

Chapitre VI

Problèmes inverses et estimation de paramètres

Par Samuel Soubeyrand et Lionel Roques

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à la détermination et à l'estimation de coefficients spatialement hétérogènes de modèles de réaction-diffusion, tels que ceux étudiés dans les précédents chapitres, à partir d'observations des solutions de ces modèles. Nous distinguons volontairement la *détermination* de l'*estimation* d'un coefficient. Dans ce qui suit, nous dirons qu'un coefficient est déterminé par l'observation si c'est l'unique coefficient pouvant conduire à l'observation. L'estimation d'un coefficient consiste en la recherche effective, à partir de l'observation, du coefficient le plus vraisemblable.

Dans la première partie de ce chapitre (Section 1), nous présentons la notion de *problème inverse* et nous donnons un résultat de détermination d'un coefficient hétérogène dans une équation de réaction-diffusion du type Fisher-KPP. La détermination de ce coefficient repose sur l'utilisation d'observations idéales, c'est-à-dire non bruitées.

Dans la deuxième partie de ce chapitre (Section 2), nous présentons des approches dites "mécanistico-statistiques". Ces approches combinent un modèle statistique pour le processus d'observation avec un modèle d'EDO ou d'EDP pour le processus dynamique envisagé. Elles permettent d'estimer les coefficients de ces modèles à partir de données incertaines et partielles.

1 Détermination de coefficients à partir de données exactes

Nous nous intéressons à des équations de réaction-diffusion du même type que celles considérées dans les Chapitres III et IV, posées cette fois sur un intervalle borné $]a, b[$ de \mathbb{R} , et avec un terme de réaction hétérogène du type Fisher-KPP :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u(r(x) - \gamma(x)u), \quad t \geq 0, \quad x \in]a, b[, \\ \alpha u(t, a) - \beta \frac{\partial u}{\partial x}(t, a) = 0, \quad t \geq 0, \\ \alpha u(t, b) + \beta \frac{\partial u}{\partial x}(t, b) = 0, \quad t \geq 0, \\ u(0, x) = u_0(x) > 0, \quad x \in]a, b[. \end{array} \right. \quad (\mathcal{P}_r)$$

Comme dans le Chapitre III, nous supposons que le coefficient de diffusion $D > 0$ est constant, que le taux de croissance intrinsèque $r(x)$ et le terme de compétition $\gamma(x)$ sont des fonctions lipschitziennes sur $[a, b]$ et que $\gamma(x) > 0$ sur $[a, b]$. Nous supposons que

$$(\alpha = 1 \text{ et } \beta = 0) \text{ ou } (\alpha = 0 \text{ et } \beta = 1).$$

Le premier cas correspond à une condition de Dirichlet et le second à une condition de Neumann. La condition initiale est supposée régulière (dans $C^{2,\eta}([a, b])$) et vérifie les conditions de compatibilité du Théorème 4 du Chapitre III.

Comme nous l'avons vu dans les Chapitres III et IV, le comportement de la solution de cette équation dépend de la forme précise des coefficients. L'utilisation de cette équation à des fins de modélisation nécessite donc une connaissance précise de ses coefficients. En pratique, les coefficients correspondent aux effets croisés de plusieurs facteurs, et peuvent rarement être observés. Ils sont généralement estimés en utilisant des observations de la solution $u(t, x)$.

Nous nous intéressons ici à la détermination du taux de croissance intrinsèque $r(x)$. Nous supposons que les autres coefficients D et $\gamma(x)$ et que la donnée initiale sont connus. Nous l'avons vu dans le Chapitre III, à D fixé, le coefficient $r(x)$ contrôle la persistance ou l'extinction de la population modélisée par le système (\mathcal{P}_r) . Si $u(t, x)$ est observé en tout temps $t \geq 0$ et en tout point x de $[a, b]$, il est aisé de déterminer $r(x)$. En pratique, l'observation \mathcal{U} de $u(t, x)$ est généralement effectuée sur un sous-domaine de $[0, \infty[\times [a, b]$. Avec une telle observation se pose la question de l'unicité du coefficient $r(x)$ pouvant conduire à l'observation \mathcal{U} . Cette question correspond à un problème inverse.

Remarque 8 La notion de problème inverse Soit \mathcal{P}_θ une famille d'EDP paramétrées par θ (une constante, une fonction, un vecteur de fonctions...). Si, pour chaque valeur du paramètre θ , le problème direct \mathcal{P}_θ est bien posé, alors il existe une unique solution $u_\theta(t, x)$ ($t \geq 0, x \in \Omega$). Etant donnée une fonction $v(t, x)$ définie sur un sous-ensemble Q de $[0, \infty[\times \Omega$, le problème inverse consiste à trouver θ tel que $u_\theta(t, x) = v(t, x)$ dans Q . Se pose alors la question de l'existence d'un tel paramètre θ et de son unicité. Dans cette section, nous considérons le cas où la fonction v correspond à une observation de la solution u_θ . L'existence d'une solution au problème inverse est alors évidente. Reste à démontrer l'unicité de la solution du problème inverse, en tâchant d'utiliser un ensemble d'observation Q aussi réduit que possible.

Observation. Nous supposons que la solution u de (\mathcal{P}_r) ainsi que sa dérivée spatiale sont observées en un certain point $x_0 \in]a, b[$ et pendant un certain intervalle de temps $[0, \varepsilon[$. Ainsi, l'ensemble des observations est de la forme :

$$\mathcal{U}[u] = \{u(t, x_0), \partial u / \partial x(t, x_0), t \in [0, \varepsilon[\}. \quad (\text{VI.1})$$

Pour deux fonctions u et \tilde{u} , nous dirons que $\mathcal{U}[u] = \mathcal{U}[\tilde{u}]$ si et seulement si $u(t, x_0) = \tilde{u}(t, x_0)$ et $\partial u / \partial x(t, x_0) = \partial \tilde{u} / \partial x(t, x_0)$ pour tout $t \in [0, \varepsilon[$. Nous allons voir par la suite que, sous certaines hypothèses sur le coefficient $r(x)$, l'observation $\mathcal{U}[u]$ est suffisante pour déterminer $r(x)$ sur tout l'intervalle $[a, b]$. Dans le cas d'une condition de Neumann ($\alpha = 0$ et $\beta = 1$) et si $u_0 > 0$ sur $[a, b]$, on peut également supposer que $x_0 = a$ ou $x_0 = b$.

Hypothèses complémentaires. Nous supposons que le taux de croissance intrinsèque $r(x)$ appartient à l'espace \mathcal{M} défini par :

$$\mathcal{M} := \{ \psi \text{ lipschitz. sur } [a, b] \mid \psi \text{ est analytique par morceaux dans }]a, b[\}, \quad (\text{VI.2})$$

Une fonction ψ est dite analytique par morceaux s'il existe $m > 0$ et une suite croissante $(\kappa_j)_{1 \leq j \leq m}$ telle que $\kappa_1 = a$, $\kappa_m = b$, et

$$\text{pour tout } x \in]a, b[, \quad \psi(x) = \sum_{j=1}^{m-1} \mathbb{1}_{[\kappa_j, \kappa_{j+1}[}(x) \varphi_j(x),$$

pour des fonctions analytiques φ_j , définies sur les intervalles $[\kappa_j, \kappa_{j+1}]$, et où $\mathbb{1}_{[\kappa_j, \kappa_{j+1}[}$ désignent les fonctions caractéristiques des intervalles $[\kappa_j, \kappa_{j+1}[$ pour $j = 1, \dots, m-1$.

Remarque 9 Notons que l'hypothèse de régularité $r_k \in \mathcal{M}$ n'est pas très restrictive. L'espace \mathcal{M} contient par exemple l'ensemble des fonctions affines par morceaux. Dans la preuve du Théorème 24, l'hypothèse $r, \tilde{r} \in \mathcal{M}$ permet d'éviter que l'ensemble des zéros de $r - \tilde{r}$ n'admette de points d'accumulation.

Résultats. Le résultat suivant démontre que l'observation $\mathcal{U}[u]$ permet de déterminer de façon unique le coefficient $r(x)$.

Théorème 24 Soit $\tilde{r} \in \mathcal{M}$ et \tilde{u} la solution de $(\mathcal{P}_{\tilde{r}})$. Supposons que $\mathcal{U}[u] = \mathcal{U}[\tilde{u}]$. Alors $r \equiv \tilde{r}$ sur $[a, b]$.

Un corollaire immédiat du Théorème 24 montre que, pour tout sous-domaine $\omega \subset]a, b[$ de mesure non nulle, il existe un unique coefficient $r \in \mathcal{M}$ associé à une observation de la solution u du problème (\mathcal{P}_r) sur $[0, \varepsilon[\times \omega$ (sans observation de la dérivée spatiale). Ainsi, l'information contenue dans la solution u sur un sous-ensemble aussi petit que l'on veut est suffisante pour déterminer de façon unique le coefficient $r(x)$ dans tout le domaine $]a, b[$. Notons que si $r(x)$ est déterminé dans $]a, b[$, alors par unicité de la solution du problème direct (\mathcal{P}_r) , u est également déterminé de façon unique, pour tout $t \geq 0$ et $x \in [a, b]$. Bien que ce résultat suppose que la donnée initiale $u_0(x)$ soit connue sur $[a, b]$, il paraît important de souligner que la donnée initiale ne contient aucune information sur le coefficient à déterminer.

Preuve du Théorème 24. La preuve de ce résultat est essentiellement basée sur une utilisation astucieuse du principe de comparaison et du lemme de Hopf parabolique. L'hypothèse d'analyticité par morceaux (voir Remarque 9) intervient également de façon cruciale.

Commençons par poser $U := u - \tilde{u}$ et $m(x) = r(x) - \tilde{r}(x)$. La fonction U vérifie une équation linéaire :

$$\frac{\partial U}{\partial t} - D \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + c(t, x) U = m(x) u, \quad t \geq 0, \quad x \in]a, b[, \quad (\text{VI.3})$$

où $c(t, x)$ est une fonction continue en t et lipschitzienne en x sur $\mathbb{R}_+ \times [a, b]$. La fonction U est quant à elle dans $C_1^2(\mathbb{R}_+ \times [a, b])$ (voir la Section 2.3 du

Chapitre III) et vérifie $U(0, x) \equiv 0$ sur $[a, b]$ et, comme $\mathcal{U}[u] = \mathcal{U}[\tilde{u}]$, on a :

$$U(t, x_0) = 0, \quad t \in [0, \varepsilon[, \quad (\text{VI.4})$$

et

$$\frac{\partial U}{\partial x}(t, x_0) = 0, \quad t \in [0, \varepsilon[. \quad (\text{VI.5})$$

La condition (VI.4) implique que $\frac{\partial U}{\partial t}(t, x_0) = 0$ pour tout $t \in [0, \varepsilon[$. En se plaçant en $x = x_0$ et en passant à la limite $t \rightarrow 0$ dans l'équation (VI.3), nous obtenons donc que $m(x_0)u_0(x_0) = 0$. L'hypothèse faite sur u_0 implique que $m(x_0) = 0$. Montrons maintenant cette égalité en tout point $x \in [a, b]$. A cette fin, nous définissons

$$b_1 := \sup\{x \in [x_0, b] \mid m \text{ a un signe constant sur } [x_0, x]\}.$$

Par "signe constant", nous entendons que $m \geq 0$ sur $[x_0, x]$ ou $m \leq 0$ sur $[x_0, x]$. Ainsi, quatre alternatives se présentent :

- (i) $m = 0$ sur $[x_0, b_1]$ et $b_1 < b$;
- (ii) $m \geq 0$ sur $[x_0, b_1]$ et il existe $x_1 \in]x_0, b_1[$ tel que $m(x_1) > 0$;
- (iii) $m \leq 0$ sur $[x_0, b_1]$ et il existe $x_1 \in]x_0, b_1[$ tel que $m(x_1) < 0$;
- (iv) $m = 0$ sur $[x_0, b_1]$ et $b_1 = b$.

Nous allons démontrer que les alternatives (i), (ii) et (iii) conduisent à une contradiction.

Supposons que (i) est vérifiée. Rappelons que r et \tilde{r} sont dans l'ensemble \mathcal{M} des fonctions analytiques par morceaux. La différence $m = r - \tilde{r}$ est donc également dans \mathcal{M} . Par définition de b_1 , il existe une suite décroissante $y_k \rightarrow b_1$, $y_k > b_1$, telle que $|m(y_k)| > 0$ pour tout $k \geq 0$. Supposons qu'il existe k_0 tel que $|m(x)| > 0$ pour tout $x \in]b_1, y_{k_0}[$. Dans ce cas $m(x)$ a un signe constant sur $[x_0, y_{k_0}]$, ce qui contredit la définition de b_1 . Ainsi,

$$\text{pour tout } k, \text{ il existe } z_k \in]b_1, y_k[\text{ tel que } m(z_k) = 0, \quad (\text{VI.6})$$

ce qui contredit l'hypothèse $m \in \mathcal{M}$, l'ensemble $\{x \in]a, b[\mid m(x) = 0\}$ ne pouvant avoir qu'un nombre fini de composantes connexes. L'alternative (i) peut donc être rejetée.

Supposons maintenant que (ii) est vérifiée. En se plaçant en $x = x_1$ et en passant à la limite $t \rightarrow 0$ dans l'équation (VI.3), nous obtenons

$$\partial U / \partial t(0, x_1) = m(x_1)u_0(x_1) > 0.$$

Ainsi, pour $\varepsilon_1 > 0$ assez petit, $U(t, x_1) > 0$ pour tout $t \in]0, \varepsilon_1[$. Comme u_0 est supposée strictement positive dans $]a, b[$ ($[a, b]$ dans le cas Neumann), la

continuité de u implique que $u(t, x) > 0$ dans $]0, \varepsilon_1[\times]x_0, x_1[$ (pour $\varepsilon_1 > 0$ assez petit). Avec l'hypothèse (ii), nous avons donc $m(x)u(t, x) \geq 0$ dans $]0, \varepsilon_1[\times]x_0, x_1[$. Par conséquent, U vérifie le problème :

$$\begin{cases} \frac{\partial U}{\partial t} - D \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + c(t, x)U \geq 0, & t \in]0, \varepsilon_1[, \quad x \in]x_0, x_1[, \\ U(t, x_0) = 0 \text{ et } U(t, x_1) > 0, & t \in]0, \varepsilon_1[, \\ U(0, x) = 0, & x \in]x_0, x_1[. \end{cases} \quad (\text{VI.7})$$

Le Théorème 3 du Chapitre III, avec $\underline{u} = 0$ et $\bar{u} = U$ implique que $U > 0$ ou $U \equiv 0$ dans $]0, \varepsilon_1[\times]x_0, x_1[$. La condition au bord $U(t, x_1) > 0$ et la continuité de U impliquent que $U \not\equiv 0$. Ainsi, on a $U(t, x) > 0$ pour tout $t \in]0, \varepsilon_1[$ et $x \in]x_0, x_1[$. Appliquons maintenant le lemme de Hopf parabolique (Théorème 7, Chapitre III) à U en x_0 . Nous obtenons que nécessairement

$$\frac{\partial U}{\partial x}(t, x_0) > 0, \quad t \in]0, \varepsilon_1[.$$

Cette dernière inégalité contredit l'égalité (VI.5). L'alternative (ii) peut donc également être rejetée. L'alternative (iii) se traite de la même façon, en remplaçant U par $-U$.

La seule alternative possible est donc la (iv), qui implique que $m \equiv 0$ sur $]x_0, b]$. En posant

$$a_1 := \inf\{x \in [a, x_0] \mid m \text{ a un signe constant sur } [x, x_0]\},$$

le même raisonnement que ci-dessus montre que $a_1 = a$ et $m \equiv 0$ sur $[a, x_0]$. Finalement, $m \equiv 0$ sur $[a, b]$, ce qui prouve que $r \equiv \tilde{r}$ sur $[a, b]$. □

Il semble difficile d'obtenir un tel résultat de détermination du coefficient $r(x)$ à partir d'un ensemble d'observation plus petit que celui utilisé ici. Ainsi, le coefficient $r(x)$ n'est en général pas uniquement déterminé par la seule observation de $u(t, x_0)$ si la dérivée spatiale $\partial u / \partial x(t, x_0)$ n'est pas connue. Nous avons en effet le contre-exemple suivant.

Proposition 3 *Supposons que u_0 est symétrique par rapport au point $x = (a + b)/2$. Soit $r \in \mathcal{M}$ et \tilde{r} défini par $\tilde{r}(x) = r(b - (x - a))$ pour $x \in [a, b]$.*

Alors les solutions u et \tilde{u} de (\mathcal{P}_r) et $(\mathcal{P}_{\tilde{r}})$ coïncident en $x_0 = \frac{a + b}{2}$ pour tout $t \geq 0$.

Preuve de la Proposition 3. Nous pouvons observer que $\tilde{u}(t, b - (x - a))$ est une solution de (\mathcal{P}_r) . Ainsi, par unicité de la solution au problème (\mathcal{P}_r) (voir

Section 2.3 du Chapitre II), nous avons :

$$u(t, x) = \tilde{u}(t, b - (x - a)), \text{ pour tout } t \geq 0 \text{ et } x \in [a, b].$$

Ainsi, $u\left(t, \frac{a+b}{2}\right) = \tilde{u}\left(t, \frac{a+b}{2}\right)$ pour tout $t \geq 0$.

□

2 Estimation des coefficients d'EDO et EDP à partir d'observations bruitées

Les résultats de détermination de coefficients de la section précédente sont obtenus dans un cadre où les observations sont exactes. Bien que ces observations soient censurées en espace (*i.e.*, effectuées sur un sous-domaine du domaine d'étude), ce cadre peut être qualifié d'idéal. En pratique, comme nous le verrons dans les deux exemples traités dans cette section, les données collectées sont souvent incertaines et le processus observé peut être différent de la solution du modèle dont on cherche à estimer les coefficients. L'approche mécanistico-statistique, présentée dans les sections qui suivent, permet de répondre à ces difficultés.

2.1 La modélisation et la statistique

La statistique permet d'inférer les composantes inconnues des modèles stochastiques. Le caractère stochastique du modèle peut être dû au modèle de la dynamique et/ou au modèle du processus d'observation. Dans les cas qui nous intéressent ici, le modèle dynamique est un modèle d'EDO ou d'EDP. Il n'est donc pas stochastique. En revanche, le processus d'observation est stochastique (les observations sont bruitées). Ainsi, le modèle résultant, qui intègre la dynamique et l'observation, est stochastique.

L'approche de modélisation qui est adoptée ici est parfois appelée modélisation physico-statistique ou mécanistico-statistique : il s'agit d'adosser un modèle du processus d'observation à un modèle mécaniste du phénomène étudié. Dans cette approche, le modèle concilie (i) une vision mécaniste du phénomène étudié et (ii) des données représentant ce phénomène. En statistique, on appelle ce type de modèle un modèle à espace d'état.

Dans un cadre général, les inconnues des modèles mécanistico-statistiques, notées θ , sont des paramètres ou des fonctions qui interviennent dans l'écriture du modèle, noté \mathcal{P}_θ , et qui sont supposées être dans un espace Θ qui ne se réduit pas à un unique point. De manière informelle, inférer les inconnues du modèle à partir de données consiste à évaluer sous quels $\theta_0 \in \Theta$ ont été possiblement obtenues les données sachant que le modèle qui les a générées est contenu dans la classe $\{\mathcal{P}_\theta : \theta \in \Theta\}$.

2.2 L'estimation bayésienne des inconnues

L'approche bayésienne pour l'estimation de paramètres consiste :

- à considérer que les paramètres inconnus sont des variables aléatoires ;
- à spécifier une distribution *a priori* (avant l'observation des données) pour ces paramètres à l'aide de la connaissance d'experts ;
- et à calculer la distribution *a posteriori* des paramètres qui combine l'information *a priori* et l'information apportée par les données.

La distribution *a posteriori* des paramètres peut ensuite être utilisée pour donner des estimations ponctuelles des paramètres (ex. : mode *a posteriori*, médiane *a posteriori*), pour donner des intervalles de crédibilité, pour faire des tests de dépassement de seuil et pour donner tout autre résumé statistique caractérisant les paramètres.

Pour les besoins de ce chapitre, nous devons montrer comment les paramètres d'un modèle non linéaire généralisé peuvent être estimés *via* l'approche bayésienne.

Définition 8 *Un modèle non linéaire généralisé relie une variable réponse $Y \in \mathbb{R}$ à un vecteur de variables explicatives $X \in \mathbb{R}^d$ ($d \in \mathbb{N}$) de la manière suivante :*

$$Y | X \sim \mathcal{L}\{\eta(X, \beta), \tau\},$$

où $\mathcal{L}(\mu, \tau)$ est une loi de la famille exponentielle paramétrée par un paramètre de position $\mu \in \mathbb{R}$ et par un paramètre complémentaire $\tau \in \mathbb{R}_+$ (ex. : un paramètre de forme ou un paramètre de sur-dispersion), et $\eta : (X, \beta) \mapsto \eta(X, \beta)$ est une fonction non linéaire en les composantes du vecteur de paramètres $\beta \in \mathbb{R}^d$.

La notation $Y | X$, qui se lit “Y sachant X”, sert à indiquer que l'on s'intéresse à la distribution de Y conditionnellement à la valeur de X . Ainsi, l'expression mathématique $Y | X \sim \mathcal{L}\{\eta(X, \beta), \tau\}$ signifie “Y sachant X suit une loi \mathcal{L} paramétrée par $\eta(X, \beta)$ et τ ”.

La famille des lois exponentielles inclut la plupart des lois usuelles comportant un ou deux paramètres : en particulier les lois exponentielle, gaussienne, gaussienne inverse, Gamma, Poisson, binomiale et beta-binomiale.

L'objectif est ici d'inférer le vecteur de paramètres $\theta = (\beta, \tau)$ à partir d'observations répétées et indépendantes de (X, Y) , c'est-à-dire à partir d'un échantillon $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \{(x_i, y_i) : i = 1, \dots, I\}$ (dans toute la Section 2, on utilise des lettres capitales pour désigner les variables aléatoires, et des lettres minuscules pour désigner des réalisations de ces variables aléatoires). Dans l'approche bayésienne, inférer le vecteur de paramètres θ revient à calculer la distribution $\theta | (\mathbf{x}, \mathbf{y})$ du vecteur de paramètres sachant les données (\mathbf{x}, \mathbf{y}) .

Notons $\pi : \mathbb{R}^{d+1} \rightarrow \mathbb{R}_+$, $\theta \mapsto \pi(\theta)$ la distribution jointe *a priori* des paramètres. Notons $f : y \mapsto f(y; \mu, \tau)$ la distribution associée à la loi $\mathcal{L}(\mu, \tau)$ paramétrée par μ et τ ; f est une densité de probabilité si le support de \mathcal{L} est continu et

une distribution de probabilité si le support de \mathcal{L} est discret. La distribution conditionnelle $p(\mathbf{y} \mid \theta, \mathbf{x})$ des données \mathbf{y} sachant les paramètres et les variables explicatives \mathbf{x} coïncide avec la vraisemblance du modèle et vérifie :

$$p(\mathbf{y} \mid \theta, \mathbf{x}) = \prod_{i=1}^I f\{y_i; \eta(x_i, \beta), \tau\}.$$

L'écriture de la vraisemblance sous la forme d'un produit est possible car les réponses y_i , conditionnellement aux x_i , sont supposées indépendantes.

Proposition 4 *En supposant que les variables explicatives \mathbf{x} seules n'apportent pas d'information sur les paramètres θ , la distribution a posteriori de θ vérifie l'expression suivante pour le modèle non linéaire généralisé :*

$$\begin{aligned} p(\theta \mid \mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \frac{p(\mathbf{y} \mid \theta, \mathbf{x})\pi(\theta)}{p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})} \\ &= \frac{\left(\prod_{i=1}^I f\{y_i; \eta(x_i, \beta), \tau\} \right) \pi(\theta)}{\int_{\mathbb{R}^{d+1}} \left(\prod_{i=1}^I f\{y_i; \eta(x_i, \beta'), \tau'\} \right) d\pi\{(\beta', \tau')\}}, \end{aligned}$$

où l'intégrale au dénominateur est une intégrale par rapport à la distribution a priori des paramètres.

Cette proposition est directement obtenue en appliquant le théorème de Bayes.

La possibilité de calculer la distribution *a posteriori* jointe des paramètres permet notamment de donner des estimations ponctuelles des paramètres (ex. : modes *a posteriori* et médianes *a posteriori*) et des indicateurs de l'incertitude de l'estimation (ex. : intervalles ou ellipsoïdes de crédibilité, écarts-types *a posteriori*).

Pour des modèles complexes, il n'est pas possible de calculer de manière explicite la distribution *a posteriori*. Cependant, il existe des méthodes numériques permettant de générer un échantillon issu de la distribution *a posteriori* des paramètres (ex. : le rééchantillonnage d'importance et les chaînes de Markov Monte Carlo). L'échantillon obtenu peut ensuite être facilement utilisé pour finement évaluer les caractéristiques de cette distribution : la distribution *a posteriori* elle-même (densité ou fonction de répartition) peut être estimée en tout point de l'espace des paramètres (avec des estimateurs à noyaux par exemple), les moments, quantiles, ou toute autre statistique de cette distribution peuvent être eux aussi estimés (ex. : l'espérance peut être estimée par la moyenne empirique). En pratique, la qualité de ces estimations dépend de la taille effective de l'échantillon et des estimateurs utilisés.

En outre, connaître la distribution *a posteriori* des paramètres permet d'obtenir les distributions *a posteriori* de la variable réponse Y et du paramètre de

position $\eta(X, \beta)$, quel que soit X , observé ou non observé. Ces distributions *a posteriori* peuvent être utilisées pour faire de la prédiction dans le temps ou dans l'espace si X contient le temps d'observation de Y ou la position où Y a été observée.

2.3 Application au modèle logistique

Modèle mécaniste. Considérons une population dont la dynamique temporelle suit le modèle logistique d'EDO présenté dans la Section 1.2 du Chapitre I. Ainsi, la taille $N(t)$ de la population évolue du fait de deux types d'événements : les naissances et les morts, la mortalité augmentant avec la taille de la population. La taille $N(t)$ est régie par l'EDO suivante :

$$N'(t) = rN \left(1 - \frac{N}{K} \right), \quad t \geq 0,$$

où $r > 0$ est le taux de croissance intrinsèque de la population et $K > 0$ est la capacité d'accueil du milieu. Comme nous l'avons vu dans le Chapitre I, cette EDO, avec une donnée initiale $N(0) = N_0$, admet une solution analytique :

$$N(t) = \frac{KN_0 e^{rt}}{K + N_0(e^{rt} - 1)}, \quad \text{pour } t \geq 0.$$

Modèle du processus d'observation. Aux temps $t_1, \dots, t_I > 0$, des recensements de la population ont été opérés. Ces recensements fournissent des évaluations y_1, \dots, y_I des tailles $N(t_1), \dots, N(t_I)$ de la population, évaluations entachées d'erreur. Les erreurs sont supposées être indépendantes, sans biais, et de variance augmentant avec la taille de la population. Plus formellement, y_1, \dots, y_I sont des réalisations de lois Gamma indépendantes d'espérances $N(t_1), \dots, N(t_I)$ et de variances qui sont proportionnelles à $N(t_1), \dots, N(t_I)$:

$$Y_i \mid N(t_i) \sim \text{Gamma} \left(\frac{N(t_i)}{\tau}, \tau \right), \quad \forall i \in \{1, \dots, I\},$$

où Y_i désigne la variable aléatoire tandis que y_i désigne une réalisation de Y_i , et τ est la constante de proportionnalité qui détermine les variances des mesures du recensement. Les arguments de la loi $\text{Gamma}(a, b)$ sont le paramètre de forme $a > 0$ et le paramètre d'échelle $b > 0$. Sa densité de probabilité est, pour $z \geq 0$, $g(z) = (b^a \Gamma(a))^{-1} z^{a-1} e^{-z/b}$, où Γ est la fonction Gamma d'Euler, définie par :

$$\Gamma(x) = \int_0^{+\infty} e^{-t} t^{x-1} dt, \quad x > 0.$$

Si $Z \sim \text{Gamma}(a, b)$, alors l'espérance de la variable aléatoire Z vaut $E(Z) = ab$ et sa variance vaut $\text{Var}(Z) = ab^2$.

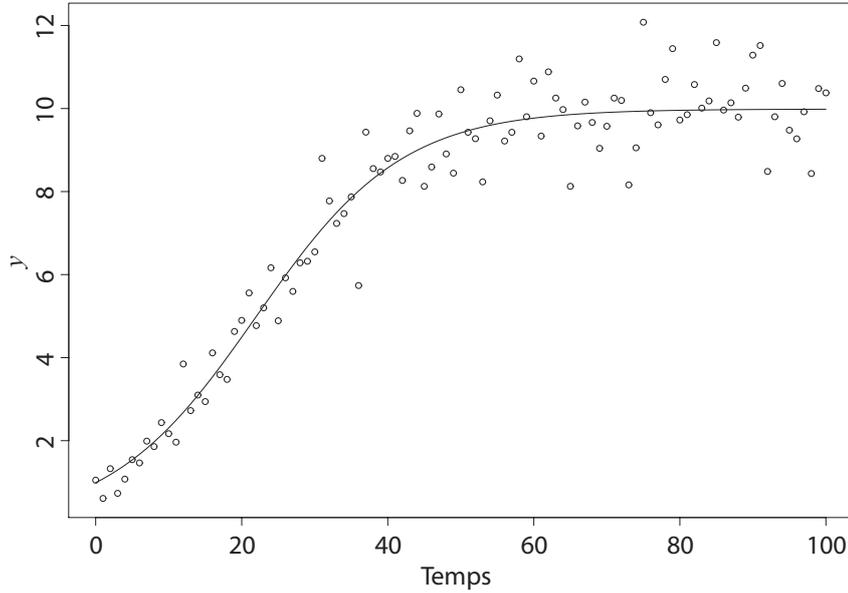


Figure VI.1. Solution (ligne) et observation bruitée (points) du modèle logistique avec $(N_0, r, K, \tau) = (1, 0.1, 10, 0.1)$.

La Fig. VI.1 présente une simulation du modèle aux temps de mesure $0, 1, 2, \dots, 100$, avec $(N_0, r, K, \tau) = (1, 0.1, 10, 0.1)$.

Estimation. Plaçons-nous dans le cadre du modèle non linéaire généralisé décrit en Section 2.2 :

- les variables réponses sont les mesures de recensement y_1, \dots, y_I ;
- les variables explicatives correspondent aux temps de recensement :
 $x_1 = t_1, \dots, x_I = t_I$;
- la loi \mathcal{L} est la loi Gamma ;
- la fonction η vérifie :

$$\eta(t, \beta) = N(t) = \frac{KN_0 e^{rt}}{K + N_0(e^{rt} - 1)},$$

où $\beta = (N_0, r, K)$;

- le paramètre complémentaire τ correspond à la constante de proportionnalité qui détermine les variances des mesures du recensement.

Ainsi, pour tout $i \in \{1, \dots, I\}$,

$$Y_i | t_i \sim \text{Gamma} \left(\frac{\eta(t_i, \beta)}{\tau}, \tau \right) = \text{Gamma} \left(\frac{KN_0 e^{rt_i}}{\tau \{K + N_0(e^{rt_i} - 1)\}}, \tau \right).$$

La vraisemblance du modèle est donc :

$$p(\mathbf{y} | \theta, \mathbf{t}) = \prod_{i=1}^I \frac{1}{y_i} \left(\frac{y_i}{\tau}\right)^{\eta(t_i, \beta)/\tau} \Gamma\left(\frac{\eta(t_i, \beta)}{\tau}\right)^{-1} e^{-y_i/\tau},$$

où $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_I)$, $\mathbf{t} = (t_1, \dots, t_I)$ et $\theta = (\beta, \tau) = (N_0, r, K, \tau)$.

Spécifions la distribution *a priori* suivante : N_0 , r , K et τ sont, *a priori*, indépendants et distribués sous les lois suivantes :

$$N_0 \sim \text{exponentielle}(1),$$

$$r \sim \text{exponentielle}(1),$$

$$K \sim \text{uniforme}(0, 15),$$

$$\tau \sim \text{exponentielle}(1),$$

où une variable Z qui suit une loi exponentielle de paramètre $\zeta > 0$ a pour densité de probabilité

$$f(z; \zeta) = (1/\zeta) \exp(-z/\zeta), \quad z \in [0, +\infty[,$$

et une variable J qui suit une loi uniforme entre j_{min} et j_{max} ($j_{min} < j_{max}$) a pour densité de probabilité $j \mapsto 1/(j_{max} - j_{min})$ sur le support $[j_{min}, j_{max}]$. Ainsi, la densité *a priori* jointe des paramètres est :

$$\begin{aligned} \pi(\theta) &= \pi(N_0, r, K, \tau) \\ &= \exp(-N_0 - r - \tau) \mathbb{1}(N_0 > 0, r > 0, \tau > 0) \frac{\mathbb{1}(0 < K \leq 15)}{15}, \end{aligned}$$

où $\mathbb{1}(\cdot)$ est la fonction indicatrice (ici, $\mathbb{1}(e) = 1$ si l'événement e est vrai, $\mathbb{1}(e) = 0$ sinon).

La distribution *a posteriori* des paramètres

$$p(\theta | \mathbf{y}, \mathbf{t}) = p(\mathbf{y} | \theta, \mathbf{t}) \pi(\theta) / p(\mathbf{y} | \mathbf{t})$$

ne correspond pas à une distribution connue. Par conséquent, nous devons appliquer une méthode numérique permettant de générer un échantillon approximativement distribué selon la distribution *a posteriori*. Nous avons appliqué la méthode du rééchantillonnage d'importance avec 10^7 particules et nous avons utilisé des lois uniformes sur $(0, 2]$, $(0, 0.5]$, $(0, 15]$ et $(0, 0.5]$ pour les lois de proposition des paramètres N_0 , r , K et τ . L'algorithme d'estimation est décrit dans le paragraphe qui suit. Le Tableau VI.1 donne les résultats d'estimation obtenus pour la simulation présentée sur la Fig. VI.1 (médianes *a posteriori* et intervalles de crédibilité à 95 %). Dans ce cas, chaque valeur vraie est dans l'intervalle de crédibilité marginal associé.

Algorithme du rééchantillonnage d'importance. Les trois étapes de cet algorithme sont les suivantes :

Tableau VI.1. Estimations des paramètres du modèle logistique.

Paramètre	N_0	r	K	τ
Vraie valeur	1.00	0.100	10.0	0.100
Médiane <i>a posteriori</i>	0.94	0.104	10.0	0.079
2.5 %-quantile <i>a posteriori</i>	0.80	0.093	9.8	0.060
97.5 %-quantile <i>a posteriori</i>	1.10	0.113	10.3	0.109

- génération d'un échantillon $\{\theta^{(m)} : m = 1, \dots, M\}$ ($M = 10^7$) sous la loi de proposition de densité de probabilité g (produit de lois uniformes sur $(0, 2]$, $(0, 0.5]$, $(0, 15]$ et $(0, 0.5]$);
- calcul des poids d'importance \tilde{w}_m :

$$w_m = \frac{p(\theta^{(m)} | \mathbf{y}, \mathbf{x})}{g(\theta^{(m)})}, \quad (\text{VI.8})$$

$$\tilde{w}_m = \frac{w_m}{\sum_{k=1}^M w_k}; \quad (\text{VI.9})$$

- génération de l'échantillon final, celui qui suit approximativement la loi *a posteriori* des paramètres, obtenu en tirant avec remise $M' = 10^4$ valeurs dans l'échantillon $\{\theta^{(m)} : m = 1, \dots, M\}$ où $\theta^{(m)}$ a la probabilité de tirage \tilde{w}_m .

Du fait de l'opération (VI.9) servant à obtenir un vecteur de probabilités dont la somme vaut 1, les quantités w_m données par l'équation (VI.8) peuvent être calculées à une constante multiplicative près. Par conséquent, il est inutile, pour appliquer le rééchantillonnage d'importance, de calculer le dénominateur $p(\mathbf{y}|\mathbf{t})$ de la loi *a posteriori* $p(\theta | \mathbf{y}, \mathbf{t}) = p(\mathbf{y} | \theta, \mathbf{t})p(\theta)/p(\mathbf{y} | \mathbf{t})$ (le calcul de $p(\mathbf{y} | \mathbf{t})$ est un calcul d'intégrale multiple).

2.4 Application à un modèle de réaction-diffusion

Modèle mécaniste. Considérons une population dont la dynamique spatio-temporelle est modélisée par l'équation de réaction-diffusion de Fisher-KPP, introduite dans la Section 2 du Chapitre III et largement étudiée dans le Chapitre IV ainsi que dans la première section du présent chapitre :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u + u(r(x) - \gamma u), & t \geq 0, x \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, \\ \frac{\partial u}{\partial \nu}(t, x) = 0, & t \geq 0, x \in \partial\Omega, \\ u(0, x) = u_0(x) \geq 0, & x \in \Omega. \end{cases} \quad (\text{VI.10})$$

Nous nous intéressons au cas où D et γ sont positifs et constants alors que le taux de croissance intrinsèque $r(x)$ varie dans l'espace. L'espace Ω est un

disque de rayon $\sqrt{2}/2$, au bord duquel nous supposons des conditions réfléchissantes de Neumann, comme l'indique le système (VI.10). Nous considérons une situation où cet espace est constitué d'une mosaïque de quatre types d'habitats différents (par exemple forêts, plaines, surfaces agricoles, routes), chaque habitat étant quasiment homogène et ayant une structure spatiale connue. Nous supposons ainsi que les quatre habitats sont associés à des valeurs r_1, r_2, r_3 et r_4 du taux de croissance intrinsèque, comme illustré sur la Fig. VI.2. Rappelons que les régions où le taux de croissance intrinsèque est grand correspondent aux régions favorables, alors que les régions où le taux de croissance intrinsèque est faible sont moins favorables, voire défavorables quand $r_i < 0$. Afin de respecter les hypothèses de régularité du Chapitre III, qui permettent d'obtenir l'existence et l'unicité d'une solution classique $u \in C_1^2(\mathbb{R}_+ \times \Omega)$ de (VI.10), le taux de croissance intrinsèque est calculé par régularisation de la fonction $R(x)$ définie sur \mathbb{R}^2 par :

$$R(x) = \sum_{k=1}^4 r_k \mathbb{1}_{\{x \in \text{région } k\}}.$$

Ainsi, nous considérons un noyau de régularisation $\phi(x) = \frac{1}{2\pi S} e^{-\frac{|x|^2}{2S}}$, avec S petit ($S = 10^{-4}$), et nous définissons

$$r(x) = \int_{\mathbb{R}^2} \phi(x-y) R(y) dy, \quad x \in \Omega.$$

Dans ce cas, $r \in C^\infty(\bar{\Omega})$ est donc en particulier lipschitzienne. Le paramètre S du noyau de régularisation ϕ étant petit, la fonction r est très proche de la fonction constante par morceaux R , mais décrit une transition régulière du taux de croissance intrinsèque entre les différentes régions. La régularisation est une opération relativement naturelle puisqu'elle revient à supposer qu'il n'y a pas un changement abrupt entre deux habitats, mais au contraire une transition progressive, la vitesse de transition étant régie par S . La donnée initiale u_0 est supposée constante et connue : $u_0 \equiv 0.1$ dans Ω .

Nous avons simulé le modèle (VI.10) durant la période de temps $t \in [0, 4]$ avec les valeurs suivantes des paramètres :

$$\theta = (D, \gamma, r_1, r_2, r_3, r_4) = (0.05, 1, 4, 2, 0, -4).$$

La Fig. VI.3 montre l'état du modèle simulé à deux temps différents.

Modèle du processus d'observation. En pratique, on observe rarement la densité de population u , mais plutôt une fonction (aléatoire) de la densité de population. Cette fonction correspond par exemple à un impact local de la population sur l'environnement (ex. : pour une population pathogène, l'impact peut être un nombre d'hôtes infectés).

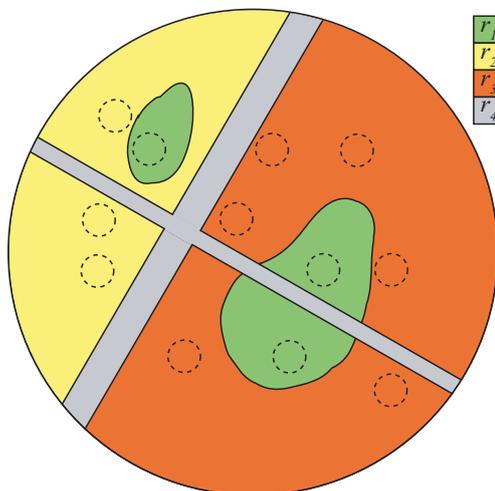


Figure VI.2. Partition du domaine spatial Ω (disque de rayon $\sqrt{2}/2$) sur lequel est définie l'équation de réaction-diffusion (VI.10). Dans chaque région, le coefficient $R(x)$ est constant. Les cercles dessinés avec des tirets correspondent aux régions d'observation ω_i .

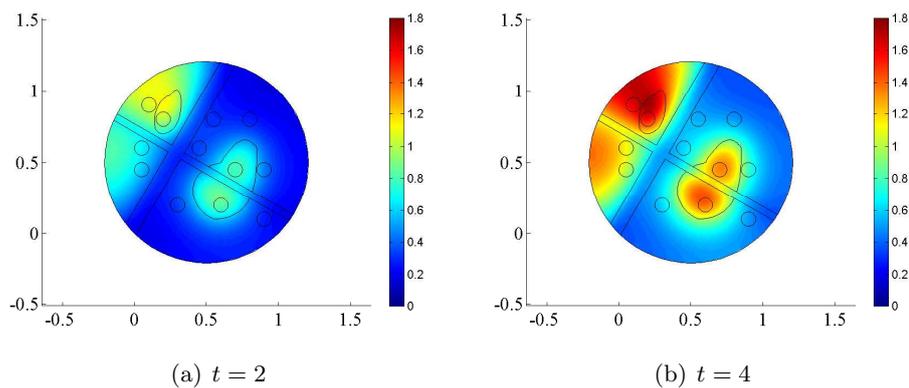


Figure VI.3. Solution du modèle (VI.10) aux temps $t = 2$ et $t = 4$ avec $\theta = (D, \gamma, r_1, r_2, r_3, r_4) = (0.05, 1, 4, 2, 0, -4)$.

Ici, nous supposons que l'impact est mesuré aux temps t_1, \dots, t_I dans les sous-domaines $\omega_1, \dots, \omega_I$ représentés sur la Fig. VI.2. Les mesures d'impact sont notées y_1, \dots, y_I et sont supposées être des réalisations de variables aléatoires poissonniennes Y_1, \dots, Y_I indépendantes. Nous faisons l'hypothèse qu'en espérance, la mesure d'impact Y_i est proportionnelle à la taille de la population dans le sous-domaine ω_i multipliée par un coefficient $\alpha > 0$ (supposé connu) mesurant l'impact moyen (ex. : nombre d'hôtes attaqués) d'une unité de population. Ainsi,

$$Y_i \mid t_i, \omega_i, u \sim \text{Poisson} \left(\alpha \int_{\omega_i} u(t_i, x) dx \right).$$

Pour que l'indépendance des Y_i soit satisfaite, l'intersection des domaines spatiaux ω_i ($i = 1, \dots, I$) doit être vide. Une variable Z qui suit une loi de Poisson de paramètre $a > 0$ ne peut prendre que les valeurs entières positives et, pour tout entier positif z , la probabilité que $Z = z$ est

$$P(Z = z) = \exp(-a)a^z/(z!).$$

La Fig. VI.4 présente les mesures d'impact en fonction des densités locales de population. Les mesures d'impact ont été obtenues avec le paramètre $\alpha = 10^4$. Ces mesures ont été réalisées dans 12 domaines d'observations différents (voir Fig. VI.2) à 10 temps différents (0.4, 0.8, ..., 4). Ainsi au total on dispose de $I = 120$ mesures d'impact.

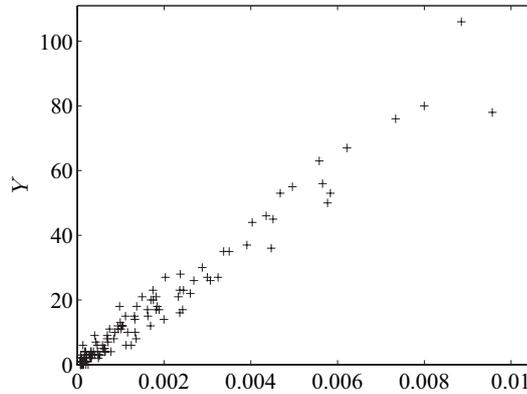


Figure VI.4. En abscisse : taille de la population dans le sous-domaine ω_i au temps t_i : $\int_{\omega_i} u(t_i, x) dx$, pour $i = 1, \dots, 120$. En ordonnée, mesure d'impact Y_i correspondante.

Estimation. Plaçons-nous dans le cadre du modèle non linéaire généralisé décrit en Section 2.2 :

- les variables réponses sont les mesures d'impact y_1, \dots, y_I ;
- les variables explicatives correspondent aux temps et domaines des mesures :
 $x_1 = (t_1, \omega_1), \dots, x_I = (t_I, \omega_I)$;
- la loi \mathcal{L} est la loi de Poisson ;
- la fonction η vérifie :

$$\eta\{(t, \omega), \theta\} = \alpha \int_{\omega} u(t, x) dx, \quad (\text{VI.11})$$

où u est la solution de l'équation (VI.10) qui dépend des paramètres $\theta = (D, \gamma, r_1, r_2, r_3, r_4)$;

- dans le présent modèle, il n'y a pas de paramètre complémentaire.
- Ainsi, pour tout $i \in \{1, \dots, I\}$,

$$Y_i \mid t_i, \omega_i \sim \text{Poisson}\{\eta((t_i, \omega_i), \theta)\}.$$

La vraisemblance du modèle est donc :

$$p(\mathbf{y} \mid \theta, \mathbf{t}, \mathbf{w}) = \prod_{i=1}^I \exp[-\eta\{(t_i, \omega_i), \theta\}] \frac{\eta\{(t_i, \omega_i), \theta\}^{y_i}}{y_i!}, \quad (\text{VI.12})$$

où $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_I)$, $\mathbf{t} = (t_1, \dots, t_I)$ et $\mathbf{w} = (\omega_1, \dots, \omega_I)$.

Pour les paramètres à estimer, nous spécifions une distribution *a priori* uniforme :

$$\begin{aligned} \pi(\theta) &= \pi(D, \gamma, r_1, r_2, r_3, r_4) \\ &= \frac{\mathbf{1}(10^{-2} \leq D \leq 1) \mathbf{1}(0.1 \leq \gamma \leq 10) \mathbf{1}(-10 \leq r_1, \dots, r_4 \leq 10)}{0.99 \times 9.9 \times 20^4}, \end{aligned}$$

où D est compris entre 0.01 et 1, γ est compris entre 0.1 et 10 et r_1, \dots, r_4 sont compris entre -10 et 10 . La constante α et la condition initiale $u(0, x)$ sont supposées connues.

La distribution *a posteriori* des paramètres

$$p(\theta \mid \mathbf{y}, \mathbf{t}, \mathbf{w}) = p(\mathbf{y} \mid \theta, \mathbf{t}, \mathbf{w}) \pi(\theta) / p(\mathbf{y} \mid \mathbf{t}, \mathbf{w})$$

ne correspond pas à une distribution connue. Par conséquent, nous devons appliquer une méthode numérique permettant de générer un échantillon approximativement distribué selon la distribution *a posteriori*, et donc d'estimer la distribution *a posteriori*. Nous avons utilisé un algorithme MCMC avec échantillonneur de Metropolis-Hastings (voir ci-après).

La Fig. VI.5 présente les distributions marginales *a posteriori* (c'est-à-dire les distributions *a posteriori* de chacun des paramètres pris isolément) de D , γ , r_1 , r_2 , r_3 et r_4 . Le Tableau VI.2 fournit les médianes et intervalles de crédibilité *a posteriori* de ces paramètres. Les médianes *a posteriori* sont relativement proches des valeurs vraies des paramètres, y compris pour le paramètre r_4 ,

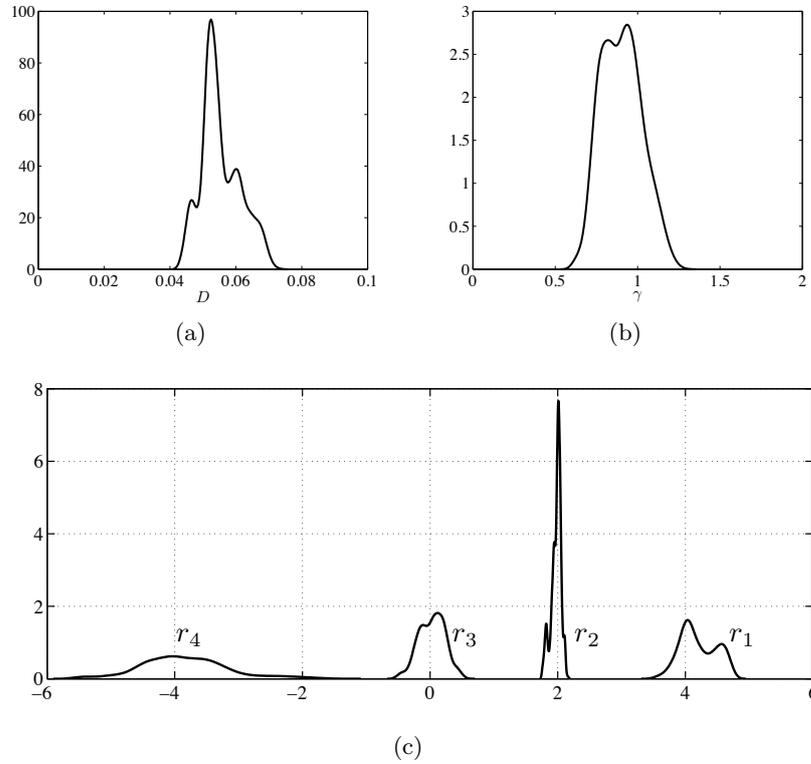


Figure VI.5. Distributions *a posteriori* de D , γ , r_1 , r_2 , r_3 et r_4 . Les valeurs vraies de ces paramètres sont 0.05, 1, 4, 2, 0, et -4.

alors qu'il n'y a pas d'observation dans l'habitat correspondant. En revanche, la distribution correspondant au paramètre r_4 , présentée sur la Fig. VI.5 (c), est la plus étalée, indiquant une plus grande incertitude sur ce paramètre. Ces résultats d'estimation sont à rapprocher du résultat de détermination de la Section 1 : nous avons montré qu'il est possible d'estimer convenablement six coefficients de l'équation de réaction-diffusion (VI.10) à partir d'observations de l'impact de la population, sur des sous-domaines ω_i du domaine Ω et en des temps discrets. L'information contenue dans ces observations renseigne non seulement sur la valeur locale des coefficients à estimer, mais également sur leur valeur dans des régions non mesurées, et ce malgré une incertitude prise en compte ici par le modèle du processus d'observation.

Algorithme MCMC. Une chaîne de Markov Monte Carlo (MCMC) avec échantillonneur de Metropolis-Hastings a été construite pour échantillonner dans la distribution *a posteriori* des paramètres $p(\theta \mid \mathbf{y}, \mathbf{t}, \mathbf{w})$ du modèle de réaction-diffusion (VI.10). Le MCMC est un algorithme itératif d'acceptation-rejet dont les étapes sont décrites ci-après.

- A $k = 0$: initialisation du vecteur de paramètre à la valeur $\theta^{(0)}$.

Tableau VI.2. Estimation *a posteriori* pour le modèle de réaction-diffusion.

Paramètre	D	γ	r_1	r_2	r_3	r_4
Vraie valeur	0.050	1	4	2	0	-4
Médiane <i>a posteriori</i>	0.055	0.96	4.14	2.00	0.04	-3.88
2.5 %-quantile <i>a posteriori</i>	0.0459	0.75	3.71	1.76	-0.39	-5.13
97.5 %-quantile <i>a posteriori</i>	0.0675	1.20	4.70	2.11	0.41	-2.21

- Pour k de 0 à $N - 1$ (où N est la longueur de la chaîne),
 - tirer une valeur candidate de θ , notée θ^* , dans une loi de proposition $Q(\theta^* | \theta^{(k)})$;
 - tirer une valeur j dans une loi uniforme définie sur $[0, 1]$;
 - calculer la probabilité d'acceptation :

$$\delta = \min \left\{ 1, \frac{p(\mathbf{y} | \theta^*, \mathbf{t}, \mathbf{w})\pi(\theta^*)Q(\theta^{(k)} | \theta^*)}{p(\mathbf{y} | \theta^{(k)}, \mathbf{t}, \mathbf{w})\pi(\theta^{(k)})Q(\theta^* | \theta^{(k)})} \right\} ;$$

- si $j < \delta$, alors accepter la valeur candidate : $\theta^{(k+1)} = \theta^*$; sinon rejeter la valeur candidate : $\theta^{(k+1)} = \theta^{(k)}$.

La loi de proposition que nous avons choisie pour θ est un produit de distributions Gamma (pour les paramètres positifs D et γ) et de distributions normales (pour les coefficients r_1, \dots, r_4) centrées sur la valeur courante $\theta^{(k)}$ du paramètre $\theta = (D, \gamma, r_1, \dots, r_4)$:

$$Q(\theta^* | \theta^{(k)}) = \prod_{i=1}^2 g(\theta_i^*; \theta_i^{(k)} / \lambda, \lambda) \times \prod_{i=3}^6 n(\theta_i^*; \theta_i^{(k)}, \sigma^2),$$

où $g(\cdot; a, b)$ est la densité de probabilité de la loi Gamma de paramètre d'échelle a et de paramètre de forme b (voir Section 2.3) et $n(\cdot; \mu, \sigma^2)$ est la densité de probabilité de la loi normale de moyenne μ et de variance σ^2 ($n(z; \mu, \sigma^2) = (\sqrt{2\pi}\sigma)^{-1} \exp\{-(z - \mu)^2 / (2\sigma^2)\}$). Nous avons implémenté cet algorithme en utilisant $\lambda = 10^{-2}$, $\sigma^2 = 0.05$ et $N = 20\,000$.

Calcul de la solution de l'équation (VI.10) et de la vraisemblance du modèle. Pour l'implémentation de l'algorithme MCMC, il nous faut calculer la vraisemblance du modèle $p(\mathbf{y} | \theta, \mathbf{t}, \mathbf{w})$ donnée par l'équation (VI.12). Comme mentionné plus haut, étant données une valeur du vecteur θ et les conditions initiales et au bord, l'équation (VI.10) admet une unique solution $u = u_\theta(t, x)$ qui est définie pour tout $t \geq 0$ et tout $x \in \Omega$. Cette solution ne peut pas être calculée analytiquement mais une méthode standard permet de calculer une solution numérique (ici nous avons utilisé le logiciel d'éléments finis Comsol Multiphysics[®]).

Une fois cette solution u_θ calculée, pour un jeu de paramètres θ donné, on peut calculer, pour ce jeu de paramètres, les intégrales (VI.11) pour $(t, \omega) \in \{(t_i, \omega_i), i = 1, \dots, I\}$ puis la vraisemblance (VI.12).

Commentaires bibliographiques

Un des problèmes inverses les plus étudiés est le problème de Calderón (voir l'article original de Calderón, 1980). Il s'agit ici de déterminer la conductivité électrique dans un corps sur la base de mesures d'un courant électrique sur le bord de ce corps. La technique d'imagerie médicale appelée "tomographie d'impédance électrique" est basée sur la résolution de ce problème inverse. Etant donné un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, à frontière $\partial\Omega$, il s'agit de déterminer le coefficient $D(x)$ de l'équation

$$\nabla \cdot (D(x) \nabla u) = 0, \quad x \in \Omega.$$

Ici, u ne représente plus une densité de population mais un potentiel électrique, et $D(x)$ est la conductivité électrique. Lorsqu'une tomographie est pratiquée, le processus d'observation consiste en l'application d'un courant sur le bord $\partial\Omega$ (ce qui revient à fixer $D(\partial u)/(\partial \nu) = f$ sur $\partial\Omega$ pour une fonction f connue) et à mesurer le potentiel électrique résultant u sur $\partial\Omega$. La possibilité de déterminer $D(x)$ à partir de telles observations a fait l'objet de nombreux travaux. Ce problème est résolu lorsque toute l'application $f \mapsto u|_{\partial\Omega}$ est observée, c'est-à-dire à partir d'un nombre infini d'observations (voir l'article de Sylvester et Uhlmann, 1987).

Les livres d'Isakov (1990) et de Choulli (2009) permettront au lecteur d'approfondir ses connaissances sur les problèmes inverses, dont certains sont résolus en utilisant des méthodes très différentes de celle présentée dans la Section 1. La méthode présentée ici, introduite par Roques et Cristofol (2010), permet quant à elle de résoudre un certain nombre de problèmes inverses à partir d'un minimum d'observations. Ainsi, la question de la détermination simultanée de plusieurs coefficients d'une équation de réaction-diffusion est étudiée dans l'article de Cristofol *et al.* (2011) ; le cas des systèmes de plusieurs espèces en compétition est traité par Roques et Cristofol (2012). Dans toutes ces situations où il s'agit de déterminer plusieurs coefficients d'une ou plusieurs équations de réaction-diffusion, l'observation $\mathcal{U}[u]$ fait intervenir plusieurs données initiales, ce qui suppose une possibilité de contrôle sur la donnée initiale.

La littérature sur l'estimation bayésienne est abondante. Nous pouvons notamment citer les ouvrages en français de Bernier *et al.* (2000), Dreesbeke *et al.* (2002), Robert (2006) et Parent et Bernier (2007), ainsi que les ouvrages en anglais de Gelman *et al.* (2004), Marin et Robert (2007) et Carlin et Louis (2009). Ajoutons à cette liste quelques références portant plus spécifiquement sur les algorithmes stochastiques permettant d'échantillonner dans les lois a

posteriori : Chib et Greenberg (1995), Gilks *et al.* (1996), Robert (1996) qui est en français, Robert et Casella (1998), Doucet *et al.* (2001) et Brooks (2003). D'autres approches d'estimation peuvent être utilisées pour estimer les modèles mécanistico-statistiques introduits dans ce chapitre. Nous pensons en particulier à la méthode des moindres carrés qui consiste à minimiser en β la fonction suivante :

$$\beta \mapsto \sum_{i=1}^I [y_i - h\{\eta(x_i, \beta)\}]^2,$$

où la fonction h est telle que $E(Y | X) = h\{\eta(X, \beta)\}$. Nous pensons également à la méthode du maximum de vraisemblance qui consiste à maximiser en $\theta = (\beta, \tau)$ la vraisemblance du modèle :

$$\theta \mapsto p(\mathbf{y} | \theta, \mathbf{x}) = \prod_{i=1}^I f\{y_i; \eta(x_i, \beta), \tau\}.$$

Les notations de la Section 2.2 ont été utilisées pour l'écriture de ces deux fonctions. Les méthodes d'estimation par moindres carrés et par maximum de vraisemblance sont des cas particuliers de l'estimation par minimum de contraste (Dacunha-Castelle et Duflo, 1982). Ces méthodes appartiennent à l'approche fréquentiste dans laquelle les paramètres ne sont pas vus comme des variables aléatoires, mais comme des coefficients non aléatoires dont on estime la valeur à l'aide d'un estimateur. L'estimateur est la solution (explicite ou numérique) d'un programme d'optimisation et, avec l'approche fréquentiste, c'est l'estimateur qui suit une distribution de probabilité et non pas le paramètre. On peut noter que des pénalisations sur l'espace des paramètres peuvent être introduites dans ces méthodes pour favoriser certaines valeurs des paramètres par rapport à d'autres, la pénalisation jouant alors le rôle de la loi *a priori* en bayésien. Les méthodes d'estimation par moindres carrés et par maximum de vraisemblance pour des modèles non linéaires sont traitées par Seber et Wild (1989), Tong (1990), Huet *et al.* (1996), Walter et Pronzato (1997), Ruppert *et al.* (2003) et Ritz et Streibig (2008) (une littérature là aussi abondante existe).

Terminons cette section par quelques références sur l'approche mécanistico-statistique. Des modèles mécanistico-statistiques plus complexes que ceux présentés dans ce chapitre et les méthodes d'estimation adaptées ont été publiés par, entre autres, Berliner (2003), Wikle (2003a,b), Buckland *et al.* (2004), Rivot *et al.* (2004), Berliner *et al.* (2008), Soubeyrand *et al.* (2009a), Soubeyrand *et al.* (2009b), et Roques *et al.* (2011). Quelques-uns des modèles proposés par ces auteurs contiennent, comme c'est le cas dans le présent chapitre, un sous-modèle déterministe de la dynamique étudiée et un sous-modèle stochastique du processus d'observation. Cependant, la plupart du temps, les modèles mécanistico-statistiques sont doublement stochastiques, ce qui les rend particulièrement difficiles à ajuster aux données (car la dimension des variables latentes peut être très grande).

Exercices

Exercice 36 On suppose que le coefficient r de l'équation (\mathcal{P}_r) de la Section 1 est constant. De quel type d'observation peut-on se contenter pour déterminer ce coefficient r ?

Exercice 37 On suppose que le coefficient γ de l'équation (\mathcal{P}_r) de la Section 1 est constant, et que $r(x)$ et γ sont inconnus. Supposons que $\mathcal{U}[u]$ consiste en l'observation suivante :

$$\mathcal{U}[u] = \{u(t, x_0), \partial u / \partial x(t, x_0), \partial^2 u / \partial x^2(t, x_0) \mid t \in [0, \varepsilon]\}.$$

Montrer que cette observation permet de déterminer $r(x)$ et γ .

Exercice 38 Expliquer pour quelle raison la preuve du Théorème 24 est difficilement adaptable aux dimensions $d \geq 2$.

Exercice 39 Peut-on déterminer le coefficient r de l'équation (\mathcal{P}_r) à partir de l'observation $\mathcal{U}[u]$ définie dans la Section 1 si $r = r(t, x)$ dépend du temps ?

Exercice 40 Simuler le modèle de la Section 2.3 basé sur le modèle logistique en remplaçant les lois d'observation Gamma par les lois d'observation poissonniennes suivantes :

$$Y_i \mid N(t_i) \sim \text{Poisson}(N(t_i)), \quad \forall i \in \{1, \dots, I\}.$$

Exercice 41 Ecrire la distribution *a posteriori* des paramètres pour le modèle avec observations poissonniennes de l'Exercice 40. Adapter l'algorithme de ré-échantillonnage d'importance au nouveau modèle. Programmer l'algorithme. Appliquer l'algorithme aux données simulées de l'Exercice 40. Donner les médianes *a posteriori* et les quantiles d'ordre 0.025 et 0.975 des paramètres.

Indication : le modèle avec observations poissonniennes ne contient pas de paramètre complémentaire τ et seuls les paramètres N_0 , r et K doivent être estimés.

Exercice 42 Reprendre l'Exercice 41 en modifiant les lois *a priori* des paramètres N_0 , r et K , et étudier l'influence de la connaissance *a priori* sur les résultats d'estimation.

Exercice 43 Ecrire la fonction à minimiser pour estimer les paramètres du modèle de l'Exercice 40 par moindres carrés. Minimiser cette fonction en utilisant les données simulées de l'Exercice 40, puis donner les estimations ponctuelles obtenues.

Indication : l'estimation par moindres carrés est abordée dans les commentaires bibliographiques du présent chapitre. Un algorithme numérique de type Newton-Raphson ou de type Nelder-Mead peut être utilisé pour la minimisation. Le lecteur avancé cherchera comment évaluer les variances d'estimation des paramètres.

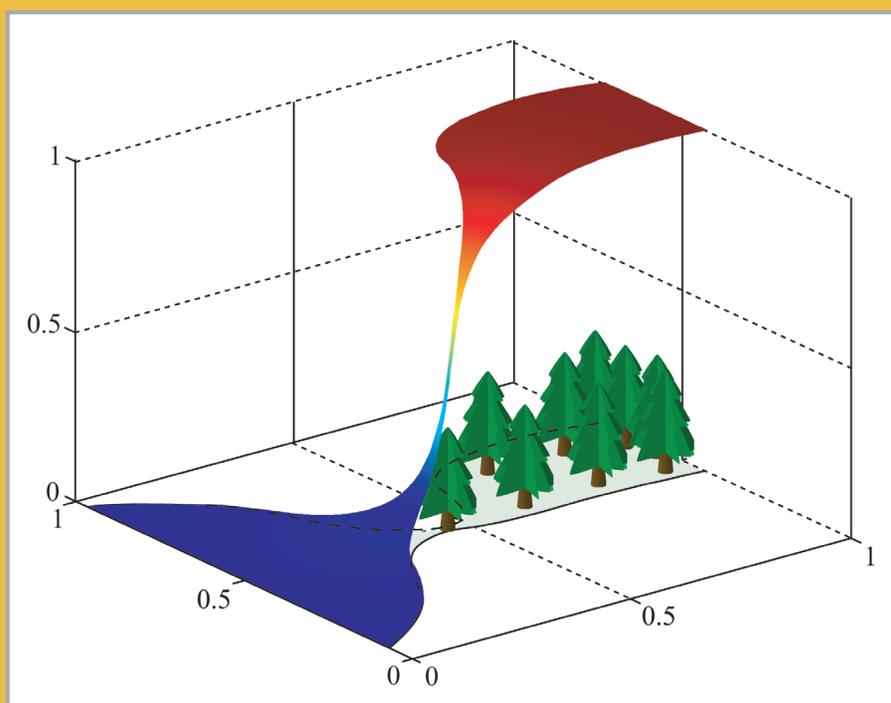
Exercice 44 Ecrire la fonction à maximiser pour estimer les paramètres du modèle de l'Exercice 40 par maximum de vraisemblance. Maximiser cette fonction en utilisant les données simulées de l'Exercice 40, puis donner les estimations ponctuelles obtenues. Comparer les résultats d'estimation obtenus aux Exercices 41, 42, 43 et 44.

Indication : l'estimation par maximum de vraisemblance est abordée dans les commentaires bibliographiques du présent chapitre. Un algorithme de type Newton-Raphson ou de type Nelder-Mead peut être utilisé pour la minimisation. Le lecteur avancé cherchera comment évaluer les variances d'estimation des paramètres.

Modèles de réaction-diffusion pour l'écologie spatiale

AVEC
EXERCICES
DIRIGÉS

Lionel Roques



éditions
Quæ

Modèles de réaction-diffusion pour l'écologie spatiale

Lionel Roques

Avec la contribution de Samuel Soubeyrand

Éditions Quæ

Éditions Quæ
RD 10
78026 Versailles Cedex

ISBN : 978-2-7592-2029-8

© Éditions Quæ, 2013

Le code de la propriété intellectuelle interdit la photocopie à usage collectif sans autorisation des ayants droit. Le non-respect de cette disposition met en danger l'édition, notamment scientifique, et est sanctionné pénalement. Toute reproduction même partielle du présent ouvrage est interdite sans autorisation du Centre français d'exploitation du droit de copie (CFC), 20 rue des Grands-Augustins, Paris 6^e.

Bibliographie

- Ablowitz, M. J. et A. Zeppetella (1979). Explicit solutions of Fisher's equation for a special wave speed. *Bull Math Biol* 41, 835–840.
- Allaire, G. (2012). *Analyse numérique et optimisation*. Deuxième édition, Editions de l'Ecole polytechnique.
- Allee, W. C. (1931). *Animal aggregations, a study in general sociology*. Chicago : The University of Chicago Press.
- Aronson, D. G. et H. G. Weinberger (1975). Nonlinear diffusion in population genetics, combustion and nerve propagation. In *Partial Differential Equations and Related Topics*, Volume 446 of *Lectures Notes Math*, 5–49. Springer, New York.
- Austerlitz, F. et P. H. Garnier-Géré (2003). Modelling the impact of colonisation on genetic diversity and differentiation of forest trees : interaction of life cycle, pollen flow and seed long-distance dispersal. *Heredity* 90, 282–290.
- Bandle, C. (1980). *Isoperimetric Inequalities and Applications*. Monographs and studies in mathematics. Pitman.
- Barton, N. H. et M. Turelli (2011). Spatial waves of advance with bistable dynamics : cytoplasmic and genetic analogues of Allee effects. *Am Nat* 178, E48–E75.
- Berestycki, H. et F. Hamel (2000). Non existence of traveling fronts solutions for some bistable reaction-diffusion equations. *Advances Diff Equations* 5, 557–582.
- Berestycki, H. et F. Hamel (2002). Front propagation in periodic excitable media. *Comm Pure Appl Math* 55, 949–1032.
- Berestycki, H. et F. Hamel (2006). Fronts and invasions in general domains. *C R Acad Sci Paris Ser I* 343, 711–716.
- Berestycki, H. et F. Hamel (2007). Generalized travelling waves for reaction-diffusion equations. In Berestycki, H., Bertsch, M., Browder, F., Nirenberg,

- L., Peletier, L. A. et Veron, L. (Ed.), *Perspectives in Nonlinear Partial Differential Equations : in Honor of Haim Brezis*, Volume 446 of *Contemporary Mathematics Series*, 101–123. Conference On Perspectives in Nonlinear Partial Differential Equations Held in Honor of Haim Brezis, Paris, France, Jun 21-25, 2004.
- Berestycki, H. et F. Hamel (2012a). Generalized transition waves and their properties. *Comm Pure Appl Math* 65, 592–648.
- Berestycki, H. et F. Hamel (2012b). *Reaction-Diffusion Equations and Propagation Phenomena*. Springer Verlag, New York.
- Berestycki, H., F. Hamel, et L. Roques (2005). Analysis of the periodically fragmented environment model : I - Species persistence. *J. Math. Biol.* 51, 75–113.
- Berestycki, H. et T. Lachand-Robert (2004). Some properties of monotone rearrangement with applications to elliptic equations in cylinders. *Math Nachr* 266, 3–19.
- Berestycki, H., G. Nadin, B. Perthame, et L. Ryzhik (2009). The non-local fisher–kpp equation : travelling waves and steady states. *Nonlinearity* 22, 2813.
- Berestycki, H. et L. Rossi (2008). Reaction-diffusion equations for population dynamics with forced speed, I - The case of the whole space. *Disc Cont Dyn Systems A* 21, 41–67.
- Berliner, L. M. (2003). Physical-statistical modeling in geophysics. *J Geophys Res* 108, 8776.
- Berliner, L. M., N. Cressie, K. Jezek, Y. Kim, C. Q. Lam, et C. J. van der Veen (2008). Equilibrium dynamics of ice streams : a bayesian statistical analysis. *Stat Method Appl* 17, 145–165.
- Bernier, J., E. Parent, et J.-J. Boreux (2000). *Statistique de l'environnement. Traitement bayésien de l'incertitude*. Paris : Lavoisier.
- Bramson, M. (1983). Convergence of solutions of the Kolmogorov equation to travelling waves. *Mem Amer Math Soc* 44.
- Brascamp, H. J., E. H. Lieb, et J. M. Luttinger (1974). A general rearrangement inequality for multiple integrals. *J Funct Anal* 17, 227–237.
- Brock, F. (1995). Continuous steiner-symmetrization. *Math Nachr* 172, 25–48.
- Brooks, S. (2003). Bayesian computation : A statistical revolution. *Trans Roy Statist Soc A* 15, 2681–2697.

- Brothers, J. et W. Ziemer (1988). Minimal rearrangements of Sobolev functions. *J Reine Angew Math* 384, 153–179.
- Brunn, H. (1887). *Über Ovale und Eiflächen*. Inaugural Dissertation, München.
- Buckland, S. T., K. B. Newman, L. Thomas, et N. B. Koesters (2004). State-space models for the dynamics of wild animal populations. *Ecol Model* 171, 157–175.
- Calderón, A. P. (1980). On an inverse boundary value problem. In W. H. Meyer et M. A. Raupp (Eds.), *Seminar on Numerical Analysis and its Applications to Continuum Physics*, 65–73. Sociedade Brasileira de Matematica.
- Cantrell, R. S. et C. Cosner (1989). Diffusive logistic equations with indefinite weights : population models in disrupted environments. *Proc R Soc Edin A* 112, 293–318.
- Cantrell, R. S. et C. Cosner (1991a). Diffusive logistic equations with indefinite weights : population models in disrupted environments II. *SIAM J Math Anal* 22, 1043–1064.
- Cantrell, R. S. et C. Cosner (1991b). The effects of spatial heterogeneity in population dynamics. *J Math Biol* 29, 315–338.
- Cantrell, R. S. et C. Cosner (2003). *Spatial ecology via reaction-diffusion equations*. John Wiley & Sons Ltd, Chichester, UK.
- Carlin, B. et T. Louis (2009). *Bayesian Methods for Data Analysis*. London : Second edition, Chapman & Hall/CRC Press.
- Caswell, H. (1989). *Matrix Population Models : Construction, Analysis, Interpretation*. Sinauer Associates, Sunderland, MA.
- Chanillo, S., D. Grieser, M. Imai, K. Kurata, et I. Ohnishi (2000). Symmetry breaking and other phenomena in the optimization of eigenvalues for composite membranes. *Commun Math Phys* 214, 315–337.
- Chapuisat, G. et E. Grenier (2005). Existence and nonexistence of traveling wave solutions for a bistable reaction-diffusion equation in an infinite cylinder whose diameter is suddenly increased. *Comm Partial Diff Eq* 30, 1805–1816.
- Chib, S. et E. Greenberg (1995). Understanding the Metropolis-Hastings algorithm. *J R Stat Soc D-STA* 49(4), 327–335.
- Choulli, M. (2009). *Une introduction aux problèmes inverses elliptiques et paraboliques*. Springer.

- Clark, J. S. (1998). Why trees migrate so fast : Confronting theory with dispersal biology and the paleorecord. *Am Nat* 152, 204–224.
- Coddington, E. A. et N. Levinson (1955). *Theory of Ordinary Differential Equations*. McGraw-Hill Book Company, Inc., New York-Toronto-London.
- Coville, J. et L. Dupaigne (2007). On a nonlocal reaction diffusion equation arising in population dynamics. *Proc R Soc Edin A* 137, 1–29.
- Cristofol, M., J. Garnier, F. Hamel, et L. Roques (2011). Uniqueness from pointwise observations in a multi-parameter inverse problem. *Commun Pur Appl Anal* 11, 1–15.
- Dacunha-Castelle, D. et M. Duflo (1982). *Probabilités et statistiques. Problèmes à temps mobile*. Masson, Paris.
- Davis, M. B. et R. G. Shaw (2001). Range shifts and adaptive responses to quaternary climate change. *Science* 292, 673–679.
- Doucet, A., N. de Freitas, et N. Gordon (2001). *Sequential Monte Carlo Methods in Practice*. New York : Springer Verlag.
- Droesbeke, J.-J., J. Fine, et G. Saporta (Eds.) (2002). *Méthodes bayésiennes en statistique*, Paris. Société française de statistique : Editions Technip.
- Du, Y. et H. Matano (2010). Convergence and sharp thresholds for propagation in nonlinear diffusion problems. *J Eur Math Soc*.
- Eckmann, J.-P. et D. Ruelle (1985). Ergodic theory of chaos and strange attractors. *Rev Mod Phys* 57, 617–656.
- Evans, L. C. (1998). *Partial Differential Equations*. University of California, Berkeley - AMS.
- Faber, G. (1923). Beweis, dass unter allen homogenen membranen von gleicher fläche und gleicher spannung die kreisförmige den tiefsten grundton gibt. *S.-B. Math. Nat. Kl. Bayer Akad. Wiss.*, 169–172.
- Fayard, J., E. K. Klein, et F. Lefèvre (2009). Long distance dispersal and the fate of a gene from the colonization front. *J Evol Biol* 22, 2171–2182.
- Fife, P. C. (1979). *Mathematical Aspects of Reacting and Diffusing Systems*, Volume 28 of *Lecture Notes in Biomathematics*. Springer-Verlag.
- Fife, P. C. et J. McLeod (1977). The approach of solutions of nonlinear diffusion equations to traveling front solutions. *Arch Ration Mech Anal* 65, 335–361.
- Fisher, R. A. (1937). The wave of advance of advantageous genes. *Ann Eugen* 7, 335–369.

- Freedman, H. I. (1980). *Deterministic Mathematical Models in Population Ecology*. Dekker edition.
- Friedman, A. (1964). *Partial Differential Equations of Parabolic Type*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ.
- Garnier, J. (2011). Accelerating solutions in integro-differential equations. *SIAM J Math Anal* 43, 1955–1974.
- Garnier, J., T. Giletti, F. Hamel, et L. Roques (2012a). Inside dynamics of pulled and pushed fronts. *J Math Pures Appl* 98, 428–449.
- Garnier, J., T. Giletti, et G. Nadin (2012b). Maximal and minimal spreading speeds for reaction diffusion equations in nonperiodic slowly varying media. *Ann Inst Henri Poincaré* 11, 173–188.
- Garnier, J., L. Roques, et F. Hamel (2012c). Success rate of a biological invasion in terms of the spatial distribution of the founding population. *B. Math. Biol.* 74, 453–473.
- Gelman, A., J. Carlin, H. Stern, et D. Rubin (2004). *Bayesian Data Analysis*. Col. Texts in Statistical Science. New York USA : Second edition, Chapman & Hall.
- Gilbarg, D. et N. S. Trudinger (1983). *Elliptic Partial Differential Equations of Second Order*. Springer-Verlag, Berlin.
- Gilks, W., S. Richardson, et D. Spiegelhalter (1996). *Markov chain Monte Carlo in Practice*. London : Chapman & Hall.
- Glendinning, P. (1994). *Instability and Chaos : An Introduction to the Theory of Nonlinear Differential Equations*. Cambridge University Press.
- Grindrod, P. (1996). *Theory and Applications of Reaction-Diffusion Equations*. Clarendon Press.
- Haberman, R. (2004). *Elementary Applied Partial Differential Equations with Fourier Series and Boundary Value Problems*. Fourth edition, Pearson Education, New Jersey.
- Hallatschek, O. et D. R. Nelson (2008). Gene surfing in expanding populations. *Theor Popul Biol* 73, 158–170.
- Hamel, F. (1997a). Reaction-diffusion problems in cylinders with no invariance by translation. part I : small perturbations. *Ann Inst Henri Poincaré (C)* 14, 457–498.
- Hamel, F. (1997b). Reaction-diffusion problems in cylinders with no invariance by translation. part II : monotone perturbations. *Ann Inst Henri Poincaré (C)* 14, 555–596.

- Hamel, F., J. Nolen, J.-M. Roquejoffre, et L. Ryzhik (2013). A short proof of the logarithmic Bramson correction in Fisher-KPP equations. *Netw Heterog Media* 8, 275–289.
- Hamel, F. et L. Roques (2010). Fast propagation for KPP equations with slowly decaying initial conditions. *J Diff Equations* 249, 1726–1745.
- Hamel, F., E. Russ, et N. Nadirashvili (2005). An isoperimetric inequality for the principal eigenvalue of the laplacian with drift. *C R Acad Sci Paris Ser I* 340, 347–352.
- Hanski, I. (1975). Predictive and practical metapopulation models : The incidence function approach. In D. Tilman et P. Kareiva (Eds.), *Spatial Ecology*, 21–45. Princeton University Press, Princeton, NJ.
- Hardy, G., J. Littlewood, et G. Pólya (1988). *Inequalities*. Cambridge Mathematical Library. Cambridge University Press.
- Hartl, D. L. et A. G. Clark (2006). *Principles of Population Genetics*. Fourth edition, Sinauer, Sunderland, MA.
- Henrot, A. et M. Pierre (2005). *Variation et Optimisation de Formes*. Collection Mathématiques et Applications, Springer.
- Hewitt, G. M. (2000). The genetic legacy of the quarternary ice ages. *Nature* 405, 907–913.
- Hirsch, M. W. (1982). Systems of differential equations which are competitive or cooperative. I : Limit sets. *SIAM J Appl Math* 13, 167–179.
- Hirsch, M. W. (1985). Systems of differential equations which are competitive and cooperative. II : Convergence almost everywhere. *SIAM J Math Anal* 16, 423–439.
- Hirsch, M. W. (1988). Systems of differential equations which are competitive or cooperative. III : Competing species. *Nonlinearity* 1, 51–71.
- Hirsch, M. W. (1989). Systems of differential equations that are competitive or cooperative. V. convergence in 3-dimensional systems. *J Diff Equations* 80, 94–106.
- Hirsch, M. W. (1990). Systems of differential equations that are competitive or cooperative. IV : Structural stability in three dimensional systems. *SIAM J Math Anal* 21, 1225–1234.
- Huet, S., A. Bouvier, M.-A. Poursat, et E. Jolivet (1996). *Tools for Nonlinear Regression : A Practical Guide with S-PLUS and R Examples*. Springer.

- Ibrahim, K. M., R. A. Nichols, et G. M. Hewitt (1996). Spatial patterns of genetic variation generated by different forms of dispersal during range expansion. *Heredity* 77, 282–291.
- Isakov, V. (1990). *Inverse source problems*. Providence, RI, American Mathematical Society.
- Kanel, J. I. (1962). Stabilization of solutions of the Cauchy problem for equations encountered in combustion theory. *Matematicheskii Sbornik* 59, 245–288.
- Kolmogorov, A. N., I. G. Petrovsky, et N. S. Piskunov (1937). Étude de l'équation de la diffusion avec croissance de la quantité de matière et son application à un problème biologique. *Bull Univ État Moscou, Sér. Int. A* 1, 1–26.
- Krahn, E. (1925). Über eine von Rayleigh formulierte Minimaleigenschaft des Kreises. *Math Ann* 94, 97–100.
- Krahn, E. (1926). Über Minimaleigenschaft der Kugel in drei und mehr Dimensionen. *Acta Comm Univ Tartu (Dorpat)* A9, 1–44.
- Kuang, Y. (1993). *Delay Differential Equations with Applications in Population Dynamics*. Academic Press, Boston.
- Lau, K.-S. (1985). On the nonlinear diffusion equation of Kolmogorov, Petrovsky and Piskunov. *J Diff Equations* 59, 44–70.
- Leung, A. W. (1989). *Systems of nonlinear partial differential equations*. Kluwer Academic Publishers, Norwell MA.
- Lewis, M. A. et P. Kareiva (1993). Allee dynamics and the spread of invading organisms. *Theor Popul Biol* 43, 141–158.
- Lewis, M. A. et P. Van Den Driessche (1993). Waves of extinction from sterile insect release. *Math Biosci* 116, 221–247.
- Lorenz, E. N. (1963). Deterministic nonperiodic flow. *J Atmos Sci* 20, 130–141.
- Lotka, A. (1925). *Elements of physical Biology*. Williams et Wilkins, Baltimore.
- Lumiste, J. P. (1994). *Edgar Krahn, 1894-1961, A Centenary Volume*. IOS Press, Amsterdam.
- Lusternik, L. A. (1935). Die brunn-minkowskische ungleichung für beliebige messbare mengen. *C R (Doklady) Acad Sci URSS* 8, 55–58.
- Luther, R.-L. (1906). Räumliche fortpflanzung chemischer reaktiven. *Z für Elektrochemie und angew, Physikalische Chemie* 12, 506–600.

- Mallordy, J.-F. et J.-M. Roquejoffre (1995). A parabolic equation of the kpp type in higher dimensions. *SIAM J Math Anal* 26, 1–20.
- Malthus, T. R. (1798). *An Essay on the Principle of Population*. Norton Critical Editions.
- Marin, J. et C. P. Robert (2007). *Bayesian Core*. New York, NY : Springer.
- Matano, H. (1979). Asymptotic behaviour and stability of solutions of semilinear diffusion equations. *Publ RIMS, Kyoto Univ* 15, 401–454.
- McKean, H. P. (1975). Application of Brownian motion to the equation of Kolmogorov-Petrovskii-Piscunov. *Comm Pure Appl Math* 28, 323–331.
- Minkowski, H. (1896). *Geometrie der Zahlen*. Leipzig : Teubner.
- Murray, J. D. (2002). *Mathematical Biology*. Third edition, Interdisciplinary Applied Mathematics 17, Springer-Verlag, New York.
- Nadin, G. (2012). Critical travelling waves for reaction-diffusion equations. *Preprint*.
- Okubo, A. (1980). *Diffusion and ecological problems : mathematical models*. Springer-Verlag, New York.
- Okubo, A. et S. A. Levin (2002). *Diffusion and Ecological Problems – Modern Perspectives*. Second edition, Springer-Verlag, New York.
- Pao, C. V. (1992). *Nonlinear Parabolic and Elliptic Equations*. Plenum Press, New York.
- Parent, E. et J. Bernier (2007). *Le raisonnement bayésien : Modélisation et inférence*. Paris : Springer France.
- Pólya, G. et G. Szegő (1951). *Isoperimetric Inequalities in Mathematical Physics*. Annals of Mathematics Studies. Princeton University Press.
- Protter, M. H. et H. F. Weinberger (1967). *Maximum Principles in Differential Equations*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ.
- Provan, J. et K. D. Bennett (2008). Phylogeographic insights into cryptic glacial refugia. *Trends Ecol Evol* 23, 564–571.
- Raviart, P. et J. Thomas (1983). *Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles*, Volume 6. Masson.
- Rayleigh, J. W. S. (1945). *The Theory of Sound*. Dover Publications, NY (republication of the 1894-1896 edition).
- Ritz, C. et J. C. Streibig (2008). *Nonlinear Regression with R*. Springer.

- Rivot, E., E. Prévost, E. Parent, et J.-L. Baglinière (2004). Bayesian state-space modelling framework for fitting a salmon stage-structured population dynamic model to multiple time series of field data. *Ecol Model* 179, 463–485.
- Robert, C. (1996). *Méthodes de Monte-Carlo par chaînes de Markov*. Coll. Statistique mathématique et Probabilité, Economica, Paris.
- Robert, C. (2006). *Le choix bayésien : Principes et pratique*. Paris : Springer-Verlag France.
- Robert, C. et G. Casella (1998). *Monte Carlo Statistical Methods*. Springer-Verlag.
- Roques, L. et M. D. Chekroun (2011). Probing chaos and biodiversity in a simple competition model. *Ecol Complex* 8, 98–104.
- Roques, L. et M. Cristofol (2010). On the determination of the nonlinearity from localized measurements in a reaction-diffusion equation. *Nonlinearity* 23, 675–686.
- Roques, L. et M. Cristofol (2012). The inverse problem of determining several coefficients in a nonlinear Lotka-Volterra system. *Inverse Problems* 28, 075007.
- Roques, L., J. Garnier, F. Hamel, et E. K. Klein (2012). Allee effect promotes diversity in traveling waves of colonization. *Proc Natl Acad Sci USA* 109, 8828–8833.
- Roques, L. et F. Hamel (2007). Mathematical analysis of the optimal habitat configurations for species persistence. *Math Biosci* 210, 34–59.
- Roques, L., A. Roques, H. Berestycki, et A. Kretzschmar (2008). A population facing climate change : joint influences of Allee effects and environmental boundary geometry. *Popul Ecol* 50, 215–225.
- Roques, L., S. Soubeyrand, et J. Rousset (2011). A statistical-reaction-diffusion approach for analyzing expansion processes. *J Theor Biol* 274, 43–51.
- Roques, L. et R. S. Stoica (2007). Species persistence decreases with habitat fragmentation : an analysis in periodic stochastic environments. *J Math Biol* 55, 189–205.
- Rousset, J., R. Zhao, D. Argal, M. Simonato, A. Battisti, A. Roques, et C. Kerdelhué (2010). The role of topography in structuring the demographic history of the pine processionary moth, *Thaumetopoea pityocampa* (Lepidoptera : Notodontidae). *J Biogeogr* 37, 1478–1490.

- Ruppert, D., M. P. Wand, et R. J. Carroll (2003). *Semiparametric Regression*. Cambridge University Press.
- Sattinger, D. H. (1972). Monotone methods in nonlinear elliptic and parabolic boundary value problems. *Indiana Univ Math J* 21, 979–1000.
- Seber, G. A. et C. J. Wild (1989). *Nonlinear Regression*. Wiley.
- Shigesada, N. et K. Kawasaki (1997). *Biological Invasions : Theory and Practice*. Oxford Series in Ecology and Evolution, Oxford : Oxford University Press.
- Skellam, J. G. (1951). Random dispersal in theoretical populations. *Biometrika* 38, 196–218.
- Soubeyrand, S., A. L. Laine, I. Hanski, et A. Penttinen (2009a). Spatio-temporal structure of host-pathogen interactions in a metapopulation. *Am Nat* 174, 308–320.
- Soubeyrand, S., S. Neuvonen, et A. Penttinen (2009b). Mechanical-statistical modeling in ecology : from outbreak detections to pest dynamics. *Bull Math Biol* 71, 318–338.
- Sylvester, J. et G. Uhlmann (1987). A global uniqueness theorem for an inverse boundary value problem. *Ann Math* 125, 153–169.
- Tong, H. (1990). *Non-linear Time Series : A Dynamical System Approach*. Oxford University Press.
- Turchin, P. (1998). *Quantitative Analysis of Movement : Measuring and Modeling Population Redistribution in Animals and Plants*. Sinauer, Sunderland, MA.
- Turchin, P. (2003). *Complex Population Dynamics : a Theoretical/Empirical Synthesis*. Princeton University Press.
- Tychonoff, A. (1935). Théorèmes d'unicité pour l'équation de la chaleur. *Mathematical Sbornik* 42, 199–216.
- Uchiyama, K. (1978). The behaviour of solutions of some non-linear diffusion equations for large time. *J Math Kyoto Univ* 18, 453–508.
- Vano, J., J. Wildenberg, M. Anderson, J. Noel, et J. Sprott (2006). Chaos in low-dimensional Lotka-Volterra models of competition. *Nonlinearity* 19, 2391–2404.
- Vázquez, J. L. (2007). *The Porous Medium Equation. Mathematical Theory*. Oxford Univ Press.

- Verhulst, P.-F. (1838). Notice sur la loi que la population suit dans son accroissement. *Mathématiques & sciences humaines* 167, 51–81.
- Volpert, A. I., V. A. Volpert, et V. A. Volpert (1994). *Traveling Wave Solutions of Parabolic Systems*. American Mathematical Society, Providence.
- Volterra, V. (1926). Fluctuations in the abundance of a species considered mathematically. *Nature* 118, 558–560.
- Walter, E. et L. Pronzato (1997). *Identification of Parametric Models from Experimental Data*. Springer.
- Weinberger, H. F. (2002). On spreading speeds and traveling waves for growth and migration in periodic habitat. *J Math Biol* 45, 511–548.
- Wikle, C. K. (2003a). Hierarchical models in environmental science. *Int Stat Rev* 71, 181–199.
- Wikle, C. K. (2003b). Hierarchical Bayesian models for predicting the spread of ecological processes. *Ecology* 84, 1382–1394.
- Wu, J. (1996). *Theory and Applications of Partial Functional Differential Equations*, Volume 119 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York.
- Xin, J. (2000). Front propagation in heterogeneous media. *SIAM Rev* 42, 161–230.
- Zlatoš, A. (2006). Sharp transition between extinction and propagation of reaction. *J Amer Math Soc* 19, 251–263.

Notations

Ω : sous-domaine borné ou non borné de \mathbb{R}^d .

$\partial\Omega$: frontière du domaine Ω (éventuellement vide quand $\Omega = \mathbb{R}^d$).

$\overline{\Omega}$: adhérence de Ω .

$|\Omega|$: mesure de Lebesgue de Ω .

$|x|$: norme euclidienne de $x \in \mathbb{R}^d$.

$C^k(\Omega)$, $k \geq 0$: espace des fonctions définies et continues dans Ω , à valeurs dans \mathbb{R} , et dont toutes les dérivées jusqu'à l'ordre $k \in \mathbb{N}$ sont continues dans Ω . En dimension supérieure ou égale à 2, les dérivées d'ordre $j \leq k$ sont les dérivées partielles $\frac{\partial^j}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_j}}$, où $i_1, \dots, i_j \in [1, d] \cap \mathbb{N}$.

$C^\infty(\Omega)$: espace des fonctions qui sont dans $C^k(\Omega)$ pour tout $k \in \mathbb{N}$.

$C^k(\Omega, \Omega')$, $k \geq 0$: espace des fonctions définies et continues dans Ω , à valeurs dans Ω' , et dont toutes les dérivées jusqu'à l'ordre $k \in \mathbb{N}$ sont continues dans Ω .

$C_0^k(\mathbb{R}_+ \times \Omega)$, $k \geq 0$: espace des fonctions continues dans $\mathbb{R}_+ \times \Omega$, à valeurs dans \mathbb{R} , et dont les dérivées en espace jusqu'à l'ordre k sont continues dans $\mathbb{R}_+ \times \Omega$.

$C_1^k(\mathbb{R}_+ \times \Omega)$, $k \geq 0$: espace des fonctions continues dans $\mathbb{R}_+ \times \Omega$, à valeurs dans \mathbb{R} , et dont les dérivées en espace jusqu'à l'ordre k et la dérivée en temps sont continues dans $\mathbb{R}_+ \times \Omega$.

$C^\infty(\mathbb{R}_+^* \times \Omega)$: espace des fonctions continues dans $\mathbb{R}_+^* \times \Omega$, à valeurs dans \mathbb{R} , et dont toutes les dérivées sont continues.

$C^{k,\alpha}(\overline{\Omega})$, $k \geq 0$, $\alpha \in]0, 1]$: espace de Hölder, voir la Section 4.3 du Chapitre II.

$L^2(\Omega)$: espace des fonctions mesurables dans Ω , de carré intégrable sur Ω au sens de la mesure de Lebesgue.

$L^\infty(\Omega)$: espace des fonctions mesurables dans Ω , à valeurs dans \mathbb{R} , et bornées presque partout dans Ω .

$H^1(\Omega)$: espace des fonctions de $L^2(\Omega)$ dont la dérivée (au sens des distributions) est dans $L^2(\Omega)$.

$H_0^1(\Omega)$: espace des fonctions de $H^1(\Omega)$ qui s'annulent sur $\partial\Omega$ (au sens de la trace).