrix} k \\ a \end{bmatrix} \iff y_i(\theta) = \phi_i^T \theta$$

avec: $y_i(\theta) = S_i\mu(S_i)$, $\theta = \begin{bmatrix} k \\ a \end{bmatrix}$ et $\phi_i = \begin{bmatrix} S_i \\ -\mu(S_i) \end{bmatrix}$

Modèles de régression linéaire
Exemple: taux de croissance

$$\textbf{Fonction de Monod}: \mu(S) = k\frac{S}{a+S}$$

Problème: trouver les paramètres a et k de la fonction à partir de N mesures bruitées S_i et μ_i, $i = 1 : N$ de $S(t_i)$ et $\mu(S(t_i))$

Méthode 2: transformer le problème pour le rendre linéaire
Puis résoudre le problème de moindres carrés:

$$(\hat{a}, \hat{k}) = \text{argmin}_{(a,k)\in\Omega} \sum_{i=1}^{N} \beta_i \left([S_i \mid -\mu_i] \begin{bmatrix} k \\ a \end{bmatrix} - S_i\mu_i \right)^2$$

Modèles de régression linéaire
Exemple: taux de croissance

Fonction de Monod: $\mu(S) = k\dfrac{S}{a+S}$

Problème: trouver les paramètres a et k de la fonction à partir de N mesures bruitées S_i et μ_i, $i = 1 : N$ de $S(t_i)$ et $\mu(S(t_i))$

Méthode 2: transformer le problème pour le rendre linéaire
Puis résoudre le problème de moindres carrés:

$$(\hat{a}, \hat{k}) = \text{argmin}_{(a,k)\in\Omega} \sum_{i=1}^{N} \beta_i \left([S_i \mid -\mu_i] \begin{bmatrix} k \\ a \end{bmatrix} - S_i\mu_i \right)^2$$

Solution:

$$\hat{\theta} = \left[\sum_{i=1}^{N} \beta_i \begin{bmatrix} S_i \\ -\mu_i \end{bmatrix} [S_i \mid -\mu_i] \right]^{-1} \sum_{i=1}^{N} \beta_i \begin{bmatrix} S_i \\ -\mu_i \end{bmatrix} S_i\mu_i$$

Modèles de régression linéaire

Exemple: taux de croissance

Fonction de Monod: $\mu(S) = k\dfrac{S}{a+S}$

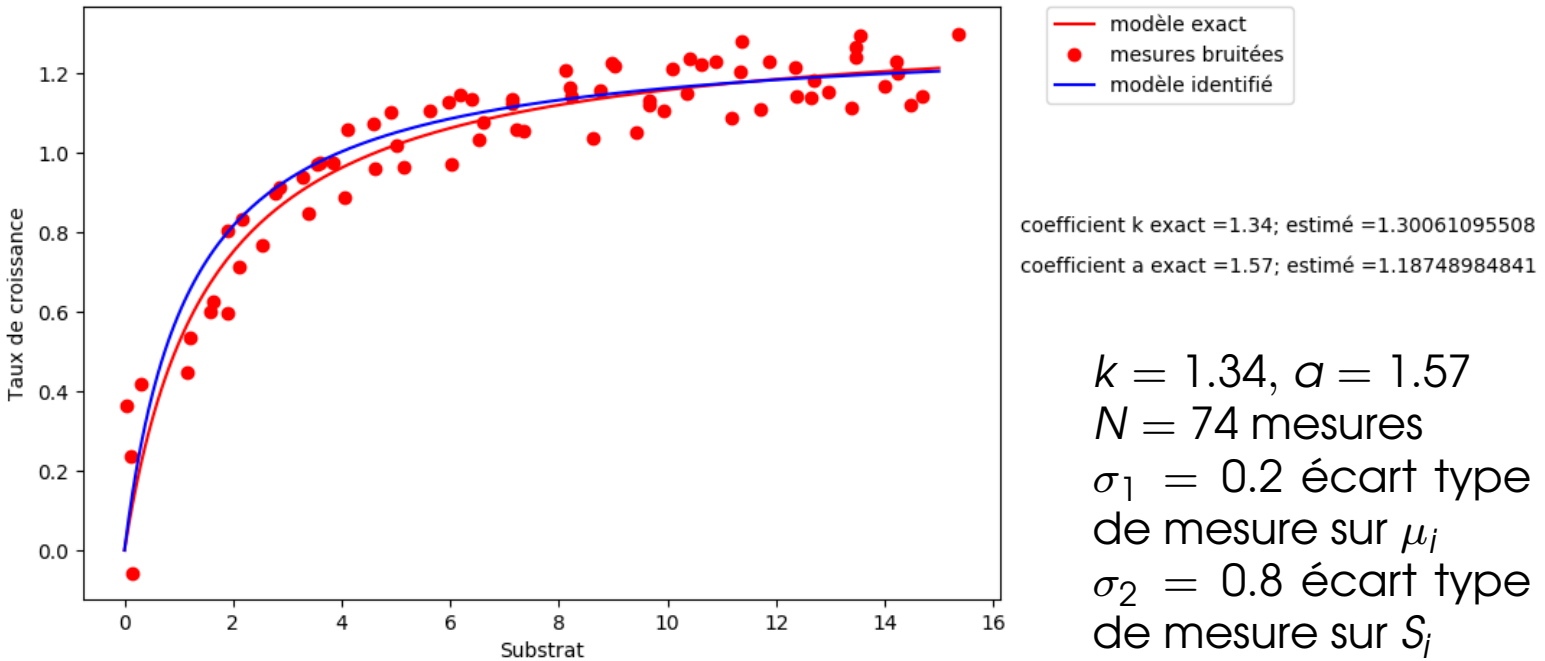
Problème: trouver les paramètres a et k de la fonction à partir de N mesures bruitées S_i et μ_i, $i = 1 : N$ de $S(t_i)$ et $\mu(S(t_i))$

Modèles de régression linéaire

Exemple: taux de croissance

Fonction de Monod: $\mu(S) = k\dfrac{S}{a+S}$

Problème: trouver les paramètres a et k de la fonction à partir de N mesures bruitées S_i et μ_i, $i = 1 : N$ de $S(t_i)$ et $\mu(S(t_i))$



coefficient k exact =1.34; estimé =1.30061095508

coefficient a exact =1.57; estimé =1.18748984841

$k = 1.34$, $a = 1.57$
$N = 74$ mesures
$\sigma_1 = 0.2$ écart type du bruit de mesure sur μ_i
$\sigma_2 = 0.8$ écart type du bruit de mesure sur S_i

Cas non linéaire
Algorithmes de minimisation

$$\hat{\theta} = \text{argmin}_{\theta \in \Omega} J(\theta)$$

La plupart du temps, J fonction non linéaire de θ

$\Rightarrow$ impossible de calculer analytiquement la solution

$\Rightarrow$ utilisation d'**algorithmes d'optimisation**

Cas non linéaire
Algorithmes de minimisation

$$\hat{\theta} = \text{argmin}_{\theta \in \Omega} J(\theta)$$

La plupart du temps, J fonction non linéaire de θ

$\Rightarrow$ impossible de calculer analytiquement la solution

$\Rightarrow$ utilisation d'**algorithmes d'optimisation**

Objectif des algorithmes: trouver le minimum (ou maximum) d'une fonction et la valeur en laquelle elle atteint cet extremum sur un domaine Ω donné

Cas non linéaire
Algorithmes de minimisation

$$\hat{\theta} = \text{argmin}_{\theta \in \Omega} J(\theta)$$

La plupart du temps, J fonction non linéaire de θ

$\Rightarrow$ impossible de calculer analytiquement la solution

$\Rightarrow$ utilisation d'**algorithmes d'optimisation**

Objectif des algorithmes: trouver le minimum (ou maximum) d'une fonction et la valeur en laquelle elle atteint cet extremum sur un domaine Ω donné

- algorithmes **itératifs**
- démarrent d'une **valeur initiale** donnée

Cas non linéaire
Algorithmes de minimisation

$$\hat{\theta} = \text{argmin}_{\theta \in \Omega} J(\theta)$$

La plupart du temps, J fonction non linéaire de θ

$\Rightarrow$ impossible de calculer analytiquement la solution

$\Rightarrow$ utilisation d'**algorithmes d'optimisation**

Objectif des algorithmes: trouver le minimum (ou maximum) d'une fonction et la valeur en laquelle elle atteint cet extremum sur un domaine Ω donné

- algorithmes **itératifs**
- démarrent d'une **valeur initiale** donnée

Valeur initiale = première estimation "grossière" des paramètres.

Minimum global ou local
Importance de la condition initiale

Existence de deux types de minimum

Pour tout $a \in \Omega$, $f(a)$ est un

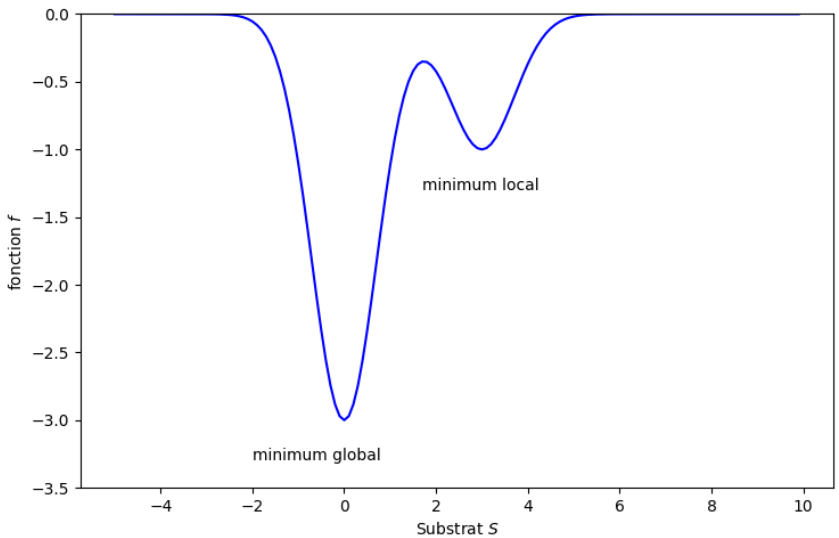
- **minimum global de** f si $f(a)$ est la plus petite valeur atteinte par f sur tout le domaine Ω
- **minimum local de** f si il existe un voisinage V de a tel que $f(a)$ est la plus petite valeur atteinte par f sur V

Minimum global ou local
Importance de la condition initiale

Existence de deux types de minimum

Pour tout $a \in \Omega$, $f(a)$ est un

- **minimum global de** f si $f(a)$ est la plus petite valeur atteinte par f sur tout le domaine Ω
- **minimum local de** f si il existe un voisinage V de a tel que $f(a)$ est la plus petite valeur atteinte par f sur V



exemple:

la fonction $f \mapsto -3e^{-x^2} - e^{-(x-3)^2}$ admet deux minimums locaux sur $[-5, 10]$ dont un est global

Minimum global ou local
Importance de la condition initiale

Existence de deux types de minimum

Pour tout $a \in \Omega$, $f(a)$ est un

- **minimum global de** f si $f(a)$ est la plus petite valeur atteinte par f sur tout le domaine Ω
- **minimum local de** f si il existe un voisinage V de a tel que $f(a)$ est la plus petite valeur atteinte par f sur V

Importance de **bien choisir la condition initiale** car les **algorithmes convergent généralement vers un minimum local**, souvent le plus proche de la condition initiale.

Méthode du gradient

Problème considéré

Algorithme du gradient aussi appelé **algorithme de plus forte pente** ou **de plus profonde descente** = un algorithme d'optimisation (minimisation ou maximisation) de fonction.

Méthode du gradient
Problème considéré

Algorithme du gradient aussi appelé **algorithme de plus forte pente** ou **de plus profonde descente** = un algorithme d'optimisation (minimisation ou maximisation) de fonction.

Problème considéré: minimisation d'une fonction $f : x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n \mapsto f(x) \in \mathbb{R}$ sur un domaine Ω:

$$\hat{x} = \text{argmin}_{x \in \Omega} f(x)$$

Notation: $\nabla f(x)$ = gradient de f en x:

$$\nabla f(x) = \begin{bmatrix} \partial_{x_1} f(x) \\ \vdots \\ \partial_{x_n} f(x) \end{bmatrix}$$

Méthode du gradient
Direction de descente

direction de descente = direction, donc vecteur $d \in \Omega \backslash \{0\}$ selon laquelle, au voisinage de x, la fonction f décroit.

Méthode du gradient
Direction de descente

direction de descente = direction, donc vecteur $d \in \Omega \backslash \{0\}$ selon laquelle, au voisinage de x, la fonction f décroit.

$\Rightarrow$ si on suit cette direction, on se rapproche d'un minimum

$\Rightarrow$ définie localement autour d'un point $x \in \Omega$

Méthode du gradient
Direction de descente

direction de descente = direction, donc vecteur $d \in \Omega \backslash \{0\}$ selon laquelle, au voisinage de x, la fonction f décroit.

$\Rightarrow$ si on suit cette direction, on se rapproche d'un minimum
$\Rightarrow$ définie localement autour d'un point $x \in \Omega$

Définition mathématique:
$d \in \Omega \backslash \{0\}$ est une **direction de descente** en x pour f si il existe un intervalle $[0, \alpha_0]$ tel que:

$$f(x + \alpha d) \leqslant f(x), \ \forall \alpha \in [0, \alpha_0]$$

d est une **direction de descente stricte** si l'inégalité est stricte ($<$ au lieu de $\leqslant$).

Méthode du gradient
Direction de descente

direction de descente = direction, donc vecteur $d \in \Omega \backslash \{0\}$ selon laquelle, au voisinage de x, la fonction f décroit.

$\Rightarrow$ si on suit cette direction, on se rapproche d'un minimum
$\Rightarrow$ définie localement autour d'un point $x \in \Omega$

Résultat mathématique

Si $\nabla f(x) \neq 0$, alors:

$d = -\nabla f(x)$ est une direction de descente stricte en x pour f.

avec une fonction f est la direction du gradient et d'autre direction de descente.

Méthode du gradient
Algorithme du gradient

Méthode du gradient
Algorithme du gradient

1. Choix des paramètres: nombre d'itérations maximal N, seuil de précision ϵ et valeur initiale x_0 pour x

Méthode du gradient
Algorithme du gradient

1. Choix des paramètres: nombre d'itérations maximal N, seuil de précision ϵ et valeur initiale x_0 pour x
2. Initialisation: $k = 0$ et calcul de $\nabla f(x_0)$

Méthode du gradient
Algorithme du gradient

1. Choix des paramètres: nombre d'itérations maximal N, seuil de précision ϵ et valeur initiale x_0 pour x
2. Initialisation: $k = 0$ et calcul de $\nabla f(x_0)$
3. Itérations: Tant que $k + 1 \leqslant N$ et $\|\nabla f(x_k)\| > \epsilon$ alors

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k - \alpha_k \nabla f(x_k) \\ k &= k + 1 \end{aligned}$$

où α_k peut être choisi selon différentes méthodes.

Méthode du gradient
Algorithme du gradient

1. Choix des paramètres: nombre d'itérations maximal N, seuil de précision ϵ et valeur initiale x_0 pour x
2. Initialisation: $k = 0$ et calcul de $\nabla f(x_0)$
3. Itérations: Tant que $k + 1 \leqslant N$ et $\|\nabla f(x_k)\| > \epsilon$ alors

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k - \alpha_k \nabla f(x_k) \\ k &= k + 1 \end{aligned}$$

   où α_k peut être choisi selon différentes méthodes.
4. Solution approchée $\hat{x} \simeq x_k$ et $\min_{x \in \Omega} f(x) \simeq f(x_k)$

Méthode du gradient
Algorithme du gradient

1. Choix des paramètres: nombre d'itérations maximal N, seuil de précision ϵ et valeur initiale x_0 pour x
2. Initialisation: $k = 0$ et calcul de $\nabla f(x_0)$
3. Itérations: Tant que $k + 1 \leqslant N$ et $\|\nabla f(x_k)\| > \epsilon$ alors

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k - \alpha_k \nabla f(x_k) \\ k &= k + 1 \end{aligned}$$

   où α_k peut être choisi selon différentes méthodes.
4. Solution approchée $\hat{x} \simeq x_k$ et $\min_{x \in \Omega} f(x) \simeq f(x_k)$

Deux choix de α_k classiques:

- α_k constante indépendante de $k \Rightarrow$ **gradient à pas fixe**
- α_k choisi pour minimiser $f(x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)) \Rightarrow$ **gradient à pas optimal**

Méthode du gradient
Exemple: taux de croissance

Fonction de Monod: $\mu(S) = k\dfrac{S}{a+S}$

Problème: trouver les paramètres a et k de la fonction à partir de N mesures bruitées S_i et μ_i, $i = 1 : N$ de $S(t_i)$ et $\mu(S(t_i))$

Méthode 1: résoudre le problème de moindres carrés:

$$(\hat{a}, \hat{k}) = \text{argmin}_{(a,k)\in\Omega} \sum_{i=1}^{N} \left(k\frac{S_i}{a+S_i} - \mu_i \right)^2 = \text{argmin}_{(a,k)\in\Omega} f(a,k)$$

Méthode du gradient
Exemple: taux de croissance

Fonction de Monod: $\mu(S) = k\dfrac{S}{a+S}$

Problème: trouver les paramètres a et k de la fonction à partir de N mesures bruitées S_i et μ_i, $i = 1 : N$ de $S(t_i)$ et $\mu(S(t_i))$

Méthode 1: résoudre le problème de moindres carrés:

$$(\hat{a}, \hat{k}) = \text{argmin}_{(a,k)\in\Omega} \sum_{i=1}^{N} \left(k\frac{S_i}{a+S_i} - \mu_i \right)^2 = \text{argmin}_{(a,k)\in\Omega} f(a,k)$$

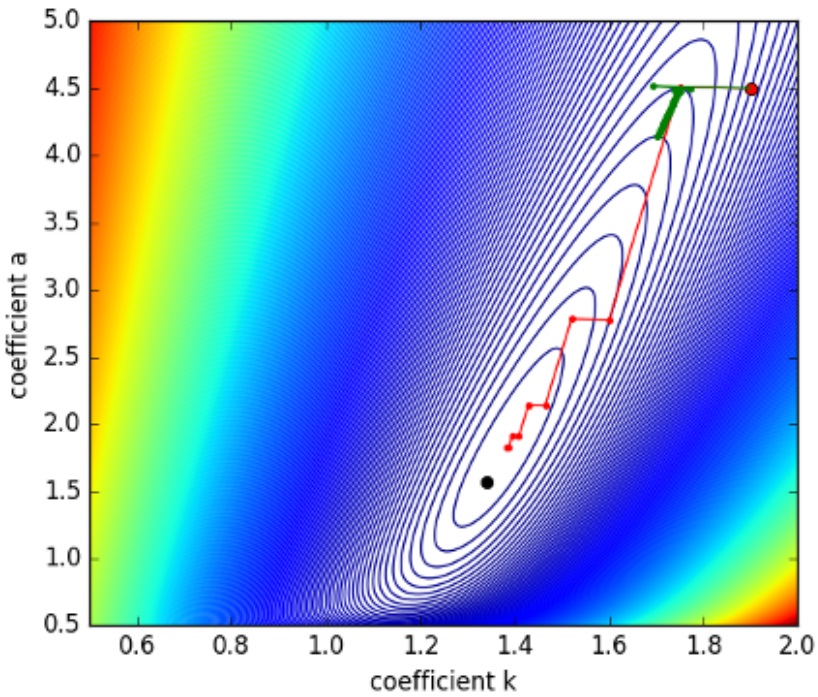
Le gradient de f:

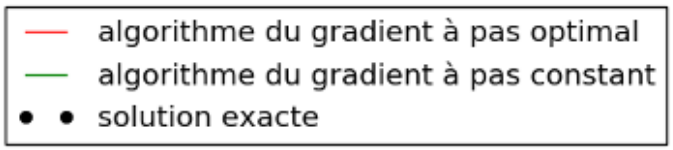
$$\nabla f(k,a) = \begin{bmatrix} \partial_k f(k,a) \\ \partial_a f(k,a) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2}{N}\sum_{i=1}^{N} \frac{S_i}{a+S_i}\left(k\frac{S_i}{a+S_i} - \mu_i\right) \\ -\frac{2}{N}\sum_{i=1}^{N} k\frac{S_i}{(a+S_i)^2}\left(k\frac{S_i}{a+S_i} - \mu_i\right) \end{bmatrix}$$

Méthode du gradient
Exemple: taux de croissance

Fonction de Monod: $\mu(S) = k\dfrac{S}{a+S}$

Problème: trouver les paramètres a et k de la fonction à partir de N mesures bruitées S_i et μ_i, $i = 1 : N$ de $S(t_i)$ et $\mu(S(t_i))$





** Gradient à pas optimal **
nombre d'itération =9
norme du gradient =0.000404466802641
coefficient k exact =1.34; estimé =1.38280601099
coefficient a exact =1.57; estimé =1.83032580136

Gradient à pas constant
nombre d'itération =35
norme du gradient =0.00550627319589
coefficient k exact =1.34; estimé =1.70307257574
coefficient a exact =1.57; estimé =4.13896118471

Méthode de Newton-Raphton
Problème considéré

Méthode de Newton-Raphton = algorithme destiné à trouver une approximation numérique d'un zéro (ou racine) d'une fonction f, c'est à dire la valeur de x telle que $f(x) = 0$.

Utilisation pour l'optimisation: pour un ensemble fermé Ω:

$$\hat{x} = \text{argmin}_{x \in \Omega} f(x) \Leftrightarrow f'(\hat{x}) = 0 \text{ OU } \hat{x} \in \partial\Omega$$

$\Rightarrow$ application de la méthode de Newton-Raphton à f'

Méthode de Newton-Raphton
Problème considéré

Méthode de Newton-Raphton = algorithme destiné à trouver une approximation numérique d'un zéro (ou racine) d'une fonction f, c'est à dire la valeur de x telle que $f(x) = 0$.

Utilisation pour l'optimisation: pour un ensemble fermé Ω:

$$\hat{x} = \text{argmin}_{x \in \Omega} f(x) \Leftrightarrow f'(\hat{x}) = 0 \text{ OU } \hat{x} \in \partial\Omega$$

$\Rightarrow$ application de la méthode de Newton-Raphton à f'

Problème considéré:
Trouver $\hat{x} \in \Omega$ tel que:

$$g(\hat{x}) = 0$$

Méthode de Newton-Raphton

Principe

Formule de Taylor à l'ordre 1 de g au voisinage de x_k:

$$g(x) = g(x_k) + g'(x_k)(x - x_k) + R_1(x)$$

où $R_1(x)$ est négligeable devant les autres termes.

Méthode de Newton-Raphton

Principe

Formule de Taylor à l'ordre 1 **de** g **au voisinage de** x_k:

$$g(x) = g(x_k) + g'(x_k)(x - x_k) + R_1(x)$$

où $R_1(x)$ est négligeable devant les autres termes.

Autrement dit: si x proche de x_k alors on néglige $R_1(x)$ et on a:

$$g(x) \simeq g(x_k) + g'(x_k)(x - x_k)$$

Méthode de Newton-Raphton

Principe

Formule de Taylor à l'ordre 1 **de** g **au voisinage de** x_k:

$$g(x) = g(x_k) + g'(x_k)(x - x_k) + R_1(x)$$

où $R_1(x)$ est négligeable devant les autres termes.

Autrement dit: si x proche de x_k alors on néglige $R_1(x)$ et on a:

$$g(x) \simeq g(x_k) + g'(x_k)(x - x_k)$$

Rappel:

$y = g(x_k) + g'(x_k)(x - x_k)$: équation de la tangente au graphe de g en x_k

Méthode de Newton-Raphton

Principe

Formule de Taylor à l'ordre 1 **de** g **au voisinage de** x_k:

$$g(x) = g(x_k) + g'(x_k)(x - x_k) + R_1(x)$$

où $R_1(x)$ est négligeable devant les autres termes.

Autrement dit: si x proche de x_k alors on néglige $R_1(x)$ et on a:

$$g(x) \simeq g(x_k) + g'(x_k)(x - x_k)$$

$$\Longleftrightarrow$$

"autour de x_k la courbe de g est à peu près égale à sa tangente"

Rappel:

$y = g(x_k) + g'(x_k)(x - x_k)$: équation de la tangente au graphe de g en x_k

Méthode de Newton-Raphton

Principe

Idée: Au lieu de chercher $x \in \Omega$ tel que:

$$g(x) = 0$$

on cherche $x \in \Omega$ tel que:

$$g(x_k) + g'(x_k)(x - x_k) = 0$$

Méthode de Newton-Raphton

Principe

Idée: Au lieu de chercher $x \in \Omega$ tel que:

$$g(x) = 0$$

on cherche $x \in \Omega$ tel que:

$$\begin{aligned} & g(x_k) + g'(x_k)(x - x_k) = 0 \\ \iff \quad & x = x_k - \frac{g(x_k)}{g'(x_k)} \end{aligned}$$

Méthode de Newton-Raphton

Principe

Idée: Au lieu de chercher $x \in \Omega$ tel que:

$$g(x) = 0$$

on cherche $x \in \Omega$ tel que:

$$\begin{aligned} & g(x_k) + g'(x_k)(x - x_k) = 0 \\ \Longleftrightarrow \quad & x = x_k - \frac{g(x_k)}{g'(x_k)} \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ nouvelle valeur de x supposée plus proche du zéro de f que x_k

Méthode de Newton-Raphton

Principe

Idée: Au lieu de chercher $x \in \Omega$ tel que:

$$g(x) = 0$$

on cherche $x \in \Omega$ tel que:

$$\begin{aligned} & g(x_k) + g'(x_k)(x - x_k) = 0 \\ \Longleftrightarrow \quad & x = x_k - \frac{g(x_k)}{g'(x_k)} \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ nouvelle valeur de x supposée plus proche du zéro de f que x_k

$\Rightarrow$ itération $x_{k+1} = x$

Méthode de Newton-Raphton

Principe

Idée: Au lieu de chercher $x \in \Omega$ tel que:

$$g(x) = 0$$

on cherche $x \in \Omega$ tel que:

$$\begin{aligned} & g(x_k) + g'(x_k)(x - x_k) = 0 \\ \Longleftrightarrow \quad & x = x_k - \frac{g(x_k)}{g'(x_k)} \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ nouvelle valeur de x supposée plus proche du zéro de f que x_k

$\Rightarrow$ itération $x_{k+1} = x$

$\Rightarrow$ convergence vers le zéro le plus proche

Méthode de Newton-Raphton
Algorithme

Méthode de Newton-Raphton
Algorithme

1. Choix des paramètres: nombre d'itérations maximal N, seuil de précision ϵ et valeur initiale x_0 pour x

Méthode de Newton-Raphton
Algorithme

1. Choix des paramètres: nombre d'itérations maximal N, seuil de précision ϵ et valeur initiale x_0 pour x
2. Initialisation: $k = 0$ et calcul de $f(x_0)$

Méthode de Newton-Raphton
Algorithme

1. Choix des paramètres: nombre d'itérations maximal N, seuil de précision ϵ et valeur initiale x_0 pour x
2. Initialisation: $k = 0$ et calcul de $f(x_0)$
3. Itérations: Tant que $k + 1 \leqslant N$ et $f(x_k) > \epsilon$ alors

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \\ k &= k + 1 \end{aligned}$$

Méthode de Newton-Raphton
Algorithme

1. Choix des paramètres: nombre d'itérations maximal N, seuil de précision ϵ et valeur initiale x_0 pour x
2. Initialisation: $k = 0$ et calcul de $f(x_0)$
3. Itérations: Tant que $k + 1 \leqslant N$ et $f(x_k) > \epsilon$ alors

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \\ k &= k + 1 \end{aligned}$$

4. Solution approchée $\hat{x} \simeq x_k$

Méthode de Newton-Raphton

Exemple: points d'équilibre

Modèle de croissance d'une biomasse B sur un substrat S dans un réacteur batch:

$$\begin{cases} \frac{dB}{dt} = (\mu(S) - \frac{Q}{V})B \\ \frac{dS}{dt} = -k\mu(S)B + \frac{Q}{V}(S_0 - S) \end{cases}$$

Méthode de Newton-Raphton

Exemple: points d'équilibre

Modèle de croissance d'une biomasse B sur un substrat S dans un réacteur batch:

$$\begin{cases} \frac{dB}{dt} = (\mu(S) - \frac{Q}{V})B \\ \frac{dS}{dt} = -k\mu(S)B + \frac{Q}{V}(S_0 - S) \end{cases}$$

Point d'équilibre non nul = solution de l'équation $\mu(S) = \frac{Q}{V}$
= zéro de la fonction $g : S \mapsto \mu(S) - \frac{Q}{V}$

Méthode de Newton-Raphton

Exemple: points d'équilibre

Modèle de croissance d'une biomasse B sur un substrat S dans un réacteur batch:

$$\begin{cases} \frac{dB}{dt} = (\mu(S) - \frac{Q}{V})B \\ \frac{dS}{dt} = -k\mu(S)B + \frac{Q}{V}(S_0 - S) \end{cases}$$

Point d'équilibre non nul = solution de l'équation $\mu(S) = \frac{Q}{V}$
= zéro de la fonction $g : S \mapsto \mu(S) - \frac{Q}{V}$

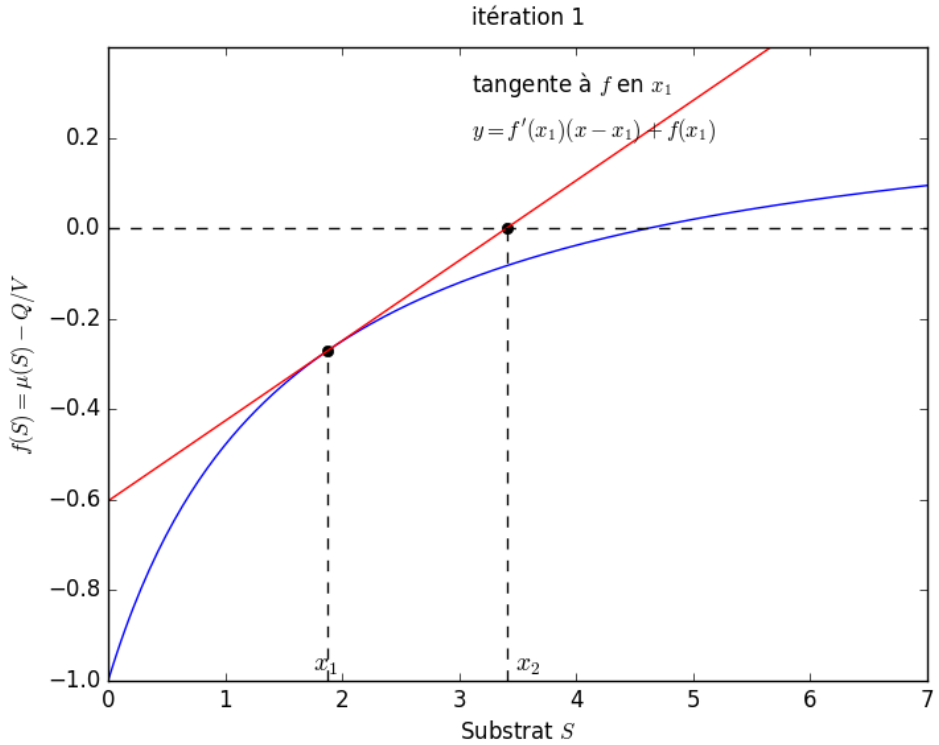
$\Rightarrow$ **application de l'agorithme de Newton-Raphton à** g

Méthode de Newton-Raphton

Exemple: points d'équilibre

Modèle de croissance d'une biomasse B sur un substrat S dans un réacteur batch:

$$\begin{cases} \frac{dB}{dt} = (\mu(S) - \frac{Q}{V})B \\ \frac{dS}{dt} = -k\mu(S)B + \frac{Q}{V}(S_0 - S) \end{cases}$$

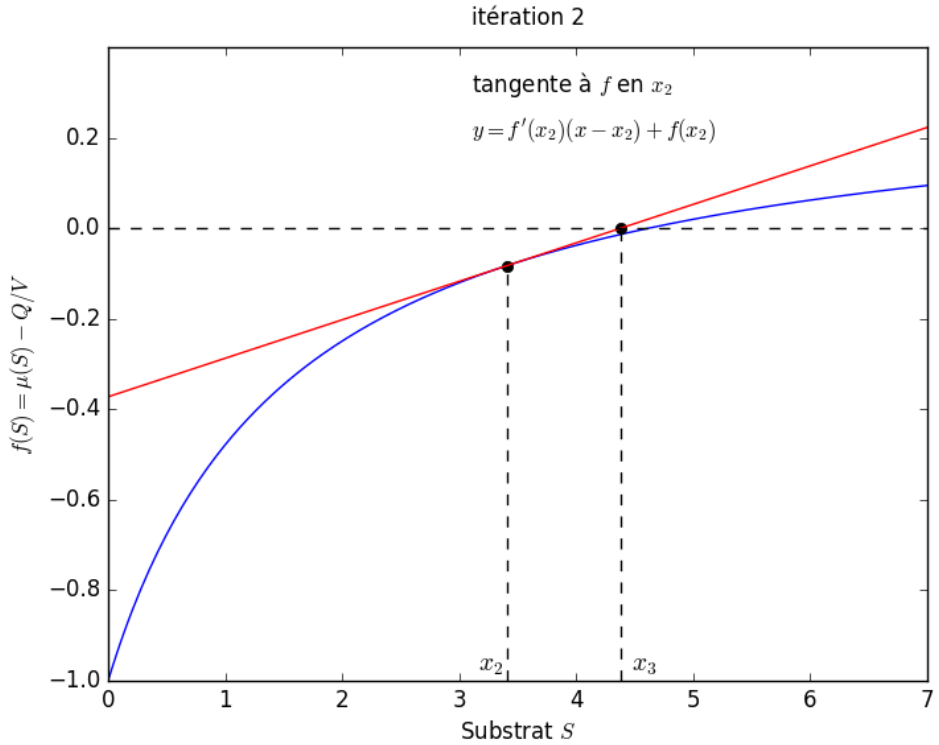


Méthode de Newton-Raphton

Exemple: points d'équilibre

Modèle de croissance d'une biomasse B sur un substrat S dans un réacteur batch:

$$\begin{cases} \frac{dB}{dt} = (\mu(S) - \frac{Q}{V})B \\ \frac{dS}{dt} = -k\mu(S)B + \frac{Q}{V}(S_0 - S) \end{cases}$$

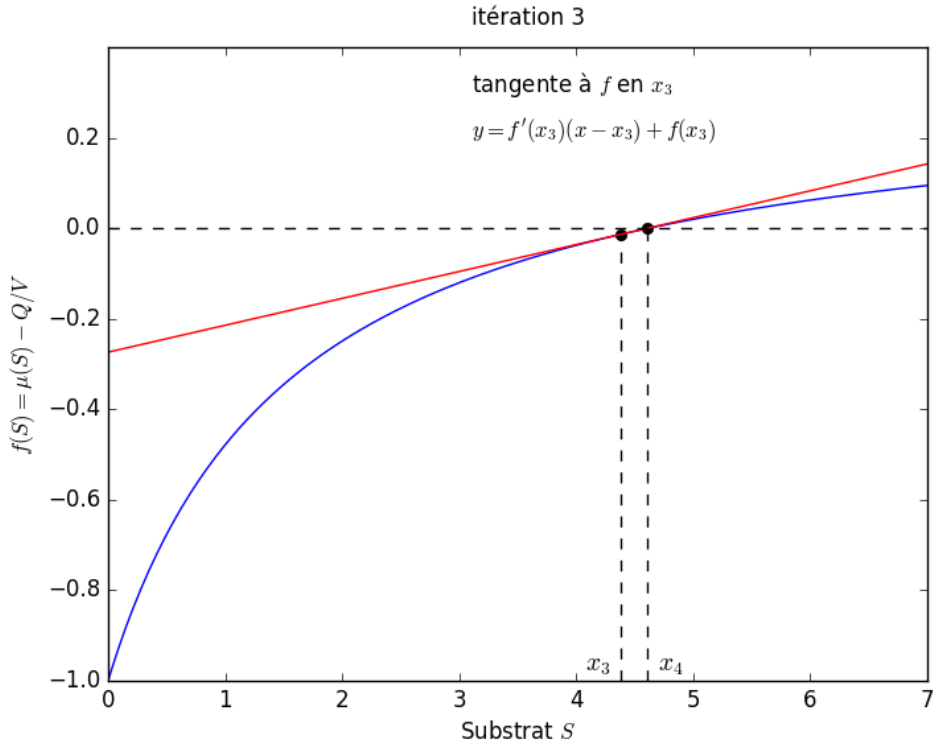


Méthode de Newton-Raphton

Exemple: points d'équilibre

Modèle de croissance d'une biomasse B sur un substrat S dans un réacteur batch:

$$\begin{cases} \frac{dB}{dt} = (\mu(S) - \frac{Q}{V})B \\ \frac{dS}{dt} = -k\mu(S)B + \frac{Q}{V}(S_0 - S) \end{cases}$$

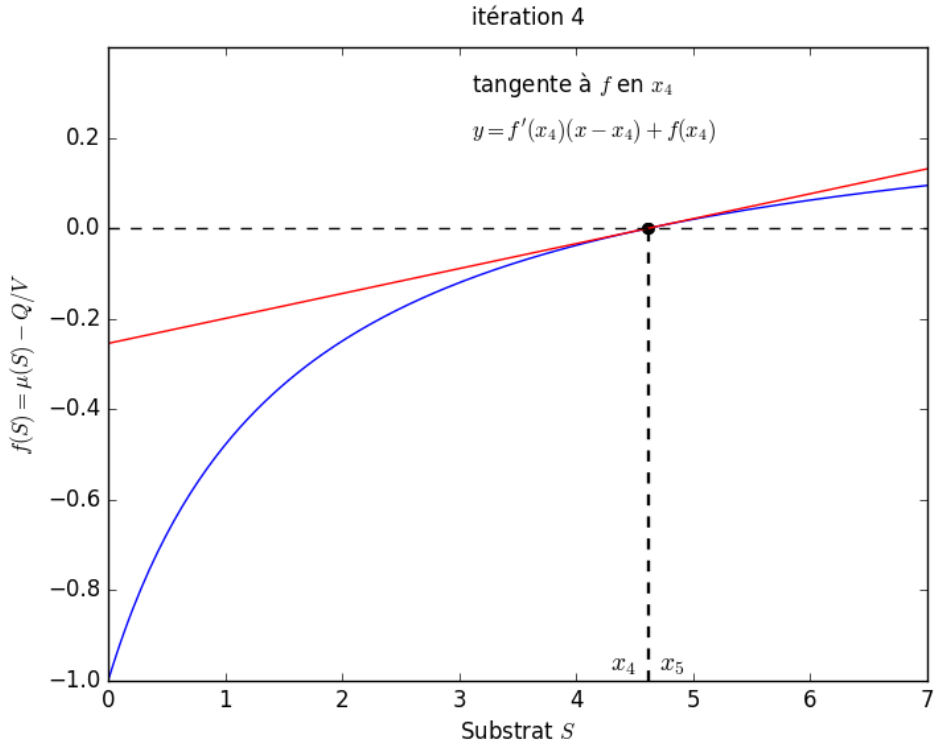


Méthode de Newton-Raphton

Exemple: points d'équilibre

Modèle de croissance d'une biomasse B sur un substrat S dans un réacteur batch:

$$\begin{cases} \frac{dB}{dt} = (\mu(S) - \frac{Q}{V})B \\ \frac{dS}{dt} = -k\mu(S)B + \frac{Q}{V}(S_0 - S) \end{cases}$$

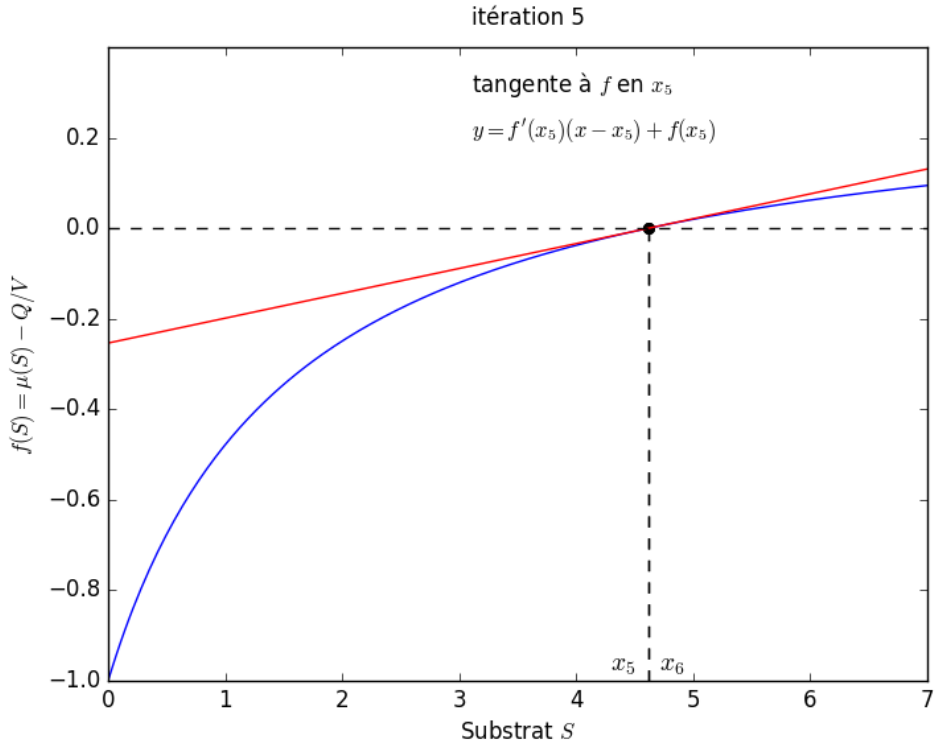


Méthode de Newton-Raphton

Exemple: points d'équilibre

Modèle de croissance d'une biomasse B sur un substrat S dans un réacteur batch:

$$\begin{cases} \frac{dB}{dt} = (\mu(S) - \frac{Q}{V})B \\ \frac{dS}{dt} = -k\mu(S)B + \frac{Q}{V}(S_0 - S) \end{cases}$$

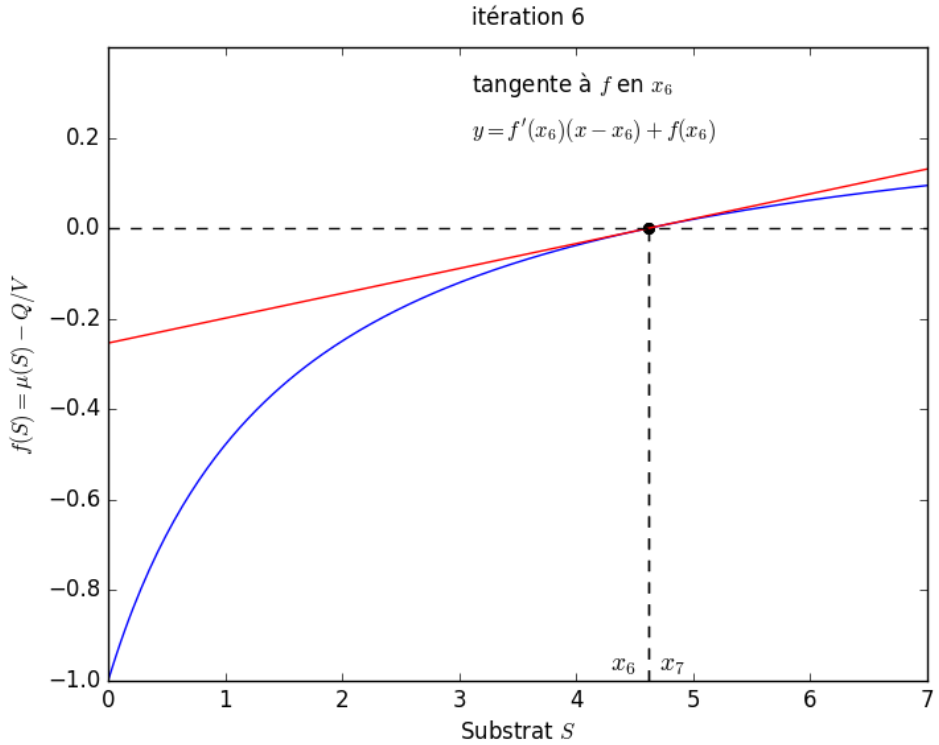


Méthode de Newton-Raphton

Exemple: points d'équilibre

Modèle de croissance d'une biomasse B sur un substrat S dans un réacteur batch:

$$\begin{cases} \frac{dB}{dt} = (\mu(S) - \frac{Q}{V})B \\ \frac{dS}{dt} = -k\mu(S)B + \frac{Q}{V}(S_0 - S) \end{cases}$$

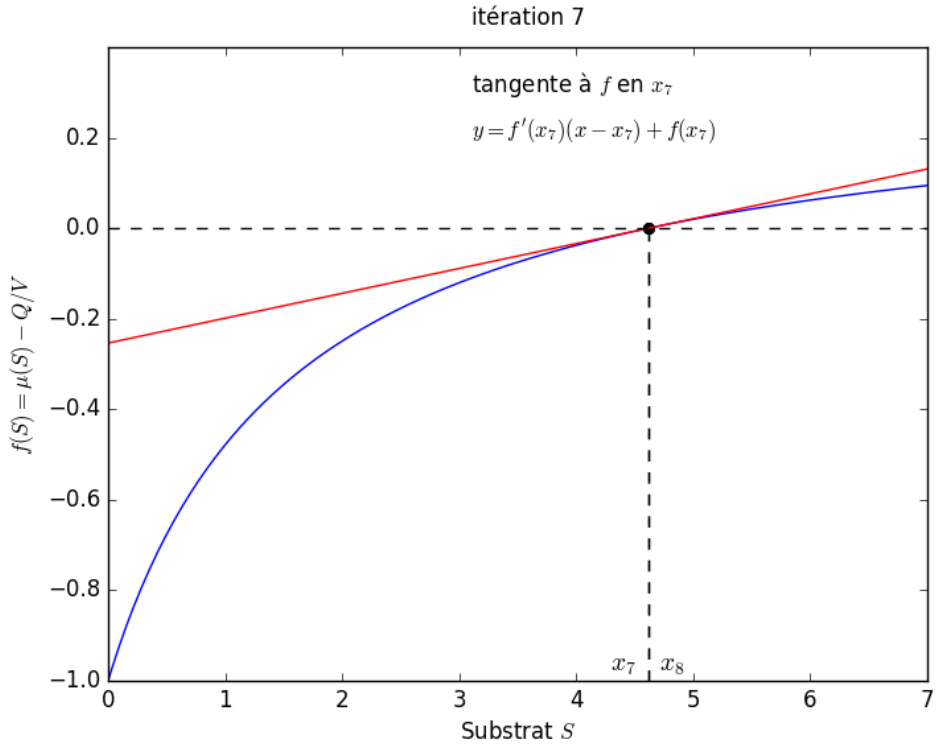


Méthode de Newton-Raphton

Exemple: points d'équilibre

Modèle de croissance d'une biomasse B sur un substrat S dans un réacteur batch:

$$\begin{cases} \frac{dB}{dt} = (\mu(S) - \frac{Q}{V})B \\ \frac{dS}{dt} = -k\mu(S)B + \frac{Q}{V}(S_0 - S) \end{cases}$$

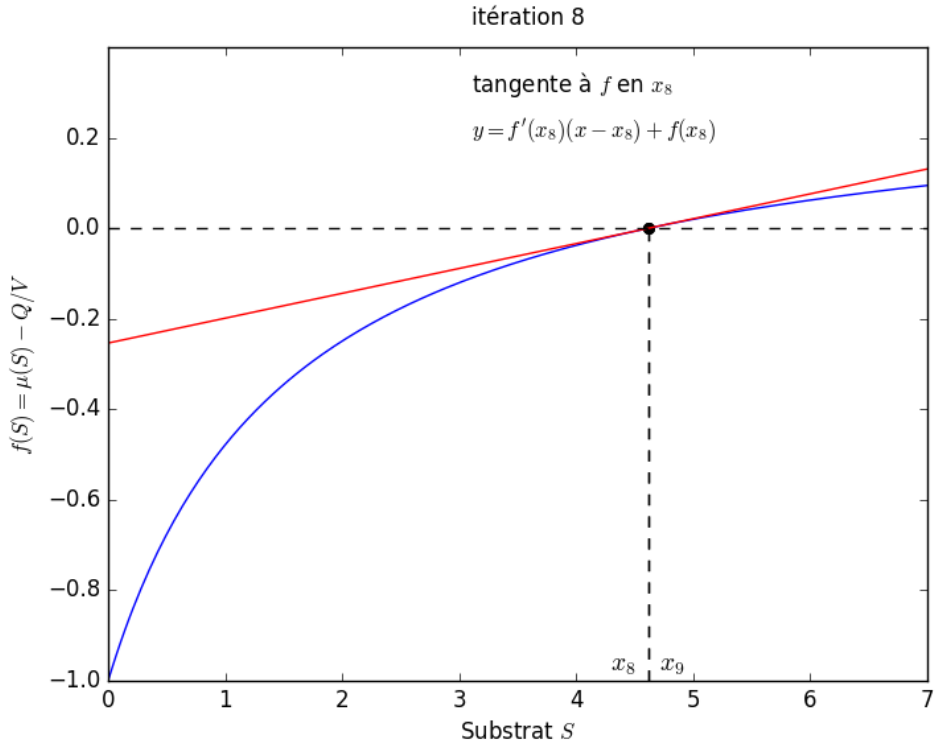


Méthode de Newton-Raphton

Exemple: points d'équilibre

Modèle de croissance d'une biomasse B sur un substrat S dans un réacteur batch:

$$\begin{cases} \frac{dB}{dt} = (\mu(S) - \frac{Q}{V})B \\ \frac{dS}{dt} = -k\mu(S)B + \frac{Q}{V}(S_0 - S) \end{cases}$$



Quelques remarques pour finir

- **Quels paramètres doit on identifier?**:

  Analyse de sensibilité pour quantifier l'impact de la variation des paramètres sur les sorties du modèle.

  $\Rightarrow$ réduction du nombre de paramètres à identifier: on identifie que les plus importants

- **Fonctions pré-codées**: en python/scilab/R/etc.