



Assimilation variationnelle de données dans un modèle couplé océan-biogéochimie

Blaise Faugeras

► To cite this version:

Blaise Faugeras. Assimilation variationnelle de données dans un modèle couplé océan-biogéochimie. Modélisation et simulation. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2002. Français. NNT: . tel-00002176

HAL Id: tel-00002176

<https://theses.hal.science/tel-00002176>

Submitted on 19 Dec 2002

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

présentée par

Blaise FAUGERAS

pour obtenir le titre de

Docteur de l'Université Joseph Fourier - Grenoble I

(arrêtés ministériels du 5 juillet 1984 et du 30 mars 1992)

spécialité: **Mathématiques Appliquées**

Assimilation variationnelle de données dans un modèle couplé océan-biogéochimie

Date de soutenance: le 08/10/2002

Composition du Jury:

M. François Xavier LE DIMET	Président
M. Guy CHAVENT	Rapporteur
M. Louis PRIEUR	Rapporteur
M. Laurent MÉMERY	Examineur
M. Jean Pierre PUEL	Examineur
M. Jacques BLUM	Directeur de thèse
M. Jacques VERRON	Directeur de thèse

Thèse préparée au sein du Laboratoire de Modélisation et Calcul,
IMAG projet IDOPT

Remerciements

L'heure est venue pour moi de terminer la rédaction de cette thèse. J'ai eu la chance pendant ces trois années de rencontrer des personnes d'horizons scientifiques différents qui ont su me faire bénéficier de leurs compétences complémentaires.

Je tiens tout d'abord à exprimer ma reconnaissance envers mes deux directeurs de thèse, Jacques Blum et Jacques Verron. Je vous remercie de m'avoir fait confiance, moi qui, débarquant à Grenoble, ne connaissais rien au contrôle optimal, rien à l'assimilation de données, rien à l'océanographie et encore moins à la biogéochimie marine. Vous m'avez toujours laissé une très grande autonomie tout en étant là pour me conseiller, réorienter mon travail quand il fallait et pour me présenter les bonnes personnes :

Marina Lévy et Laurent Mémery. Sans notre rencontre il y a deux ans au LODYC j'aurais certainement abandonné ce travail et serais passé à autre chose depuis longtemps. Vous m'avez permis de faire mes premiers pas dans le monde complexe de la biogéochimie de l'océan. Je vous remercie de vous être impliqué de la sorte dans notre travail commun. Votre perpétuelle motivation a contribué à me faire aller de l'avant. Laurent, merci d'avoir accepté d'être examinateur de cette thèse. Marina, tu n'as pas pu venir à la soutenance mais ton congé maternité est une bonne excuse. J'espère que nous serons amenés à nous revoir et pourquoi pas travailler encore ensemble.

Jean-Pierre Puel, en une après-midi sur un tableau noir du Laboratoire Dieudonné à Nice m'a aidé à recadrer la partie mathématique de cette thèse. Je vous remercie d'avoir bien voulu vous plonger dans mes équations et de l'intérêt que vous avez porté à mon travail. Je suis très honoré que vous ayez accepté de faire partie du jury.

Isabelle Charpentier. Merci Isabelle pour tes nombreux coups de main. Tu m'as, entre autres, fait partager ta maîtrise de la différentiation de codes et remonté le moral à plusieurs reprises. Encore une fois, merci pour tout.

J'adresse également mes plus vifs remerciements aux membres du jury que je n'ai pas encore cité. Guy Chavent m'a fait l'honneur d'être rapporteur de cette thèse alors que cette année est pour lui une année sabbatique. Louis Prieur a également accepté de rapporter sur ce travail malgré son emploi du temps très chargé et François Xavier Le Dimet a bien voulu présider ce jury entre deux voyages à l'autre bout du monde. Je les

remercie tous les trois.

Merci à tous ceux, qui, croisés au LMC, au LEGI ou au LODYC, ont bien voulu répondre à mes multiples questions scientifiques, informatiques, administratives ou autres, Eric Blayo, Laurent Debreux, Patrick Witomski, Bertrand Michaux, Emmanuel Maitre, Pierre Brasseur, Jean-Michel Brankart, Vincent Echevin, Christophe Menkès, Valère Ca-
laud, Jacques Laurent, Laurence Viry, Claudine Meyrieux, ... et tous les autres. Merci aux différents thésards que j'ai cotoyé, Stephanie Magri, Sophie Durbiano et Arthur Vidard, Delia Jiroveanu et Philippe Poncet, ... et tous les autres.

J'en viens maintenant à mes parents, mes frères, et différents proches. Tous ont contribués plus ou moins directement à la réalisation de cette thèse par leur soutien, leurs conseils ou tout simplement leur présence.

Maman, Papa vous m'avez toujours soutenu dans tous les sens du terme. Je ne vous remercierai jamais assez.

Clément dans un an se sera ton tour de passer sur le gril du jury. Je viendrai boire le champagne.

Cyrille, dans ta prestigieuse école parisienne, j'espère que tu trouveras ta voie.

Quentin, le bac dans deux ans, il va falloir un jour commencer à songer à bosser un peu. Enfin j'aimerais saluer différents amis et compagnons de cordée qui m'ont permis, entre autres, de me vider la tête le weekend sur les falaises tout en allongeant ma liste de voies dans le huitième degré, Luca, Victor, Laurent, Manue, Sabot, Denis, Rémi et Hélène, Tâm et Julie, Laurent et Isabelle, et bien sûr la plus importante d'entre toutes, Valérie.

Table des matières

1	Introduction	9
1.1	Le problème direct: modélisation des écosystèmes marins	9
1.1.1	Motivations	9
1.1.2	Les modèles biologiques	12
1.1.3	La station DYFAMED	14
1.2	Le problème inverse	15
1.2.1	Estimation des variables d'état	16
1.2.2	Estimation des paramètres	17
1.3	Organisation du manuscrit	20
2	Le modèle physique d'océan - les modèles biologiques NPZD et NNPZD-DOM	23
2.1	Introduction	23
2.2	Le modèle physique d'océan	24
2.2.1	Les équations primitives	25
2.2.2	Turbulence géophysique	28
2.2.3	Passage au 1D	31
2.2.4	Conditions aux limites	33
2.2.5	Bilan final des équations du modèle physique	35
2.3	Les modèles biologiques NPZD et NNPZD-DOM	36
2.3.1	Les modèles dans la couche de surface	37
2.3.2	Le modèle sous la couche euphotique	44

3	Etude analytique	47
3.1	Introduction	47
3.2	Le modèle NPZD	48
3.2.1	Rappel des équations du modèle	48
3.2.2	Commentaires et hypothèses	49
3.3	Preliminaires	51
3.3.1	Espaces fonctionnels	51
3.3.2	Transformation préliminaire du système et forme bilinéaire $a(t, \mathbf{C}, \mathbf{C}')$	53
3.3.3	Les termes de réaction du second membre et l'opérateur non-linéaire $\mathbf{G}$	55
3.3.4	Formulation variationnelle	57
3.4	Existence	57
3.4.1	Le problème approché	58
3.4.2	Passage à la limite lorsque $n \rightarrow \infty$	62
3.5	Unicité	66
3.5.1	Hypothèse et propriété supplémentaires	66
3.5.2	Unicité de la solution	68
3.5.3	Remarque sur la simplification du résultat d'existence	69
3.6	Positivité	71
3.7	Cas du modèle NNPZD-DOM	74
3.8	Annexe: existence-unicité par la méthode des semi-groupes	77
3.8.1	Propriétés de l'opérateur linéaire, A , défini par les termes de diffusion	78
3.8.2	Existence et unicité d'une solution pour le modèle NPZD	85
3.8.3	Dépendance de la solution par rapport aux paramètres	94
4	Etude numérique du modèle NPZD simplifié	97
4.1	Introduction	97
4.2	Généralités sur la discrétisation	98
4.2.1	Le cadre	98
4.2.2	Définitions: convergence, consistance et stabilité	99
4.2.3	Théorème d'équivalence de Lax	100

4.2.4	Condition de stabilité	100
4.3	Un premier schéma pour le modèle NPZD	101
4.3.1	Discrétisation	101
4.3.2	Convergence du schéma	104
4.4	Un second schéma	108
4.4.1	Motivation	108
4.4.2	Nouvelle discrétisation	109
4.4.3	Commentaires	111
5	Cadre de travail, outils et méthodologie pour le problème inverse	113
5.1	Cadre de travail	113
5.1.1	Validation de la simulation physique de référence	113
5.1.2	Paramétrisation hivernale	118
5.1.3	Observations DYFAMED et sorties du modèle	119
5.2	Assimilation variationnelle, modèles tangent et adjoint	120
5.3	Différentiation automatique	123
5.3.1	Codes Tangent et Adjoint	124
5.3.2	Modèle biologique et différentiation automatique	127
5.3.3	Calcul du gradient	128
5.4	Minimisation	131
5.5	Un problème inverse non-linéaire	134
6	Assimilation des données de la station DYFAMED	139
6.1	Introduction	142
6.2	Description of the model and data	146
6.2.1	Model description	146
6.2.2	The DYFAMED simulation set-up	149
6.2.3	The DYFAMED data set	150
6.2.4	An initial simulation	152
6.3	Method	152
6.3.1	Control variables and cost function	152

6.3.2	Automatic differentiation	155
6.3.3	Sensitivity analysis method	155
6.4	Results	157
6.4.1	Description of the experiments	157
6.4.2	Twin experiment sensitivity analysis	157
6.4.3	Twin experiment data assimilation	158
6.4.4	Assimilation experiments using real (observed) data	160
6.5	Discussion	165
6.5.1	Validation against independent data	165
6.5.2	Stock data and flux values - Case 2c	166
6.6	Conclusions	167
7	Conclusion générale et perspectives	185

Chapitre 1

Introduction

1.1 Le problème direct: modélisation des écosystèmes marins

1.1.1 Motivations

Le dioxyde de carbone, CO_2 , est un des principaux gaz à effet de serre. Les activités humaines comme les combustions industrielles et agricoles, le transport, le chauffage, ou encore la déforestation, ont fait fortement augmenter le contenu atmosphérique en CO_2 . Cet accroissement est susceptible de modifier le climat de la planète et l'un des objectifs de la recherche contemporaine dans le domaine de l'environnement est d'arriver à comprendre et anticiper les perturbations du climat induite par l'homme. L'océan est un puits majeur du CO_2 qui absorberait environ un tiers des émissions anthropiques (Siegenthaler *et al.* [99]). Ainsi, comprendre et quantifier les mécanismes océaniques responsables du piègeage du CO_2 sont devenus les principaux objectifs de grands programmes internationaux tels que JGOFS (Joint Global Ocean Flux Study). Dans cette démarche globale, l'étude de la biologie océanique est une étape importante.

En effet, le phytoplancton, en fixant au cours de la photosynthèse le dioxyde de carbone dissous dans les eaux de surface de l'océan, donne un rôle prépondérant au système océanique en tant que mécanisme de régulation du cycle du carbone. La matière

organique ainsi fabriquée piège le carbone et monte dans le réseau trophique par le jeu des prédatons. Puis par une série de processus de mortalité des espèces, de rejet de détritns organiques, de sédimentation ou encore d'entraînement par la circulation, ces composés organiques quittent la surface et sont exportés vers les profondeurs de l'océan. C'est ce que l'on appelle la pompe biologique (Longhurst et Harrison [76]) dont l'effet est de maintenir le CO_2 atmosphérique à un niveau plus bas que si l'océan était abiotique.

Une autre motivation à la modélisation des écosystèmes marins, toute aussi importante que la compréhension du cycle du carbone, est celle de l'exploitation durable et du management des ressources marines. La gestion de la pêche ou de l'aquaculture des espèces vivantes, végétales ou animales dans tous les milieux aquatiques est enjeu socio-économique fort. Les scientifiques doivent pouvoir donner à l'industrie halieutique des avis sur l'état des stocks de poissons et sur les objectifs de conservation, en plus de fournir de l'information sur les problèmes des écosystèmes marins. Le contrôle des ressources halieutiques doit passer par son étude hydrodynamique, bio-géochimique et biologique. Par exemple, la connaissance de la quantité de carbone exportée vers les niveaux trophiques supérieurs permet d'estimer dans une certaine mesure les stocks en poisson (Parson *et al.* [90]), et il apparaît de façon de plus en plus évidente (Legendre et Michaud [63]) que ces stocks diminuent. L'utilisation de modèles rendrait ainsi possible l'estimation du stock de poissons et pourrait s'avérer intéressante pour définir des stratégies de pêche permettant d'atteindre un équilibre entre la production de poissons et leur capture.

La variété et la variabilité, temporelle et spatiale, des écosystèmes rencontrés à travers les océans font de l'étude de la biologie océanique une tâche particulièrement compliquée.

Cette variabilité apparaît clairement sur les cartes de la chlorophylle de surface de l'océan mondial déduites de l'imagerie satellite (Fig. 1.1). Certaines régions comme l'Atlantique nord sont particulièrement riches en chlorophylle alors que d'autres comme les grands gyres subtropicaux sont beaucoup plus pauvres. La variabilité spatiale de la biologie résulte entre autre de la variabilité spatiale de la dynamique. La plupart des éléments qui interagissent dans les processus biologiques sont complètement assujettis à la dynamique qui les transporte. Cette dernière est d'échelles très différenciées puisqu'elle englobe des processus allant de la diffusion moléculaire jusqu'aux courants à l'échelle des

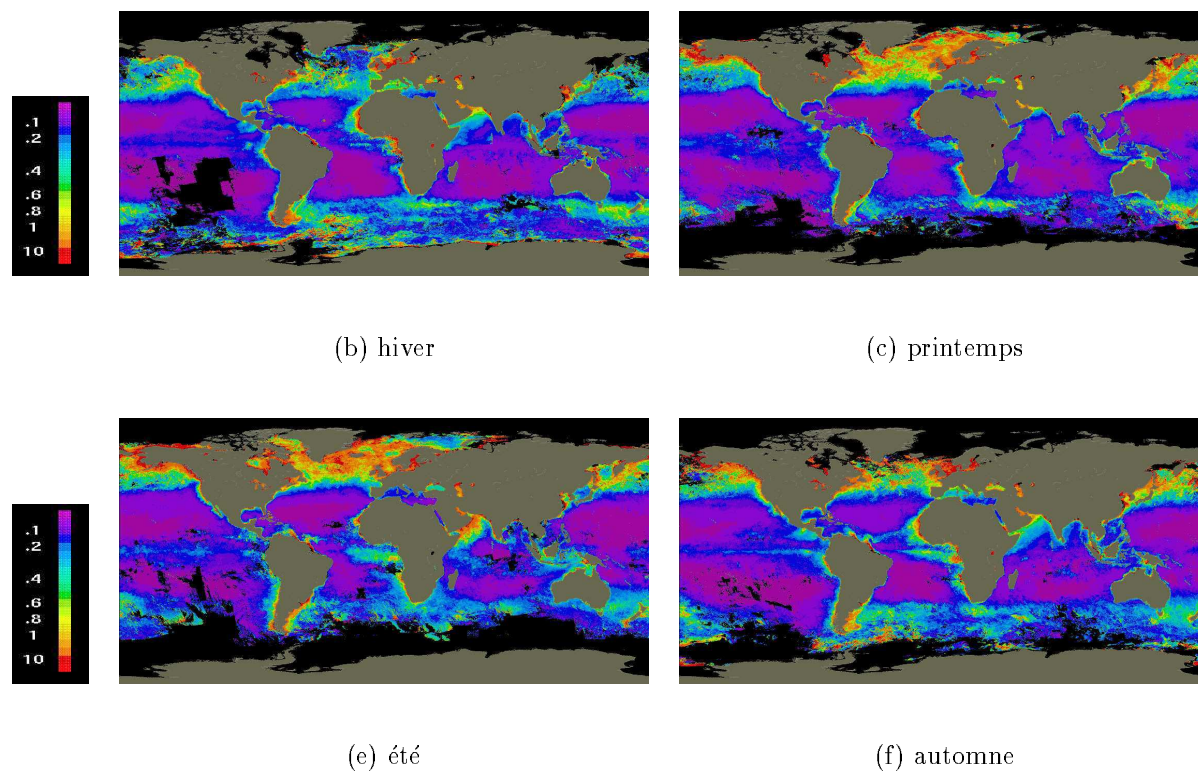


FIG. 1.1 – *Concentration en pigments phytoplanctoniques (mg/m^3). Images composées réalisées à partir des données CZCS (Coastal Zone Color Scanner) du satellite Nimbus-7 acquises entre novembre 1978 et juin 1986. Base de données SeaWiFS (<http://seawifs.gsfc.nasa.gov>).*

bassins. Ceci représente une grande difficulté et l'étude des processus biologiques à l'aide de modèles numériques ne peut s'envisager que dans le cadre d'une physique suffisamment bien représentée. Sous cette contrainte, une solution est de restreindre l'étude à une zone où les processus physiques peuvent être représentés de manière relativement simple et dans laquelle on dispose de suffisamment de données pour pouvoir valider le modèle. La station DYFAMED en Méditerranée nord-occidentale offre un cadre séduisant pour une telle démarche et c'est par cette voie que cette thèse est abordée. Avant de présenter dans la suite de ce chapitre introductif quelques caractéristiques de la station DYFAMED, nous donnons d'abord dans la section suivante les grandes lignes permettant de

comprendre comment sont construits les modèles biologiques.

1.1.2 Les modèles biologiques

Un moyen d'étudier les systèmes complexes est de les modéliser. Ce type d'approche est riche d'enseignements car construire un modèle exige de synthétiser la somme des connaissances accessibles à un moment donné sur un système et de sélectionner judicieusement les faits importants dans le temps et dans l'espace pour décrire un phénomène. Il existe de nombreux modèles biologiques et tous sont destinés à évoluer assez rapidement. De nouvelles expériences ou données vont mettre en évidence certains défauts et conduire à proposer un nouveau modèle. La mise au point d'un modèle biologique dépend en premier lieu des processus que l'on cherche à représenter et en second lieu d'un compromis entre sa complexité et les données dont on dispose pour valider les résultats du modèle. Ce travail de thèse s'est appuyé sur deux modèles développés au Laboratoire d'Océanographie Dynamique et de Climatologie (LODYC): les modèles NPZD et NNPZD-DOM (Lévy [66]; Foujols *et al.* [45]). Les équations qui les composent seront décrites au chapitre suivant. Dans la suite de cette section, nous présentons quelques généralités sur ces modèles et sur les processus qu'ils représentent.

Les modèles NPZD et NNPZD-DOM sont des modèles à compartiments. Les compartiments ou variables du modèle représentent le comportement moyen de différentes espèces biologiques. Dans le cas du modèle NPZD, par exemple, ce sont les nutriments, N, le phytoplancton, P, le zooplancton, Z, et les détritus, D. Les échanges entre ces compartiments sont décrits par des fonctions mathématiques simples et empiriques, incluant des constantes que l'on appelle les paramètres du modèle. Chaque terme d'échange entre deux compartiments représente un des processus que le modèle cherche à représenter et intègre l'effet résultant de tout un ensemble de mécanismes de nature et d'échelles temporelle et spatiale variées.

Les processus biologiques fondamentaux à comprendre et estimer pour étudier le cycle du carbone dans l'océan sont:

- la production primaire, c'est-à-dire la fabrication de matière organique ou encore la croissance du phytoplancton.

- l'export de cette matière organique de la surface vers les couches profondes de l'océan.
- la reminéralisation de la matière organique

Après l'éclairement, le principal facteur qui affecte la production primaire est la disponibilité en sels nutritifs, dont les plus limitants sont généralement les sels nutritifs azotés. La façon la plus élémentaire de modéliser la production primaire consiste donc à considérer comme seules variables le phytoplancton, P et les sels nutritifs, N (Taylor [106]). Un tel modèle est par nature incapable de rendre compte de l'export particulière de matière organique. Pour cela il faut introduire au minimum deux nouvelles variables, le zooplancton, Z , principal prédateur du phytoplancton, et les détritiques, D , ensemble des sous-produits organiques sous forme particulière constitués de pelotes fécales du zooplancton et d'organismes morts, qui vont en partie sédimenter hors de la couche de surface et en partie être reminéralisés sur place. A ce stade nous sommes arrivés à un modèle à quatre variables. Le modèle NPZD a été construit sur ce principe. C'est le modèle le plus simple permettant de rendre compte des trois processus biologiques précédemment cités. Nous en présentons une analyse mathématique au chapitre 3 et le prenons comme exemple afin d'illustrer la méthode d'intégration numérique utilisée dans la suite.

Ce type de modèle peut être sophistiqué en distinguant, sur des critères de taille ou d'espèce, plusieurs variables pour le phytoplancton, le zooplancton ou les détritiques, en distinguant les nitrates et l'ammonium parmi les sels nutritifs, ou encore en introduisant de nouvelles variables comme la matière organique dissoute, DOM, ou les bactéries. Ces sophistications sont introduites dans le but de représenter plus finement certains processus. De tels développements font l'objet de différents travaux de modélisation numérique et le modèle NNPZD-DOM en est un des fruits. C'est ce dernier, plus complexe que le modèle NPZD, mais présentant les mêmes caractéristiques de base, que nous utilisons dans la partie de ce travail consacrée à l'assimilation de données et à l'estimation des paramètres du modèle. En effet, plus le degré de complexité d'un modèle augmente plus celui-ci est sensé être réaliste mais plus il devient également difficile à régler. Le nombre de paramètres inconnus, c'est-à-dire les degrés de liberté du modèle augmentent mais les données, permettant de calibrer le modèle, restent, elles, les mêmes. La confrontation

avec les données est un point critique dans toutes les études de modélisation.

1.1.3 La station DYFAMED

Le programme DYFAMED (DYnamique des Flux Atmosphériques en MEDiterranée) fait partie intégrante de JGOFS et est concrétisé par l'existence d'une station océanique permanente située entre Nice et Calvi couplée à deux stations de prélèvement atmosphériques continentales. La zone centrale de la Mer Ligure où est installé le site d'observation DYFAMED (Fig. 1.2) bénéficie de certains atouts majeurs.

Tout d'abord elle se trouve la plupart du temps, hors de l'influence du courant Liguro-Provençal circulant le long des côtes (Bethoux *et al.* [10]) et protégée des transports latéraux (Marty [82]). On peut donc y négliger les apports advectifs horizontaux et le système peut alors être décrit par la seule dimension verticale. La modélisation 1D y est raisonnable et différents travaux y ont été consacrés (Lévy [66], Lévy *et al.* [67]; Mémery *et al.* [85]). Un deuxième atout, essentiel, du site DYFAMED est qu'il est représentatif de larges zones et conditions qui dominent l'océan mondial. On y trouve un échantillonnage assez complet de la diversité des processus qui interviennent dans le cycle océanique du carbone à l'échelle globale. Le site est soumis à des forçages météorologiques qui induisent une forte variabilité saisonnière du régime hydrologique. Cette dernière se répercute au

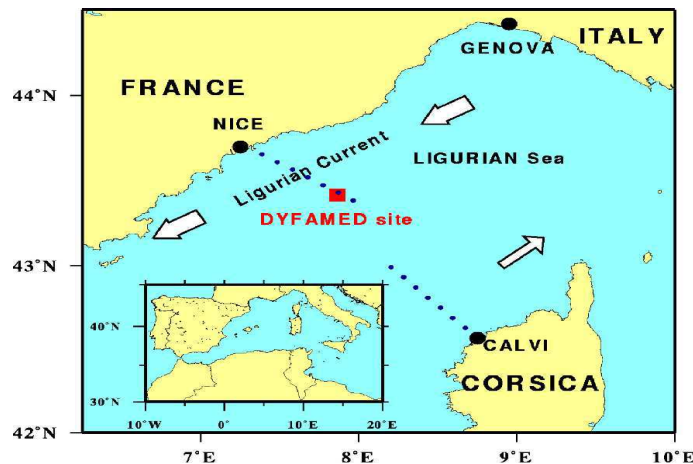


FIG. 1.2 – Positionnement de la station DYFAMED ([http://www.obs-
vlfr.fr/jgoofs2/sodyf/home.htm](http://www.obs-vlfr.fr/jgoofs2/sodyf/home.htm)).

niveau de la dynamique de la biologie et des flux exportés. Plusieurs régimes de production se succèdent dans cette zone. En hiver, la colonne d'eau est mélangée sur quelques centaines de mètres, les éléments nutritifs présents en grandes quantités au fond sont alors apportés vers la surface, mais la photosynthèse est inhibée par le manque de lumière et le mélange important. Dès la fin de l'hiver, avec la restratification de la colonne d'eau, et la disponibilité en énergie lumineuse, se produit une période de floraison printanière (bloom) importante. Les sels nutritifs, apportés par la convection profonde, sont rapidement consommés et la situation estivale est oligotrophe et caractérisée par la présence d'un maximum de subsurface en chlorophylle. La biogéochimie du site est contrainte par la dynamique, a priori verticale. Il constitue donc un excellent compromis entre la simplicité de la dynamique, la représentativité des régimes biologiques et la disponibilité en données.

1.2 Le problème inverse

Tout problème inverse cherche à combiner, si possible de manière optimale, des observations que l'on peut avoir sur un phénomène ou un système et un modèle théorique de ce système. Les objectifs sont variés et comprennent par exemple l'amélioration des modèles, l'identification de paramètres, la reconstruction des forçages du système, la prévision ou encore la définition de systèmes d'observation. De façon générale, les méthodes inverses ont pour but d'estimer numériquement certaines caractéristiques d'un système réel. La stratégie consiste à ajouter des informations, apportées par les observations, à celles qui sont incluses dans les équations du modèle. Une telle procédure est appelée assimilation de données. En océanographie physique ainsi qu'en biogéochimie marine on distingue deux types de problèmes inverses. Pour le premier, les caractéristiques du système que l'on cherche à estimer sont les valeurs des variables d'état à une date donnée, alors que pour le second, on cherche à estimer les paramètres du modèle.

1.2.1 Estimation des variables d'état

Ce premier type de problème inverse a été et est toujours largement étudié en météorologie et en océanographie physique. Dans ce domaine, les modèles sont basés sur des lois physiques que l'on peut considérer comme exactes relativement aux lois phénoménologiques utilisées en biogéochimie. Cependant, en raison du caractère chaotique des écoulements, à cause des termes non-linéaires, des erreurs d'approximation induites par le choix des échelles représentées par les modèles et des erreurs dans la paramétrisation de ces échelles, il est nécessaire de corriger régulièrement les prévisions de l'état de l'océan afin de limiter la divergence par rapport à son état réel.

Différentes méthodes sont utilisées pour résoudre ce type de problème. La plupart d'entre elles ont été initialement développées en météorologie et ont ensuite été appliquées en océanographie. On les classe généralement en deux groupes, d'un côté les méthodes de lissage, et de l'autre les méthodes de filtrage (Bennett [8]). Une méthode de filtrage n'utilise que l'information issue d'observations antérieures au temps t et au temps t pour réactualiser l'état du modèle à ce temps t . On peut alors construire des algorithmes séquentiels, dans lesquels le modèle est intégré jusqu'à une date de mesure et mis à jour à cette date avant d'être intégré à nouveau. Avec une méthode de lissage, l'estimation de l'état au temps t , peut utiliser le modèle et toutes les observations disponibles qu'elles soient antérieures ou postérieures au temps t .

Parmi les méthodes de lissage et leur application en océanographie, on trouve la méthode variationnelle (Le Dimet [62], Long et Thacker [74], [75], Luong *et al.* [77]), l'interpolation optimale (De Mey [32]) ou encore la méthode des représentants (Bennett [8]). Parmi les méthodes séquentielles on trouve essentiellement le filtre de Kalman [57], initialement développé pour des dynamiques linéaires, et ses variantes, mieux adaptées au caractère non-linéaire des modèles océanographiques, comme le filtre de Kalman étendu (EKF), le filtre de Kalman d'ensemble (EnKF) proposé par Evensen [39], ou encore le filtre SEEK (Singular Evolutive Extended Kalman filter) proposé par Pham *et al.* [92]. Toutes ces différentes méthodes présentent de nombreuses similitudes du point de vue théorique (Wunsch [111]).

Le problème de l'estimation des variables d'état a également récemment été abordé

en biogéochimie marine par différentes méthodes. Une des toutes premières études de ce type est celle de Armstrong *et al.* [4] qui utilise une simple méthode de nudging pour contraindre le modèle d'écosystème de Fasham *et al.* [41] avec des données de chlorophylle de surface CZCS (Coastal Zone Colour Scanner). Différentes méthodes de filtrage ont également été testées. Avec des modèles d'écosystème 1D tout d'abord, les travaux de Breuillin *et al.* [12] et de Eknes et Evensen [37] utilisent le filtre EnKF, Magri [80] utilise le filtre SEEK. Dans le cadre du projet européen DIADEM, ces méthodes ont été testées sur un modèle 3D, le modèle MICOM (Bleck *et al.* [11]) auquel est couplé une extension du modèle biogéochimique de Fasham *et al.* [41] (Drange [33], [34]). Sur ce sujet on peut noter les travaux utilisant le filtre SEEK (Carmillet *et al.* [18]) et ceux utilisant le filtre EnKF (Natvik [89]).

Le but principal de toutes ces études n'est pas de comprendre en détail, d'un point de vue biogéochimique, ce qui se passe dans les modèles, ce qui est plutôt l'objectif des modélisateurs biogéochimistes et du deuxième type de problème inverse. Leur objectif est d'utiliser un modèle et des observations (principalement les données satellitales de couleur de l'océan, c'est-à-dire la chlorophylle en surface) pour obtenir des simulations et des prévisions correctes.

Pour terminer ce paragraphe concernant l'estimation des variables d'état, mentionnons également les travaux menés par le projet COMORE de l'INRIA Sophia Antipolis. L'un des objectifs de ce projet est d'appliquer les méthodes de l'automatique à certains modèles biologiques. Ces études ne concernent pas des modèles aux échelles de l'océan ou d'une colonne d'eau, mais des modèles 0D. En effet, des données issues de bioréacteurs en laboratoire sont utilisées. La construction et l'utilisation d'observateurs, outils de l'automatique, permettent de reconstituer l'évolution des différentes variables biologiques à partir de certaines mesures.

1.2.2 Estimation des paramètres

Ce travail de thèse s'intéresse notamment au problème de l'estimation des paramètres d'un modèle d'écosystème marin. Si l'on considère du point de vue de la terminologie que l'estimation des conditions initiales d'un modèle d'océan n'est pas de l'estimation de

paramètres mais rentre dans le cadre du premier problème inverse (on parle alors plutôt de contrôle des conditions initiales), ce type de problème est relativement peu abordé en océanographie physique où l'aspect paramétrisation plus ou moins empirique des modèles est moins important. On peut tout de même noter certains travaux dans lesquels les auteurs cherchent à estimer différents paramètres comme la viscosité turbulente (Leredde *et al.* [65], Eknes et Evensen [36]), les conditions aux limites (Lellouche *et al.* [64]) ou encore le flux de chaleur en surface (Roquet *et al.* [96]). En biogéochimie de l'océan, les modèles ne reposent sur aucune loi exacte et les erreurs de prévision peuvent s'expliquer en grande partie par une mauvaise paramétrisation des processus, ou par un mauvais choix des valeurs des paramètres.

Ainsi la structure même des modèles biologiques motive l'étude du problème d'estimation de paramètres. Ces derniers sont généralement nombreux et leurs valeurs sont mal connues. En effet, ils ne représentent souvent rien de mesurable physiquement car les compartiments des modèles sont des variables hautement intégrées représentant chacune diverses espèces. Pour des raisons de simplicité, la plupart des travaux publiés sur ce sujet se font dans un cadre 0D. Le modèle est alors réduit à un système d'équations différentielles ordinaires. La méthode consiste à définir une fonction coût, dépendant des paramètres du modèle et mesurant l'écart entre un jeu de données et les prévisions du modèle. Il s'agit ensuite de minimiser cette fonction coût afin de trouver les valeurs optimales des paramètres. Certains problèmes apparaissent.

Tout d'abord, se pose le choix de la méthode de minimisation. En effet les non-linéarités des modèles biologiques donne un caractère très non-linéaire au problème inverse d'estimation de paramètres (Evensen *et al.* [40]). Ainsi, la convexité de la fonction coût ne peut être garantie et celle-ci peut éventuellement présenter des minima locaux pouvant interdire à un algorithme de descente classique de converger vers le minimum global. Pour cette raison certains auteurs ont testé différents algorithmes d'optimisation globale comme le recuit-simulé ou les algorithmes génétiques (Matear [84], Hurtt et Armstrong [54], Athias [5]). Néanmoins les coûts de calcul de ces algorithmes semblent prohibitifs pour espérer les implémenter rapidement sur un modèle 3D. Ainsi, dans d'autres travaux sur le sujet sont utilisés des algorithmes de descentes plus classiques d'ordre 0

ou 1, c'est-à-dire qui nécessitent ou non le calcul du gradient. Une des difficultés, en effet est le calcul du gradient de la fonction coût. La méthode des directions conjuguées de Powell (Fasham et Evans [42]) ou encore un schéma itératif de Gauss-Newton (Prunet *et al.* [94], [93]) permet de l'éviter. Concernant les études utilisant une méthode de type gradient, le modèle adjoint est généralement utilisé (Fennel *et al.* [44], Gunson *et al.* [51], Lawson *et al.* [61], [60], Schartau *et al.* [97], Spitz *et al.* [101], [100]).

Un deuxième problème provient de la capacité intrinsèque des modèles à reproduire des observations réelles. Il se peut qu'aucun jeu de paramètres ne permette au modèle de reproduire correctement les données. Un modèle peut par exemple souffrir d'une physique pas suffisamment bien représentée. Contrairement à l'océanographie physique, la définition d'un état initial n'est pas en général une motivation très forte en biogéochimie marine. Néanmoins, si les conditions initiales sont trop inexactes, les valeurs trouvées des paramètres chercheront à compenser l'erreur introduite par les conditions initiales (Evensen [40]). Nous verrons dans notre cas particulier que les conditions hivernales en nitrates jouent un rôle important dans la procédure d'assimilation de données. Un modèle peut également souffrir de paramétrisations incorrectes. Une des conclusions de Fennel *et al.* [44] est qu'une analyse de sensibilité doit toujours être réalisée afin de déceler d'éventuelles inconsistences entre le modèle et les données. Prunet *et al.* [94] montrent que leur modèle est trop complexe pour permettre une estimation robuste de ses paramètres. Gunson *et al.* [51], montrent que certains paramètres peuvent varier géographiquement. En fait, le problème d'assimilation de données par estimation de paramètres peut être vu comme de l'aide à la modélisation dans la mesure où sa résolution peut permettre de détecter ce qui doit être amélioré dans le modèle.

Un troisième problème est celui des données. Tout d'abord, leur densité spatiale et temporelle est très faible relativement aux degrés de libertés des modèles biologiques. Mais le plus important est que les modèles ont généralement été construits dans le but de quantifier des flux de matière, alors que les données les plus simples à obtenir représentent les concentrations de certains compartiments des modèles. Les mesures de flux sont difficiles à obtenir. Mesurer la production primaire se fait par des incubations in-situ et mesurer les flux exportés se fait lors de campagnes de déploiement de trappes

à sédiments. Obtenir des observations précises des flux est difficile étant données à la fois les conditions météorologiques et la méticulosité exigée par certaines mesures. Les erreurs associées aux mesures de flux sont généralement assez importantes (Richardson [95], Buesseler *et al.* [15], [16]). Ainsi, d'un point de vue biogéochimique, un objectif majeur est de pouvoir obtenir à l'aide d'un nombre limité de mesures de concentrations et de modèles non-linéaires aux paramètres mal connus, des estimations correctes des flux.

Pour conclure et compléter ce paragraphe introductif, rappelons que si le problème d'estimation de paramètres par la méthode de l'adjoint est relativement récent en biogéochimie marine, il a déjà été largement étudié pendant les vingt dernières années dans d'autres domaines d'application comme l'hydrologie ou encore les réservoirs de pétrole (voir, par exemple, Carrera et Neuman [19], [20], [21], Yeh [112], Cushman-Roisin [29]), Seinfeld et Kravaris [98], Sun et Yeh [102], [103]). La communauté mathématique s'est également investie dans ces sujets. On notera tout particulièrement les travaux de Chavent [22], [23], [24], [25], qui ont été parmi les premiers à proposer d'utiliser la méthode adjointe pour résoudre le problème d'identification de paramètres. Dans ces travaux sont également mis en avant le caractère mal posé du problème et la nécessité d'utiliser des termes de régularisation.

1.3 Organisation du manuscrit

Après ce premier chapitre introductif, le manuscrit est organisé de la manière suivante:

- Au chapitre 2, sont présentés le modèle physique d'océan et les deux modèles biologiques NPZD et NNPZD-DOM. Concernant le modèle physique, on part des équations primitives 3D et du modèle de turbulence utilisés dans le code OPA, pour passer au modèle 1D. Les équations des modèles biologiques sont ensuite décrites en détail.
- Le chapitre 3 concerne l'étude de l'existence, l'unicité et de la positivité d'une solution des modèles biologiques. Le cas du modèle NPZD est traité de manière détaillée. Le résultat d'existence-unicité est obtenu par deux méthodes différentes, une méthode faisant intervenir un problème approché et un théorème de point fixe,

et la méthode des semi-groupes.

- Au chapitre 4, est présenté le schéma de discrétisation semi-implicite utilisé. On détaille ensuite la preuve de la convergence du schéma dans le cas du modèle NPZD.
- Le problème d'assimilation de données par estimation de paramètres est abordé au chapitre 5. Dans ce dernier on met en place le cadre travail (à savoir la simulation physique à la station DYFAMED servant de support à la simulation biologique) et les outils informatiques nécessaires à la résolution numérique du problème inverse (à savoir les codes linéaires tangent et adjoint).
- Enfin, au chapitre 6, différentes expériences d'assimilation de données sont menées et analysées.

Chapitre 2

Le modèle physique d'océan - les modèles biologiques NPZD et NNPZD-DOM

2.1 Introduction

Un modèle couplé océan-biogéochimie est composé de deux éléments. Le premier est le modèle physique d'océan. Il sert de support au deuxième, le modèle biologique. Il faut noter, ici, la grande différence de maturité entre le niveau atteint par les modèles physiques et celui des modèles biologiques. La dynamique produite par les modèles physiques est relativement bien connue et a atteint un degré de réalisme incomparable à celui des modèles biologiques, beaucoup plus jeunes. Les traceurs passifs, variables des modèles biologiques, sont transportés par la dynamique physique, mais, en première approximation, ne l'influencent pas.

Nous présentons donc pour commencer le modèle d'océan que nous utilisons dans les expériences numériques de la suite de ce mémoire. S'il n'est que 1D, il n'en est pas pour autant particulièrement simple. La modélisation de la turbulence ainsi que la prise en compte de conditions aux limites réalistes en surface sont des aspects complexes du modèle dans la pratique et nous détaillons ici l'approche utilisée.

Nous présentons ensuite deux modèles biologiques développés au LODYC. Le premier est le plus simple. Il est constitué de quatre variables d'état et nommé NPZD (pour Nutriments, Phytoplancton, Zooplancton et Détritus). Nous l'utiliserons pour l'analyse mathématique et numérique des deux chapitres suivants. Le second est plus complexe et sans doute plus réaliste. Il est constitué de six variables et nommé NNPZD-DOM (pour NO_3 , NH_4 , Phytoplancton, Zooplancton, Détritus et Matière Organique Dissoute). Il sera utilisé dans les expériences numériques d'assimilation de données présentées à la fin de ce travail.

2.2 Le modèle physique d'océan

Le modèle physique constitue le support sur lequel vont ensuite évoluer les variables biologiques. Il simule l'évolution en temps et en espace de la vitesse, la température, la salinité et l'énergie cinétique turbulente. Toute cette étude a été réalisée en dimension 1. L'océan est réduit à une colonne d'eau turbulente dans laquelle l'advection et la diffusion horizontale n'interviennent pas. Le seul processus dynamique pris en compte est la diffusion verticale. Le coefficient de diffusion (noté K_T) se calcule à partir de l'énergie cinétique turbulente par le même schéma de fermeture que celui utilisé dans OPA, le modèle aux équations primitives de l'océan développé au LODYC (Foujols *et al.* [45]). Ce coefficient de diffusion est une sortie du modèle physique et une entrée du modèle biologique. Il constitue toute la physique représentée dans le modèle biologique.

Nous donnons dans la suite les grandes lignes permettant de comprendre d'où provient le modèle que nous avons utilisé. Dans son ouvrage, Lewandosky [69], donne une vision très mathématique de la modélisation de l'océan par les équations primitives et effectue, dans une certaine mesure, l'analyse du système après y avoir apporté quelques simplifications.

On commence, ici, par introduire les équations primitives générales en dimension 3, après quoi on aborde la modélisation de la turbulence 3D. On finit par le passage à la dimension 1.

2.2.1 Les équations primitives

L'évolution dynamique et thermodynamique de l'océan concerne les variables suivantes:

- la vitesse $\mathbf{U}$ du fluide,
- la température T et la salinité S ,
- la pression p ,
- la densité ρ , qui est une fonction de T , S et p .

Les équations décrivant la circulation océanique sont dérivées du système d'équations de Navier-Stokes appliquées à un milieu tournant et dans le cadre de certaines approximations et hypothèses:

- Approximation de sphéricité de la terre,
- Approximation de la couche mince. La profondeur de l'océan est négligeable devant le rayon terrestre,
- Hypothèse de Boussinesq. Les variations de la masse volumique sont négligées dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement horizontale, et dans l'équation de conservation de la masse,
- Hypothèse hydrostatique. Seuls la gravité et le gradient vertical de pression sont pris en compte dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement verticale,
- Hypothèse du toit rigide. La surface moyenne de l'océan est supposée fixée (cette hypothèse n'est plus prise en compte dans la version actuelle d'OPA à surface libre).

On considère dans la suite une base orthogonale de l'espace $(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$ où $\mathbf{k}$ est normal à la surface de l'océan. Reprenant les notations de Lewandosky [69] et pour tenir compte de l'anisotropie du milieu, on note dans la suite:

$$\Delta_c = \Delta + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \text{ avec } \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}.$$

On utilise la même convention pour les autres opérateurs différentiels.

On note également $\mathbf{U} = \mathbf{v} + w\mathbf{k} = u\mathbf{i} + v\mathbf{j} + w\mathbf{k}$

Enfin l'on note, pour ψ quelconque, $\frac{D\psi}{Dt} = \frac{\partial\psi}{\partial t} + (\mathbf{U}\nabla_c)\psi$.

Loi de conservation de la masse

Le principe de conservation de la masse s'écrit:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \operatorname{div}_c \mathbf{U} = 0.$$

L'approximation de Boussinesq consiste à considérer:

$$\operatorname{div}_c \mathbf{U} = 0.$$

Loi de conservation du sel et de la chaleur

L'approximation de Boussinesq permet de négliger les termes de compressibilité dans ces équations et elles s'écrivent:

$$\begin{aligned} \frac{DS}{Dt} &= K_S \Delta_c S, \\ \frac{DT}{Dt} &= K_T \Delta_c T. \end{aligned}$$

K_S et K_T sont les diffusivités saline et thermique .

Equation d'état

La densité ρ se déduit, par définition, de la mesure de la salinité, de la température et de la pression. On écrit une équation d'état non linéaire et empirique $\rho = \rho(T, S, p)$.

Il est souvent considéré, du fait des faibles variations de la densité, que l'on peut négliger la dépendance en pression et linéariser autour d'une valeur de référence ρ_0 . En tenant compte du fait que la densité augmente avec la salinité et diminue lorsque la température augmente, on écrit:

$$\rho = \rho_0 + \rho_S(S - S_0) - \rho_T(T - T_0)$$

où ρ_S , ρ_T , S_0 et T_0 sont des constantes positives.

Néanmoins cette équation d'état n'est souvent pas très satisfaisante et dans OPA est utilisé l'équation d'état plus complexe de Jacket et McDougall [56] qui est polynomiale par rapport à S , T et p .

Equation du mouvement

C'est l'équation de Navier-Stokes pour un fluide Newtonien, considéré comme incompressible, soumis à la force de Coriolis et à la force de gravité:

$$\rho \frac{D\mathbf{U}}{Dt} = -\nabla_c p + \mu \Delta_c \mathbf{U} - \rho g \mathbf{k} - \rho f \mathbf{k} \times \mathbf{U}$$

où f est le facteur de Coriolis et μ la viscosité moléculaire de l'eau. Dans cette équation on considère à nouveau que ρ est constant et vaut ρ_0 . De plus, après des considérations sur les ordres de grandeurs des différents termes, la composante verticale se réduit à l'équation hydrostatique:

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g$$

Bilan des équations primitives

Le système des équations primitives pour l'océan s'écrit:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p + K_V \Delta_c v - f \mathbf{k} \times \mathbf{v} \\ \frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g \\ \text{div}_c(\mathbf{U}) = 0 \\ \frac{DT}{Dt} = K_T \Delta_c T \\ \frac{DS}{Dt} = K_S \Delta_c S \\ \rho = \rho(T, S, p) \end{array} \right. \quad (2.1)$$

où K_V vaut μ/ρ .

Il nous faut encore modifier ce système en modélisant la turbulence sous maille. Il nous restera alors à y adjoindre des conditions aux limites et le réduire à la dimension 1 pour obtenir notre modèle de couche de mélange océanique.

2.2.2 Turbulence géophysique

Introduction

Les propriétés physico-chimique du milieu marin (vitesse, densité, température, salinité, ...) sont caractérisées par une variabilité, plus ou moins forte suivant les régions, autour d'un état moyen. Ainsi la valeur d'une variable d'état ψ quelconque correspond à la somme de sa valeur moyenne ψ_m et de sa fluctuation ψ' , $\psi = \psi_m + \psi'$. Les mouvements d'échelle inférieure à la grille du modèle ne peuvent être explicitement résolus. Afin de pouvoir les représenter dans les modèles numériques, on les modélise par des termes supplémentaires communément appelés termes de Reynolds et paramétrés comme des flux diffusifs. Ils doivent être exprimés en fonction des éléments de plus grandes échelles pour fermer le système d'équations.

Si l'on moyenne le système (2.1), les fluctuations des termes linéaires disparaissent tandis que celles des termes non-linéaires subsistent sous forme de moyenne du produit des fluctuations. C'est par l'intermédiaire des ces termes que les fluctuations interagissent avec l'écoulement moyen.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathbf{v}_m}{\partial t} + (\mathbf{U}_m \nabla_c) \mathbf{v}_m + \text{div}(\mathbf{v}' : \mathbf{v}')_m + \frac{\partial(w' \mathbf{v}')_m}{\partial z} \\ = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p_m + K_V \Delta \mathbf{v}_m + K_V \frac{\partial^2 \mathbf{v}_m}{\partial z^2} - f \mathbf{k} \times \mathbf{v}_m \\ \frac{\partial p_m}{\partial z} = -\rho_m g \\ \text{div}(\mathbf{v}_m) + \frac{\partial w_m}{\partial z} = 0 \\ \frac{\partial T_m}{\partial t} + (\mathbf{U}_m \nabla_c) T_m + \text{div}(\mathbf{v}' T')_m + \frac{\partial(w' T')_m}{\partial z} \\ = K_T \Delta T_m + K_T \frac{\partial^2 T_m}{\partial z^2} \\ \frac{\partial S_m}{\partial t} + (\mathbf{U}_m \nabla_c) S_m + \text{div}(\mathbf{v}' S')_m + \frac{\partial(w' S')_m}{\partial z} \\ = K_S \Delta S_m + K_S \frac{\partial^2 S_m}{\partial z^2} \\ \rho_m = \rho_m(T_m, S_m, p_m) \end{array} \right. \quad (2.2)$$

Modélisation des flux turbulents

Les nouveaux termes qui sont apparus représentent l'action de flux turbulents. L'hypothèse de modélisation consiste à considérer que ces flux sont responsables d'une diffusion analogue à la diffusion moléculaire mais beaucoup plus efficace. Des arguments physiques font que l'on pose:

$$\left\{ \begin{array}{l} (\mathbf{v}' : \mathbf{v}')_m = -K_{V,h}^t \nabla \mathbf{v}_m, \quad (w' \mathbf{v}')_m = -K_{V,v}^t \frac{\partial \mathbf{v}_m}{\partial z} \\ (\mathbf{v}' T')_m = -K_{T,h}^t \nabla T_m, \quad (w' T')_m = -K_{T,v}^t \frac{\partial T_m}{\partial z} \\ (\mathbf{v}' S')_m = -K_{S,h}^t \nabla S_m, \quad (w' S')_m = -K_{S,v}^t \frac{\partial S_m}{\partial z} \end{array} \right. \quad (2.3)$$

où $K_{V,h}^t$, $K_{V,v}^t$, $K_{T,h}^t$, $K_{T,v}^t$, $K_{S,h}^t$ et $K_{S,v}^t$ sont les viscosités turbulentes.

Le système d'équations primitives devient:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathbf{v}_m}{\partial t} + (\mathbf{U}_m \nabla_c) \mathbf{v}_m = \\ \text{div}((K_V + K_{V,h}^t) \nabla \mathbf{v}_m) + \frac{\partial}{\partial z}((K_V + K_{V,v}^t) \frac{\partial \mathbf{v}_m}{\partial z}) - \frac{1}{\rho_0} \nabla p_m - f \mathbf{k} \times \mathbf{v}_m \\ \frac{\partial p_m}{\partial z} = -\rho_m g \\ \text{div}(\mathbf{v}_m) + \frac{\partial w_m}{\partial z} = 0 \\ \frac{\partial T_m}{\partial t} + (\mathbf{U}_m \nabla_c) T_m = \text{div}((K_T + K_{T,h}^t) \frac{\partial T_m}{\partial z}) + \frac{\partial}{\partial z}((K_T + K_{T,v}^t) \frac{\partial T_m}{\partial z}) \\ \frac{\partial S_m}{\partial t} + (\mathbf{U}_m \nabla_c) S_m = \text{div}((K_S + K_{S,h}^t) \frac{\partial S_m}{\partial z}) + \frac{\partial}{\partial z}((K_S + K_{S,v}^t) \frac{\partial S_m}{\partial z}) \\ \rho_m = \rho_m(T_m, S_m, p_m) \end{array} \right. \quad (2.4)$$

Tout le problème est de calculer ces viscosités turbulentes. Concernant l'océan, l'habitude est de prendre les viscosités horizontales, $K_{V,h}^t$, $K_{T,h}^t$ et $K_{S,h}^t$, constantes. Leur valeur numérique est déduite de l'expérience. On prend également $K_{T,v}^t = K_{S,v}^t$. En ce qui concerne les viscosités turbulentes verticales, on introduit une nouvelle variable, l'énergie cinétique turbulente, ϵ . C'est une quantité macroscopique qui va permettre la fermeture du système en donnant accès aux viscosités turbulentes verticales.

L'équation d'évolution pour e d'OPA

Nous ne détaillons pas ici la détermination de l'équation d'évolution satisfaite par e . On trouvera, toujours dans l'ouvrage de Lewandosky [69] un exposé clair des difficultés de ce problème et dans Madec *et al.* [79] les détails de l'implémentation dans OPA. Nous nous contentons dans ce qui suit de donner quelques points permettant de comprendre le phénomène.

Commençons par définir l'énergie cinétique turbulente par:

$$e = \frac{1}{2}(|\mathbf{v}'|^2 + |w'|^2)_m$$

On définit ensuite la fréquence de Brünt-Väisälä, N :

$$N^2 = -\frac{g}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial z}$$

N est l'inverse d'un temps et mesure la fréquence des oscillations verticales, engendrées par la turbulence, d'une particule fluide autour de sa position d'équilibre. C'est une fréquence de rappel. De toute évidence ceci n'est valable qu'aux endroits dits stables où $\frac{\partial \rho}{\partial z} \leq 0$. Dans ce cas $N^2 \geq 0$ et $N = \sqrt{N^2}$ à un sens. Aux lieux instables où $\frac{\partial \rho}{\partial z} \geq 0$, $N^2 \leq 0$, on ne peut plus en parler.

On définit enfin la fréquence de Prandtl M et le nombre de Richardson, R_i :

$$M^2 = \left\| \frac{\partial \mathbf{v}_m}{\partial z} \right\|^2$$

$$R_i = \frac{N^2}{M^2}$$

M décrit le cisaillement dynamique entre deux couches de fluides. R_i est sans dimension et mesure le rapport entre le cisaillement et la stratification. Si $R_i \ll 1$, la stratification n'est pas assez forte pour enrayer le transfert d'énergie de l'écoulement moyen vers la turbulence, c'est-à-dire l'écoulement est turbulent. Par contre lorsque $R_i > 1$, le milieu stratifié inhibe le développement de la turbulence.

L'équation d'évolution pour e , (2.5), est celle utilisée dans le modèle OPA.

$$\frac{\partial e}{\partial t} = K_{V,v}^t M^2 - K_{T,v}^t N^2 + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{V,v}^t \frac{\partial e}{\partial z} \right) - c_d \frac{e^{3/2}}{l_d} \quad (2.5)$$

L'évolution de e résulte de:

- sa production par cisaillement: $+K_{V,v}^t M^2$

- sa destruction par stratification : $-K_{T,v}^t N^2$
- sa diffusion verticale : $+\frac{\partial}{\partial z}(K_{V,v}^t \frac{\partial e}{\partial z})$
- sa dissipation : $-c_d \frac{e^{3/2}}{l_d}$

De la connaissance de e on déduit,

$$K_{V,v}^t = K_{V,v}^t(e) = c_m l_m \sqrt{e}$$

et

$$K_{T,v}^t = K_{T,v}^t(e) = \frac{1}{P_{rt}} K_{V,v}^t.$$

$c_m = 0.1$ et $c_d = \sqrt{2}/2$ sont des constantes fixées expérimentalement.

l_m et l_d sont les longueurs caractéristiques du mélange vertical et de la dissipation. Une solution simple de modélisation peut être de prendre ces longueurs constantes. Dans OPA, elles sont déterminées par la formule: $l_m = l_d = \frac{\sqrt{2e}}{N}$.

P_{rt} est le nombre de Prandtl sans dimension. Il est fonction du nombre de Richardson R_i :

$$\begin{array}{lll} P_{rt} = 1 & si & R_i \leq 0.2 \\ P_{rt} = 10 & si & R_i \geq 2 \\ & & \text{transition linéaire} \end{array}$$

Pour éviter les instabilités numériques dues à des valeurs trop faibles des viscosités turbulentes lors de la résolution de (2.5), on prend en pratique:

$$K_{V,v}^t = \max(K_V, C_m l_m \sqrt{e}),$$

et

$$K_{T,v}^t = \max(K_T, \frac{1}{P_{rt}} K_{V,v}^t).$$

Ceci fait, on remplace dans le système (2.4), les termes du type $(K_V + K_{V,v}^t)$ par $K_{V,v}^t$.

2.2.3 Passage au 1D

Le passage à un modèle 1D s'effectue en supposant une homogénéité horizontale:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} = 0.$$

Suivant cette hypothèse, l'équation de continuité s'écrit:

$$\frac{\partial w_m}{\partial z} = 0.$$

La vitesse verticale est nulle au fond, et en surface (hypothèse du toit rigide). Elle est donc nulle partout, $w_m = 0$.

Il nous reste à effectuer une dernière approximation concernant la pression et la densité. Dans les équations, la pression ne sert qu'à calculer la densité, utile dans l'équation d'évolution de l'énergie cinétique turbulente. On suppose que dans l'expression de l'équation d'état pour ρ , la pression (en décibar) peut être approchée par la profondeur (en mètre), et l'on supprime l'équation pour la pression.

Finalement, en tenant compte des approximations et des hypothèses formulées, les variables d'état du modèle 1D de couche de mélange océanique sont (en supprimant l'indice m): les composantes horizontales de la vitesse u et v , la température T , la salinité S , l'énergie cinétique turbulente e et la densité ρ . Le système d'équations d'évolution pour ces différentes variables s'écrit:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_V \frac{\partial u}{\partial z} \right) + fv \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_V \frac{\partial v}{\partial z} \right) - fu \\ \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_T \frac{\partial T}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_T \frac{\partial S}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial e}{\partial t} = K_V M^2 - K_T N^2 + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_V \frac{\partial e}{\partial z} \right) - c_d \frac{e^{3/2}}{l} \end{array} \right. \quad (2.6)$$

avec,

$$\left\{ \begin{array}{l} K_V = \max(K_V^0, C_m l \sqrt{e}) \\ K_T = \max(K_T^0, \frac{1}{P_{rt}} K_V) \\ \rho = \rho(T, S, z) \\ N^2 = -\frac{g}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial z} \\ M^2 = \left\| \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial z} \right\|^2 \\ R_i = \frac{N^2}{M^2} \\ P_{rt} = P_{rt}(R_i) \\ l = \frac{\sqrt{2e}}{N} \end{array} \right. \quad (2.7)$$

2.2.4 Conditions aux limites

Conditions aux limites pour la vitesse

Au fond de la colonne d'eau (profondeur L), la vitesse est nulle:

$$\mathbf{v}|_{z=L} = 0.$$

En surface, l'océan est forcé par les phénomènes atmosphériques mécaniques (vent) et thermodynamiques (chaleur, évaporation, précipitation). Pour les vitesses cela se traduit par des conditions de Neumann:

$$(K_V \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial z})|_{z=0} = \frac{1}{\rho_0} \tau$$

où τ est la tension du vent.

Conditions aux limites pour la température

A la surface, on impose:

$$(K_T \frac{\partial T}{\partial z})|_{z=0} = \frac{Q}{\rho_0 c_p}$$

où c_p est la chaleur spécifique de l'eau. $Q = Q_0 + Q_r$ est le flux thermique ne pénétrant pas dans l'océan. Il est la somme de plusieurs contributions. Q_0 contient le chauffage par le soleil, le rayonnement radiatif, la chaleur sensible (échange de chaleur avec l'air) et

la chaleur latente (évaporation et précipitations). Q_r est un terme de rappel aux observations en température de surface (SST , pour Sea Surface Temperature) qu'il convient d'ajouter.

$$Q_r = q(T|_{z=0} - SST)$$

où q est une constante négative.

Une partie des radiations solaires pénètrent dans les quelques premiers mètres de l'océan. Dans OPA, ce phénomène est modélisé en rajoutant un terme à l'équation de la chaleur:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_T \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{1}{\rho_0 c_p} \frac{\partial I}{\partial z},$$

où

$$I = Q_{sr} [R e^{-z/\xi_1} + (1 - R) e^{-z/\xi_2}].$$

Q_{sr} est la part du flux de chaleur qui pénètre l'océan, R , ξ_1 et ξ_2 sont des constantes.

Au fond, on suppose qu'il n'y a pas d'échange de chaleur:

$$\frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=L} = 0$$

Conditions aux limites pour la salinité

Lorsqu'il y a évaporation en surface, la salinité augmente proportionnellement à S . En revanche, dans le cas de précipitation elle diminue proportionnellement à S . De la même manière que pour la température, on doit tenir compte de la salinité observée en surface (SSS , pour Sea Surface Salinity). On a donc:

$$\left(K_T \frac{\partial S}{\partial z} \right) \Big|_{z=0} = ES \Big|_{z=0}$$

où $E = E_0 + E_r \frac{(S|_{z=0} - SSS)}{S|_{z=0}}$. E_0 est une donnée climatologique, le flux net d'eau douce en surface, et E_r est une constante.

Au fond, il n'y a pas d'échange de sel:

$$\frac{\partial S}{\partial z} \Big|_{z=L} = 0$$

Conditions aux limites pour l'énergie cinétique turbulente

A la surface, e est prescrit par la tension du vent:

$$e|_{z=0} = c||\tau||/\rho_0$$

où c est une constante expérimentale.

Au fond, on néglige la turbulence. Aussi y impose-t-on à e une valeur constante positive et petite:

$$e|_{z=L} = e_f$$

2.2.5 Bilan final des équations du modèle physique

On note u_0, v_0, T_0, S_0 et e_0 les conditions initiales. Elles sont généralement issues d'une simulation précédente ou d'une montée en puissance (spin-up) du modèle numérique. Les équations qui seront résolues lors des expériences numériques sont les suivantes:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_V \frac{\partial u}{\partial z} \right) + fv \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_V \frac{\partial v}{\partial z} \right) - fu \\ \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_T \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{1}{\rho_0 c_p} \frac{\partial I}{\partial z} \\ \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_T \frac{\partial S}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial e}{\partial t} = K_V M^2 - K_T N^2 + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_V \frac{\partial e}{\partial z} \right) - c_d \frac{e^{3/2}}{l} \end{array} \right. \quad (2.8)$$

avec,

$$\left\{ \begin{array}{l} K_V = \max(K_V^0, C_m l \sqrt{e}) \\ K_T = \max(K_T^0, \frac{1}{P_{rt}} K_V) \\ \rho = \rho(T, S, z) \\ N^2 = -\frac{g}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial z} \\ M^2 = \left\| \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial z} \right\|^2 \\ R_i = \frac{N^2}{M^2} \\ P_{rt} = P_{rt}(R_i) \\ l = \frac{\sqrt{2e}}{N} \\ I = Q_{sr} [R e^{-z/\xi_1} + (1 - R) e^{-z/\xi_2}] \end{array} \right. \quad (2.9)$$

les conditions aux bords:

$$\left\{ \begin{array}{l} (K_V \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial z})|_{z=0} = \frac{1}{\rho_0} \tau, \quad \mathbf{v}|_{z=L} = 0, \\ (K_T \frac{\partial T}{\partial z})|_{z=0} = \frac{Q}{\rho_0 c_p}, \quad \frac{\partial T}{\partial z}|_{z=L} = 0, \\ (K_T \frac{\partial S}{\partial z})|_{z=0} = ES|_{z=0}, \quad \frac{\partial S}{\partial z}|_{z=L} = 0, \\ e|_{z=0} = c||\tau||/\rho_0, \quad e|_{z=L} = e_f \end{array} \right. \quad (2.10)$$

et les conditions initiales

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{v}|_{t=t_0} = \mathbf{v}_0, \\ T|_{t=t_0} = T_0, \quad S|_{t=t_0} = S_0, \\ e|_{t=t_0} = e_0. \end{array} \right. \quad (2.11)$$

2.3 Les modèles biologiques NPZD et NNPZD-DOM

Les deux modèles NPZD et NNPZD-DOM sont construits sur le même principe. Comme nous l'avons expliqué dans l'introduction, le premier est le modèle le plus simple permettant de représenter les trois processus principaux que sont la production de matière organique en surface, l'export de cette matière en profondeur et sa reminéralisation. La

grande différence entre les deux modèles réside dans le nombre de compartiments biologiques ou variables utilisées, c'est-à-dire dans le degré de simplification adopté. Dans chacun de ces modèles les compartiments interagissent les uns avec les autres par l'intermédiaire de flux représentant des processus biologiques. Les modèles sont construits en azote, c'est-à-dire que les variables sont exprimées en $mmolN.m^{-3}$ et les échanges entre compartiments sont donc quantifiés en termes de flux d'azote.

Chaque modèle est constitué de deux sous-modèles. Le premier s'applique de la surface à une profondeur prédéterminée telle que la base du domaine ainsi défini approche la profondeur maximale de la couche euphotique. Dans notre cas, cette profondeur est prise égale à 150 m. Le deuxième sous-modèle ou modèle de reminéralisation s'applique dans tout le reste de la colonne d'eau modélisée.

Notons $\mathbf{C}$ le vecteur des 4 (NPZD) ou 6 (NNPZD-DOM) variables d'état C_i . $\mathbf{C}$ vérifie un système d'équations de réaction-diffusion.

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial C_i}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z}(K_T(t, z) \frac{\partial C_i}{\partial z}) = f_i(t, z, \mathbf{C}) & t > 0, z \in]0, L[\\ \frac{\partial C_i}{\partial z}(t, 0) = \frac{\partial C_i}{\partial z}(t, L) = 0 & t > 0 \\ C_i(0, z) = C_0(z) & z \in]0, L[\end{array} \right. \quad (2.12)$$

Le coefficient de diffusion K_T est le même que celui utilisé pour les traceurs actifs (T et S). Les termes de réaction $f_i(t, z, \mathbf{C})$ couplent les équations en caractérisant les échanges entre les différents compartiments biologiques. Ils ne sont pas les mêmes dans la couche de surface ($]0, l]$ avec $l = 150$ m) et sous cette couche ($]l, L[$ avec $L = 400$ m). Dans la suite nous détaillons l'expression de ces différents termes, pour chacun des deux modèles, d'abord dans la couche de surface puis dans le reste de la colonne d'eau.

2.3.1 Les modèles dans la couche de surface

Le modèle NPZD

Les différents compartiments obéissent, dans les 150 premiers mètres de l'océan, aux termes de réaction suivants.

Nutriments(N ou C_1)

$$f_1(t, z, \mathbf{C}) = -\mu_p(1 - \gamma)L_I L_N P + \mu_z Z + \mu_d D \quad (2.13)$$

Phytoplancton(P ou C_2)

$$f_2(t, z, \mathbf{C}) = \mu_p(1 - \gamma)L_I L_N P - G_P - m_p P \quad (2.14)$$

Zooplancton(Z ou C_3)

$$f_3(t, z, \mathbf{C}) = a_p G_P + a_d G_D - m_z Z - \mu_z Z \quad (2.15)$$

Détritus(D ou C_4)

$$f_4(t, z, \mathbf{C}) = (1 - a_p)G_P - a_d G_D + m_p P + m_z Z - \mu_d D - v_d \frac{\partial D}{\partial z} \quad (2.16)$$

Les différents paramètres qui apparaissent sont des constantes représentées dans le tableau (2.1) et une représentation schématique du modèle est donnée figure (2.1).

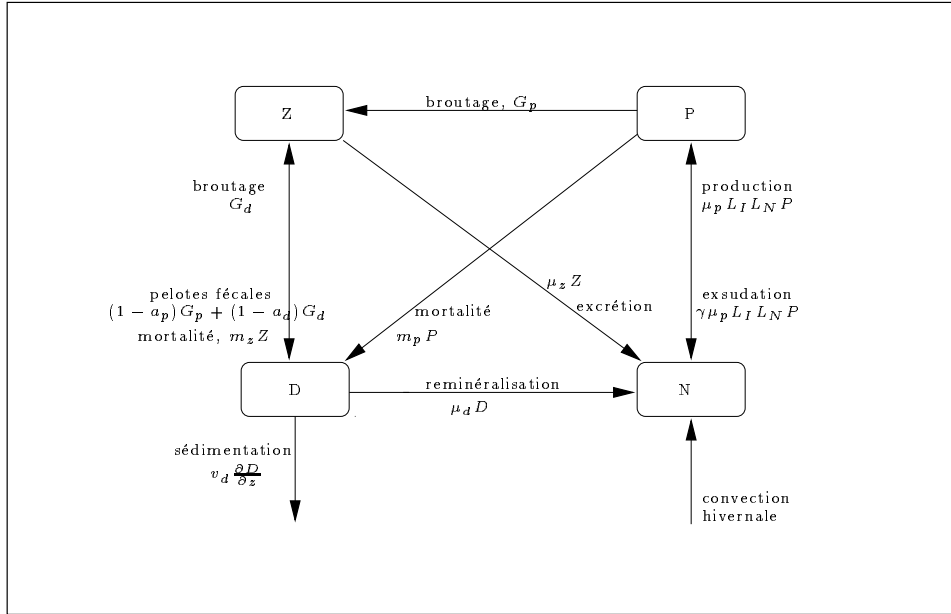


FIG. 2.1 – Représentation schématique du modèle NPZD de la couche de surface et processus associés.

paramètres	symbole	valeur	unité
constante de demi-saturation	k_n	0.5	$mmolm^{-3}$
taux maximum de broutage	g_z	0.75	$jour^{-1}$
constante de demi-saturation pour le broutage	k_z	1	$mmolN.m^{-3}$
fraction d'assimilation du phyto	a_p	0.7	
fraction d'assimilation des détritux	a_d	0.5	
taux d'excrétion du zoo	μ_z	0.1	$jour^{-1}$
taux de mortalité du phyto	m_p	0.03	$jour^{-1}$
taux de mortalité du zoo	m_z	0.03	$jour^{-1}$
taux de reminéralisation des détritux	μ_d	0.09	$jour^{-1}$
vitesse de sédimentation des détritux	v_d	5	$m.jour^{-1}$
taux maximal de croissance du phyto	μ_p	2	$jour^{-1}$
fraction d'exsudation du phyto	γ	0.05	
taux de reminéralisation	τ	0.05	$jour^{-1}$
constante de demi-saturation pour la phototsynthèse	k_{par}	33.33	$W.m^{-2}$
rapport carbone:chlorophylle	r_c	55	$mgC.mgChla^{-1}$
rapport de Redfield carbone:azote	r_d	6.625	
absorption des pigments dans le rouge	k_{rp}	0.037	$m^{-1}.(mgChl.m^{-3})^{-l_r}$
absorption des pigments dans le vert	k_{gp}	0.074	$m^{-1}.(mgChl.m^{-3})^{-l_g}$
loi de puissance de le rouge	l_r	0.629	
loi de puissance de le vert	l_g	0.674	
contribution de Chl aux pigments	r_{pg}	0.7	

TAB. 2.1 – Tableau des paramètres du modèle NPZD

Le modèle NNPZD-DOM

Les différents compartiments obéissent, dans les 150 premiers mètres de l'océan, aux termes de réaction suivants.

Nitrate(NO_3 ou C_1)

$$f_1(t, z, \mathbf{C}) = -\mu_p L_I L_{NO_3} P + \mu_n N H_4 \quad (2.17)$$

Ammonium(NH_4 ou C_2)

$$f_2(t, z, \mathbf{C}) = -\mu_p L_I L_{NH_4} P + f_n(\gamma \mu_p L_I (L_{NO_3} + L_{NH_4}) P + \mu_z Z + \mu_d D) - \mu_n NH_4 + \mu_{DOM} DOM \quad (2.18)$$

Phytoplankton(P ou C_3)

$$f_3(t, z, \mathbf{C}) = (1 - \gamma) \mu_p L_I (L_{NO_3} + L_{NH_4}) P - G_P - m_p P \quad (2.19)$$

Zooplankton(Z ou C_4)

$$f_4(t, z, \mathbf{C}) = a_p G_P + a_d G_D - m_z Z^2 - \mu_z Z \quad (2.20)$$

Detritus(D ou C_5)

$$f_5(t, z, \mathbf{C}) = (1 - a_p) G_P - a_d G_D + m_p P - \mu_d D - v_d \frac{\partial D}{\partial z} \quad (2.21)$$

DOM(DOM ou C_6)

$$f_6(t, z, \mathbf{C}) = (1 - f_n)(\gamma \mu_p L_I (L_{NO_3} + L_{NH_4}) P + \mu_z Z + \mu_d D) - \mu_{DOM} DOM \quad (2.22)$$

Les différents paramètres qui apparaissent sont des constantes représentées dans le tableau (2.2) et une représentation schématique du modèle est donnée figure (2.2).

Formulations des termes non-linéaires

Termes de limitation de croissance du phytoplankton La formulation utilisée pour paramétrer la croissance du phytoplankton prend en compte la limitation par les nutriments et la lumière.

La limitation par les nutriments suit la formulation de Hurtt et Armstrong [54].

Pour le modèle NPZD elle s'écrit:

$$L_N = \frac{N}{k_n + N}$$

Pour le modèle NNPZD-DOM, les nutriments sont décomposés en nitrates et ammonium:

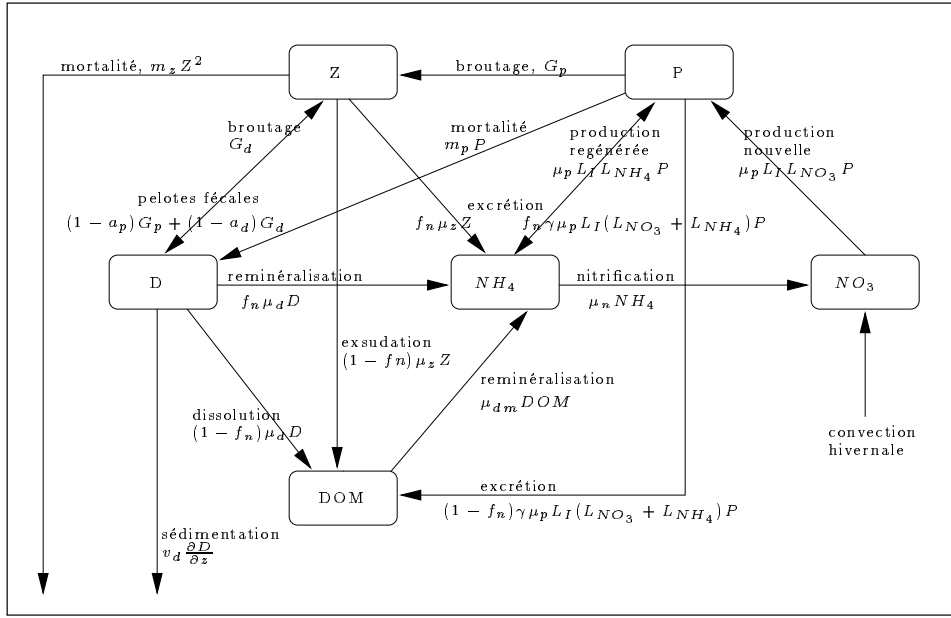


FIG. 2.2 – Représentation schématique du modèle NNPZD-DOM de la couche de surface et processus associés.

$$L_{NH_4} = \frac{NH_4}{k_n + NH_4}$$

Selon l'hypothèse que la limitation totale suit la même loi,

$$L_{NO_3} + L_{NH_4} = \frac{NO_3 + NH_4}{(k_n + NO_3 + NH_4)} \quad (2.23)$$

on obtient,

$$L_{NO_3} = \frac{k_n NO_3}{(k_n + NH_4)(k_n + NO_3 + NH_4)} \quad (2.24)$$

La limitation de la croissance par la lumière est paramétrisée par le facteur, $L_I = L_I(t, z, P)$.

$$L_I(t, z, P) = 1 - \exp(-PAR(t, z, P)/k_{par})$$

où $PAR(t, z, P)$ (photosynthetic available radiation) provient d'un modèle d'absorption de la lumière. Seule une fraction (environ 43%) de la lumière arrivant à la surface de l'océan est utilisée pour la photosynthèse. PAR est calculé à partir de la lumière en

paramètres	symbole	valeur	unité
constante de demi-saturation des nutriments	k_n	0.01	$mmolm^{-3}$
fraction d'exsudation du phyto	γ	0.05	
taux maximum de broutage	g_z	1	$jour^{-1}$
constante de demi-saturation pour le broutage	k_z	1	$mmolN.m^{-3}$
fraction d'assimilation du phyto	a_p	0.3	
fraction d'assimilation des détritux	a_d	0.5	
taux d'excrétion du zoo	μ_z	1/10	$jour^{-1}$
taux de mortalité du phyto	m_p	1/20	$jour^{-1}$
taux de mortalité du zoo	m_z	1	$mmolN.m^{-3}.jour^{-1}$
taux de dissolution des détritux	μ_d	1/20	$jour^{-1}$
vitesse de sédimentation des détritux	v_d	5	$m.jour^{-1}$
taux maximal de croissance du phyto	μ_p	1/0.5	$jour^{-1}$
taux de reminéralisation vers NH_4	f_n	0.75	
taux de nitrification	μ_n	1/20	$jour^{-1}$
taux de reminéralisation de DOM vers NH_4	μ_{dom}	1/30	$jour^{-1}$
préférence du zoo pour le phyto	r	0.7	
taux de reminéralisation	τ	1/20	$jour^{-1}$
coef. pour le profil de reminéralisation de Martin	h_r	-0.850	
constante de demi-saturation pour la phtotsynthèse	k_{par}	33.33	$W.m^{-2}$
rapport carbone:chlorophylle	r_c	55	$mgC.mgChla^{-1}$
rapport de redfield carbone:azote	r_d	6.625	
absorption des pigments dans le rouge	k_{rp}	0.037	$m^{-1}.(mgChl.m^{-3})^{-l_r}$
absorption des pigments dans le vert	k_{gp}	0.074	$m^{-1}.(mgChl.m^{-3})^{-l_g}$
loi de puissance de le rouge	l_r	0.629	
loi de puissance de le vert	l_g	0.674	
contribution de Chl aux pigments	r_{pg}	0.7	

TAB. 2.2 – Tableau des paramètres du modèle NNPZD – DOM

surface et de la concentration en phytoplancton. Deux longueurs d'ondes différentes sont considérées.

$$PAR(t, z, P) = PAR_r(t, z, P) + PAR_g(t, z, P) \quad (2.25)$$

$$PAR_g(t, z, P) = PAR_g(t, z - \Delta z, P)(1 - \exp(-k_g \Delta z)) \quad (2.26)$$

$$PAR_r(t, z, P) = PAR_r(t, z - \Delta z, P)(1 - \exp(-k_r \Delta z)) \quad (2.27)$$

$$k_g = k_{go} + k_{gp} \left(\frac{12Pr_d}{r_{pg}r_c} \right)^{l_g} \quad (2.28)$$

$$k_r = k_{ro} + k_{rp} \left(\frac{12Pr_d}{r_{pg}r_c} \right)^{l_r} \quad (2.29)$$

$k_{go} = 0.0232 \text{ m}^{-1}$ et $k_{ro} = 0.225 \text{ m}^{-1}$ sont les coefficients d'absorption de l'eau dans le bleu et le rouge. On prend comme condition de surface un PAR réparti équitablement dans les deux longueurs d'onde et proportionnel au flux solaire pénétrant,

$$PAR_g(t, z = 0) = PAR_r(t, z = 0) = 0.43Q_s(t)/w \quad (2.30)$$

Termes de broutage du zooplancton La façon la plus simple généralement utilisée pour représenter le broutage (grazing) du phytoplancton et des détritits par le zooplancton est de le paramétriser par une fonction réponse de Michaelis-Menten carrée,

$$G_P = \frac{g_z P^2 Z}{k_z + P^2}$$

$$G_D = \frac{g_z D^2 Z}{k_z + D^2}$$

Il est possible de sophistication ces paramétrisations en introduisant les préférences du zooplancton vis à vis du phytoplancton (r) ou des des détritits ($1 - r$), et en posant,

$$G_P = \frac{g_z r P^2 Z}{k_z(rP + (1 - r)D) + rP^2 + (1 - r)D^2}$$

$$G_D = \frac{g_z (1 - r) D^2 Z}{k_z(rP + (1 - r)D) + rP^2 + (1 - r)D^2}$$

2.3.2 Le modèle sous la couche euphotique

Sous la couche euphotique, la reminéralisation est prépondérante et le modèle de surface ne s'applique plus. Les différents compartiments se dégradent, petit à petit, en nutriments pour le modèle NPZD et en nitrates pour le modèle NNPZD-DOM.

Le modèle NPZD

Nutriments (N)

$$f_1(t, z, \mathbf{C}) = \tau(P + Z + D) \quad (2.31)$$

Phytoplancton (P)

$$f_2(t, z, \mathbf{C}) = -\tau P \quad (2.32)$$

Zooplancton (Z)

$$f_3(t, z, \mathbf{C}) = -\tau Z \quad (2.33)$$

Détritus (D)

$$f_4(t, z, \mathbf{C}) = -\tau D - v_d \frac{\partial D}{\partial z} \quad (2.34)$$

Le modèle NNPZD-DOM

Dans ce modèle, contrairement au modèle NPZD, le terme de mortalité du zooplankton dans la couche de surface est redistribué le long de la verticale dans le reste de la colonne d'eau.

Nitrates (NO_3)

$$f_1(t, z, \mathbf{C}) = \tau(NH_4 + P + Z + D + DOM) + \frac{\partial f}{\partial z} \quad (2.35)$$

Ammonium (NH_4)

$$f_2(t, z, \mathbf{C}) = -\tau NH_4 \quad (2.36)$$

Phytoplancton (P)

$$f_3(t, z, \mathbf{C}) = -\tau P \quad (2.37)$$

Zooplancton (Z)

$$f_4(t, z, \mathbf{C}) = -\tau Z \quad (2.38)$$

Détritus (D)

$$f_5(t, z, \mathbf{C}) = -\tau D - v_d \frac{\partial D}{\partial z} \quad (2.39)$$

DOM (DOM)

$$f_6(t, z, \mathbf{C}) = -\tau DOM \quad (2.40)$$

La reminéralisation du flux d'export de la mortalité du zooplancton f est défini par:

$$f(l) = \int_0^l m_z Z^2 dz$$

$$f(z) = f(l)(z/l)^{h_r}$$

Il n'y a pas de dépôt au fond de l'océan, on ajoute donc la condition

$$f(L) = 0$$

Chapitre 3

Etude analytique

3.1 Introduction

L'équipe d'océanographes du LODYC a développé plusieurs modèles d'écosystème marin. Nous avons présenté deux d'entre eux dans la chapitre précédent. Ces modèles permettent d'obtenir des simulations numériques plutôt satisfaisantes et différents travaux ont été menés afin de tester leur efficacité et pertinence (Lévy [66], Mémery [85]). Cependant les objectifs de ces études diffèrent complètement de ceux que peuvent se fixer les mathématiciens appliqués. Un des rôles des mathématiques appliquées est sans doute de s'assurer, dans la mesure du possible, que les modèles proposés donnent lieu à des problèmes bien posés. A la vue de la diversité et de la complexité des modèles existants, il semble difficile et sans doute peu utile de tous les étudier. Il est par contre intéressant dans le cadre de ce travail de thèse d'en étudier un. C'est ce que nous nous proposons de faire dans ce chapitre.

Une étude mathématique d'un modèle physique de turbulence relativement similaire à celui que nous utilisons est proposée dans l'ouvrage de Lewandosky [69], nous allons donc restreindre notre étude au seul modèle biologique. On commence par montrer un résultat d'existence pour le modèle NPZD, en faisant un minimum d'hypothèse sur les données du problème, en utilisant une méthode de point fixe de Schauder. L'unicité est ensuite obtenue en faisant une hypothèse supplémentaire sur le terme L_I de limitation de croissance du phytoplancton par la lumière. Cette hypothèse permet également de

simplifier la démonstration du résultat d'existence en utilisant le théorème du point fixe de Banach. Ceci étant fait, nous montrerons que le cas du modèle NNPZD-DOM peut être traité de la même façon. D'autre part, les variables du problème étant des concentrations, il est également tout à fait légitime de se poser la question de la positivité de la solution. Nous montrerons donc aussi que si les concentrations initiales sont positives alors les concentrations sont toujours positives. Enfin, nous montrerons pour terminer ce chapitre comment la théorie des semi-groupes permet également, avec certaines hypothèses sur les données, d'obtenir un résultat d'existence-unicité.

3.2 Le modèle NPZD

3.2.1 Rappel des équations du modèle

Le modèle est constitué d'un système de quatre équations paraboliques semi-linéaires couplées.

Donnons tout d'abord quelques notations. Dans toute la suite on note indifféremment $\mathbf{C} = (N, P, Z, D)^T = (C_1, C_2, C_3, C_4)^T$, le vecteur des concentrations de nitrate, phytoplancton, zooplancton et détritus, et $\mathbf{f} = (f_N, f_P, f_Z, f_D)^T = (f_1, f_2, f_3, f_4)^T$. Les équations du modèle NPZD sont les suivantes, pour $i = 1$ à 4:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial C_i}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(d(t, x) \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) + \delta_{i,4} v_d \frac{\partial C_i}{\partial x} = f_i(t, x, \mathbf{C}) & t \in]0, T], x \in]0, L[\\ \frac{\partial C_i}{\partial x}(t, 0) = \frac{\partial C_i}{\partial x}(t, L) = 0 & t \in]0, T] \\ C_i(0, x) = C_i^0(x) & x \in]0, L[\end{array} \right. \quad (3.1)$$

avec,

$$\left\{ \begin{array}{lcl} f_N(t, x, \mathbf{C}) & = & (-\mu_p(1 - \gamma)L_I(t, x, P)L_N(N)P + \mu_z Z + \mu_d D)\mathbb{I}_{]0, l]}(x) \\ & & + (\tau(P + Z + D))\mathbb{I}_{]l, L[}(x) \\ f_P(t, x, \mathbf{C}) & = & (\mu_p(1 - \gamma)L_I(t, x, P)L_N(N)P - G_P(P, Z) - m_p P)\mathbb{I}_{]0, l]}(x) \\ & & + (-\tau P)\mathbb{I}_{]l, L[}(x) \\ f_Z(t, x, \mathbf{C}) & = & (a_p G_P(P, Z) + a_d G_D(D, Z) - m_z Z - \mu_z Z)\mathbb{I}_{]0, l]}(x) \\ & & + (-\tau Z)\mathbb{I}_{]l, L[}(x) \\ f_D(t, x, \mathbf{C}) & = & ((1 - a_p)G_P(P, Z) - a_d G_D(D, Z) + m_p P + m_z Z - \mu_d D)\mathbb{I}_{]0, l]}(x) \\ & & + (-\tau D)\mathbb{I}_{]l, L[}(x) \end{array} \right. \quad (3.2)$$

$\mathbb{I}_{]0, l]}$ est la fonction indicatrice habituelle,

$$\begin{aligned} \mathbb{I}_{]0, l]}(x) &= 1 \quad \text{si } x \in]0, l] \\ &= 0 \quad \text{sinon} \end{aligned}$$

$\delta_{i,4}$ est le symbole de Kronecker,

$$\begin{aligned} \delta_{i,4} &= 1 \quad \text{si } i = 4 \\ &= 0 \quad \text{sinon} \end{aligned}$$

Les différents paramètres qui interviennent sont des constantes strictement positives présentées dans le tableau 2.1. Signalons également que les paramètres γ , a_p et a_d vérifient, $1 - \gamma > 0$, $1 - a_p > 0$ et $1 - a_d > 0$.

Les fonctions non-linéaires L_I , L_N , G_P et G_D sont explicitées dans la suite.

3.2.2 Commentaires et hypothèses

- Le coefficient de diffusion $d(t, x)$ est une donnée du problème. Il est, en pratique, calculé par le modèle physique de turbulence verticale. Il contient toute la dynamique physique représentée dans le modèle biologique, et varie fortement en temps et en espace. On ne fait pour l'instant aucune hypothèse de régularité sur d , on suppose simplement que:

Hypothèse 3.2.1

$$d(t, x) \leq d_\infty, \text{ p.p. dans }]0, T[\times]0, L[$$

$$d(t, x) \geq d_0 > 0, \text{ p.p. dans }]0, T[\times]0, L[$$

- En raison de la présence des fonctions indicatrices $\mathbb{1}_{]0, l]}$ et $\mathbb{1}_{]l, L]}$, les équations du modèle ne sont pas les mêmes au-dessus et en-dessous de la profondeur l qui physiquement correspond à la profondeur à partir de laquelle l'action de la lumière sur le système est négligeable. Mathématiquement cela correspond à une discontinuité des termes de réactions $f_i(t, x, \mathbf{C})$ au point $x = l$.
- $L_I(t, x, P)$ est la fonction de limitation de croissance du phytoplancton par la lumière. Elle est en pratique paramétrée par:

$$L_I = L_I(t, x, P) = 1 - \exp(-PAR(t, x, P)/k_{par}).$$

$PAR(t, x, P)$ (Photosynthetic Available Radiation) provient d'un modèle d'absorption de la lumière. Dans le cadre de notre travail et afin de simplifier le problème, on s'affranchit du modèle optique, et le terme de limitation de croissance par la lumière, L_I , se résume à la donnée d'une fonction $L_I(t, x, P)$. On fait les hypothèses suivantes.

Hypothèse 3.2.2

$$L_I \text{ est définie sur } [0, T] \times [0, L] \times \mathbb{R}$$

$$0 \leq L_I(t, x, P) \leq 1, \text{ p.p. dans } [0, T] \times [0, L] \times \mathbb{R}$$

$$(t, x) \rightarrow L_I(t, x, P) \text{ est mesurable, pour tout } P \in \mathbb{R}$$

$$P \rightarrow L_I(t, x, P) \text{ est continue, p.p. } (t, x) \in [0, T] \times [0, L]$$

- Les autres sources de non-linéarité du modèle sont les termes $L_N(N)$, $G_P(P, Z)$ et $G_D(D, Z)$.
 - L_N est la fonction de limitation de croissance du phytoplancton par les nutriments. Elle est donnée par $L_N = \frac{N}{k_n + N}$. L'éventuelle annulation du dénominateur, invite à définir plutôt, $L_N = \frac{N}{k_n + |N|}$. Cette formulation sera utilisée dans la

suite. Une fois prouvée l'existence d'une solution au modèle biologique, nous montrerons que si les concentrations initiales sont positives alors les concentrations restent toujours positives. Ainsi la formulation avec valeur absolue et celle sans valeur absolue seront équivalentes.

- G_P est la fonction de broutage du phytoplancton par le zooplancton. Elle peut être paramétrisée par $G_P(P, Z) = \frac{g_z P^2 Z}{k_z + P^2}$. De même $G_D(D, Z) = \frac{g_z D^2 Z}{k_z + D^2}$. Des formulations plus complexes peuvent être utilisées mais celles-ci ne font ici que compliquer les calculs et ne changent pas les résultats.
- Remarquons la présence du terme d'advection $v_d \frac{\partial D}{\partial x}$ dans l'équation pour les détritus D , qui coulent à la vitesse constante v_d .

3.3 Préliminaires

3.3.1 Espaces fonctionnels

Nous introduisons maintenant les espaces fonctionnels dont nous aurons besoin dans la suite. Toute cette étude se déroule dans le cadre 1D, sur l'ouvert $]0, L[$, et $T < \infty$ est un temps fixé.

Soient $\mathbf{H}$ et $\mathbf{H}^1$ les espaces de Hilbert séparables définis par

$$\begin{aligned}\mathbf{H} &= (L^2(0, L))^4 \\ \mathbf{H}^1 &= (H^1(0, L))^4\end{aligned}$$

$\mathbf{H}$ est muni de son produit scalaire canonique, soit pour $\mathbf{C}$ et $\hat{\mathbf{C}}$ dans $\mathbf{H}$:

$$\begin{aligned}(\mathbf{C}, \hat{\mathbf{C}}) &= \int_0^L \sum_{i=1}^4 C_i(x) \hat{C}_i(x) dx \\ &= \sum_{i=1}^4 (C_i, \hat{C}_i)_{L^2(0, L)}\end{aligned}$$

On note $\|\cdot\|$ la norme induite sur $\mathbf{H}$.

De même, $\mathbf{H}^1$ est muni de son produit scalaire canonique, soit pour $\mathbf{C}$ et $\hat{\mathbf{C}}$ dans $\mathbf{H}^1$:

$$\begin{aligned} (\mathbf{C}, \hat{\mathbf{C}})_1 &= \int_0^L \sum_{i=1}^4 C_i(x) \hat{C}_i(x) dx + \int_0^L \sum_{i=1}^4 \frac{\partial C_i(x)}{\partial x} \frac{\partial \hat{C}_i(x)}{\partial x} dx \\ &= \sum_{i=1}^4 (C_i, \hat{C}_i)_{L^2(0,L)} + \sum_{i=1}^4 \left(\frac{\partial C_i}{\partial x}, \frac{\partial \hat{C}_i}{\partial x} \right)_{L^2(0,L)} \end{aligned}$$

On note $\|\cdot\|_1$ la norme induite sur $\mathbf{H}^1$, et $|\cdot|_1$ la semi-norme.

Nous serons également amenés à considérer l'espace $\mathbf{L}^\infty = (L^\infty(0, L))^4$. $L^\infty(0, L)$ est un espace de Banach muni de la norme

$$\|C_i\|_\infty = \inf\{M; |C_i(x)| \leq M \text{ p.p sur } (0, L)\}$$

De la même manière, $\mathbf{L}^\infty$ est un espace de Banach muni de la norme

$$\|\mathbf{C}\|_\infty = \sup_{i=1,\dots,4} \|C_i\|_\infty$$

X étant un espace de Banach, de norme $\|\cdot\|_X$ on notera $C([0, T], X)$ l'ensemble des fonctions continues sur $[0, T]$ à valeur dans X . On le munit de la norme

$$\|\mathbf{C}\|_{C([0,T],X)} = \sup_{[0,T]} \|\mathbf{C}(t)\|_X$$

On note également $L^2(0, T, X)$ l'ensemble des fonctions L^2 en temps à valeur dans X , muni de la norme

$$\|\mathbf{C}\|_{L^2(0,T,X)} = \left(\int_0^T \|\mathbf{C}(t)\|_X^2 dt \right)^{1/2}$$

et $L^\infty(0, T, X)$ l'ensemble des fonctions L^∞ en temps à valeur dans X , muni de la norme

$$\|\mathbf{C}\|_{L^\infty(0,T,X)} = \inf\{M; \|\mathbf{C}(t)\|_X \leq M \text{ p.p sur } (0, T)\}$$

$C([0, T], X)$, $L^2(0, T, X)$ et $L^\infty(0, T, X)$ sont des espaces de Banach.

Nous utiliserons également le lemme suivant,

Lemme 3.3.1 *On a,*

$\mathbf{H}^1 \subset \mathbf{L}^\infty$ *avec injection continue,*

$\mathbf{H}^1 \subset \mathbf{H}$ *avec injection compacte.*

$\mathbf{H}^1 \subset C([0, L], \mathbb{R}^4)$ *avec injection compacte.*

Preuve: c'est une conséquence immédiate des corollaires IX.14 et IX.16 de Brézis [13], et du théorème de Rellich-Kondrachoff (Lions et Magenes, [72]). $\square$

On note $\mathbf{H}'$ l'espace dual de $\mathbf{H}$ et $(\mathbf{H}^1)'$ l'espace dual de $\mathbf{H}^1$. En identifiant $\mathbf{H}$ et son dual, on a le schéma classique,

$$\mathbf{H}^1 \subset \mathbf{H} = \mathbf{H}' \subset (\mathbf{H}^1)'$$

chaque espace étant dense dans le suivant et les injections continues.

Enfin, on note, $W(0, T, \mathbf{H}^1, (\mathbf{H}^1)')$ où plus simplement $W(\mathbf{H}^1)$ l'espace de Hilbert,

$$W(\mathbf{H}^1) = \{\mathbf{C} \in L^2(0, T, \mathbf{H}^1); \frac{d\mathbf{C}}{dt} \in L^2(0, T, (\mathbf{H}^1)')\}$$

Lemme 3.3.2 *Tout $\mathbf{C} \in W(\mathbf{H}^1)$ est presque partout égal à une fonction continue de $[0, T]$ dans $\mathbf{H}$. De plus,*

$$W(\mathbf{H}^1) \subset C([0, T], \mathbf{H})$$

et l'injection est continue.

Preuve: voir Dautray et Lions [31] par exemple. $\square$

Ainsi, pour $\mathbf{C} \in W(\mathbf{H}^1)$, l'expression $\mathbf{C}$ prend en $t = 0$ la valeur $\mathbf{C}^0$ a bien un sens, avec une application $\mathbf{C} \in W(\mathbf{H}^1) \rightarrow \mathbf{C}(0) \in \mathbf{H}$ continue.

3.3.2 Transformation préliminaire du système et forme bilinéaire

$$a(t, \mathbf{C}, \mathbf{C}')$$

Afin de travailler dans la suite avec une forme bilinéaire la plus simple possible on commence par ajouter aux deux membres de chacune des équations du système (3.1), λC_i , où la valeur de $\lambda > 0$ sera fixée dans la suite. On obtient ainsi le système équivalent,

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial C_i}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(d(t, x) \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) + \delta_{i,4} v_d \frac{\partial C_i}{\partial x} + \lambda C_i = f_i(t, x, \mathbf{C}) + \lambda C_i & t \in]0, T], x \in]0, L[\\ \frac{\partial C_i}{\partial x}(t, 0) = \frac{\partial C_i}{\partial x}(t, L) = 0 & t \in]0, T] \\ C_i(0, x) = C^0(x) & x \in]0, L[\end{array} \right. \quad (3.3)$$

On pose alors, pour N, N', P, P', Z, Z' et $D, D' \in H^1(0, L)$

$$\begin{aligned} a_N(t, N, N') &= \int_0^L d(t, x) \frac{\partial N}{\partial x} \frac{\partial N'}{\partial x} + \lambda \int_0^L N N' \\ a_P(t, P, P') &= \int_0^L d(t, x) \frac{\partial P}{\partial x} \frac{\partial P'}{\partial x} + \lambda \int_0^L P P' \\ a_Z(t, Z, Z') &= \int_0^L d(t, x) \frac{\partial Z}{\partial x} \frac{\partial Z'}{\partial x} + \lambda \int_0^L Z Z' \\ a_D(t, D, D') &= \int_0^L d(t, x) \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial D'}{\partial x} + \int_0^L v_d \frac{\partial D}{\partial x} D' + \lambda \int_0^L D D' \end{aligned}$$

et,

$$a(t, \mathbf{C}, \mathbf{C}') = a_N(t, N, N') + a_P(t, P, P') + a_Z(t, Z, Z') + a_D(t, D, D')$$

Lemme 3.3.3 *Pour tout $t \in [0, T]$, $a(t, \mathbf{C}, \mathbf{C}')$ est une forme bilinéaire continue sur $\mathbf{H}^1 \times \mathbf{H}^1$. Pour tout $\mathbf{C}, \mathbf{C}' \in \mathbf{H}^1$, $t \rightarrow a(t, \mathbf{C}, \mathbf{C}')$ est mesurable et il existe une constante $M_a > 0$ telle que,*

$$|a(t, \mathbf{C}, \mathbf{C}')| \leq M_a \|\mathbf{C}\|_1 \|\mathbf{C}'\|_1, \quad \forall \mathbf{C}, \mathbf{C}' \in \mathbf{H}^1$$

Pour λ fixé, $\lambda \geq \frac{v_d^2}{2d_0}$, il existe une constante c_0 telle que,

$$a(t, \mathbf{C}, \mathbf{C}) \geq c_0 \|\mathbf{C}\|_1^2, \quad \forall t \in [0, T], \quad \forall \mathbf{C} \in \mathbf{H}^1$$

Preuve: la preuve est classique et utilise les hypothèses 3.2.1 faites sur le coefficient de diffusion $d(x, t)$. Notons tout de même que l'on a par exemple,

$$|a(t, \mathbf{C}, \mathbf{C}')| \leq (d_\infty + \lambda + v_d) \|\mathbf{C}\|_1 \|\mathbf{C}'\|_1,$$

ainsi, $M_a = (d_\infty + \lambda + v_d)$.

De plus, a_N vérifie,

$$a_N(t, N, N) \geq d_0 \|N\|_{H^1(0, L)}^2 + \lambda \|N\|_{L^2(0, L)}^2, \quad \text{p.p. } t \in [0, T], \quad \forall N \in H^1(0, L)$$

Il en est de même pour a_P et a_Z .

Pour a_D on a en utilisant les inégalités de Cauchy-Schwarz et Young,

$$\left| \int_0^L v_d \frac{\partial D}{\partial x} D \right| \leq v_d \|D\|_{H^1(0, L)} \|D\|_{L^2(0, L)} \leq \frac{\alpha}{2} \|D\|_{H^1(0, L)}^2 + \frac{v_d^2}{2\alpha} \|D\|_{L^2(0, L)}^2$$

et donc

$$a_D(t, D, D) \geq (d_0 - \frac{\alpha}{2}) \|D\|_{H^1(0,L)}^2 + (\lambda - \frac{v_d^2}{2\alpha}) \|D\|_{L^2(0,L)}^2$$

d'où finalement, en choisissant $\alpha = d_0$ et $\lambda \geq \frac{v_d^2}{2d_0}$,

$$a(t, \mathbf{C}, \mathbf{C}) \geq \min(\frac{d_0}{2}, \lambda - \frac{v_d^2}{2d_0}) \|\mathbf{C}\|_1^2,$$

et $c_0 = \min(\frac{d_0}{2}, \lambda - \frac{v_d^2}{2d_0}) \square$

3.3.3 Les termes de réaction du second membre et l'opérateur non-linéaire $\mathbf{G}$

Dans ce paragraphe on montre que les termes de réactions du modèle NPZD permettent de définir un opérateur, $\mathbf{G}$, continu, sur $L^2(0, T, \mathbf{H})$.

Lemme 3.3.4 *Les termes de réaction f_N , f_P , f_Z et f_D définis au paragraphe 3.2.1 vérifient les propriétés suivantes:*

(P1) *Pour tout $t \geq 0$, tout $x \in [0, L]$, tout $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^4$,*

$$\begin{aligned} |f_N(t, x, \mathbf{C})| &\leq (\mu_p(1 - \gamma) + \tau)|P| + (\mu_z + \tau)|Z| + (\mu_d + \tau)|D| \\ |f_P(t, x, \mathbf{C})| &\leq (\mu_p(1 - \gamma) + m_p + \tau)|P| + g_z|Z| \\ |f_Z(t, x, \mathbf{C})| &\leq ((a_p + a_d)g_z + m_z + \mu_z + \tau)|Z| \\ |f_D(t, x, \mathbf{C})| &\leq (((1 - a_p) + a_d)g_z + m_z)|Z| + m_p|P| + (\mu_d + \tau)|D| \end{aligned}$$

(P2) *La fonction $\mathbf{f}(t, x, \mathbf{C})$, définie de $[0, T] \times [0, L] \times \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}^4$, est mesurable en (t, x) , pour tout $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^4$, et est continue en la variable $\mathbf{C}$, p.p. (t, x) dans $[0, T] \times [0, L]$.*

Preuve: pour (P1), il suffit de remarquer que les fonctions caractéristiques $\mathbb{I}_{[0,l]}(x)$ et $\mathbb{I}_{[l,L]}(x)$, la fonction $L_I(t, x, P)$ (d'après l'hypothèse (3.2.2) faite sur L_I), ainsi que les fonctions de $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned} l : x &\rightarrow \frac{x}{k_n + |x|} \\ g : x &\rightarrow \frac{x^2}{k_z + x^2} \end{aligned}$$

sont bornées par 1.

(P2), découle des hypothèses faites sur L_I ainsi que de la continuité des fonctions $L_N : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $G_P : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ et $G_D : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$. $\square$

On définit alors une fonction $\mathbf{g}(t, x, \mathbf{C}) = \mathbf{f}(t, x, \mathbf{C}) + \lambda \mathbf{C}$ de $[0, T] \times [0, L] \times \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}^4$ et un opérateur non-linéaire, $\mathbf{G}$, par:

$$\mathbf{G}\mathbf{C} = \mathbf{g}(t, x, \mathbf{C}(t, x)), \quad (t, x) \in [0, T] \times [0, L].$$

Proposition 3.3.1 *L'opérateur, $\mathbf{G}$, est bien défini de $L^2(0, T, \mathbf{H})$ dans lui même. Il existe une constante $M_g > 0$, dépendant uniquement des paramètres du modèle, telle que, pour tout $\mathbf{C} \in L^2(0, T, \mathbf{H})$*

$$\|\mathbf{G}\mathbf{C}\|_{L^2(0, T, \mathbf{H})} \leq M_g \|\mathbf{C}\|_{L^2(0, T, \mathbf{H})}$$

L'opérateur $\mathbf{G}$ est continu sur $L^2(0, T, \mathbf{H})$.

Preuve: soit $\mathbf{C} \in L^2(0, T, \mathbf{H})$ et $t \in [0, T]$. On a, en utilisant le point (P1) du lemme 3.3.4,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{G}\mathbf{C}(t)\|^2 &= \int_0^L |f_N(t, x, \mathbf{C}(t, x)) + \lambda N(t, x)|^2 + |f_P(t, x, \mathbf{C}(t, x)) + \lambda P(t, x)|^2 \\ &\quad + |f_Z(t, x, \mathbf{C}(t, x)) + \lambda Z(t, x)|^2 + |f_D(t, x, \mathbf{C}(t, x)) + \lambda D(t, x)|^2 dx \\ &\leq cte_1(\|P(t)\|_{L^2(0, L)}^2 + \|Z(t)\|_{L^2(0, L)}^2 + \|D(t)\|_{L^2(0, L)}^2 + \|N(t)\|_{L^2(0, L)}^2) \\ &\quad + cte_2(\|P(t)\|_{L^2(0, L)}^2 + \|Z(t)\|_{L^2(0, L)}^2 + \|P(t)\|_{L^2(0, L)}^2) \\ &\quad + cte_3(\|Z(t)\|_{L^2(0, L)}^2) \\ &\quad + cte_4(\|Z(t)\|_{L^2(0, L)}^2 + \|P(t)\|_{L^2(0, L)}^2 + \|D(t)\|_{L^2(0, L)}^2) \\ &\leq M_g^2 \|\mathbf{C}(t)\|^2 \end{aligned}$$

c'est-à-dire également, en intégrant sur $[0, T]$,

$$\|\mathbf{G}\mathbf{C}\|_{L^2(0, T, \mathbf{H})} \leq M_g \|\mathbf{C}\|_{L^2(0, T, \mathbf{H})}$$

où M_g est une constante dépendant des paramètres du modèle.

On sait, d'après le lemme 3.3.4 que la fonction

$$\mathbf{g}(t, x, \mathbf{C}) = \mathbf{f}(t, x, \mathbf{C}) + \lambda \mathbf{C}$$

de $[0, T] \times [0, L] \times \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}^4$, vérifie les conditions de Carathéodory et le théorème 2.1, page 22, de Krasnosel'skii [59], permet d'affirmer que l'opérateur $\mathbf{G}$ est continu. $\square$

3.3.4 Formulation variationnelle

Nous sommes maintenant en mesure de donner la définition d'une solution faible du système (3.1).

Définition 3.3.1 *On dit que $\mathbf{C} \in W(\mathbf{H}^1)$ est une solution faible du système (3.1) si*

$$\forall \phi \in \mathbf{H}^1, \quad \left(\frac{d\mathbf{C}}{dt}, \phi \right) + a(t, \mathbf{C}, \phi) = (\mathbf{G}\mathbf{C}, \phi),$$

au sens de $\mathcal{D}'([0, T])$,

et $\mathbf{C}(0) = \mathbf{C}^0$.

Remarque 3.3.1 *On peut montrer qu'une formulation faible équivalente est:*

$\mathbf{C} \in L^2(0, T, \mathbf{H}^1)$ est une solution faible du système (3.1) si $\frac{d\mathbf{C}}{dt} \in L^2(0, T, (\mathbf{H}^1)')$ et si pour tout $\phi \in L^2(0, T, \mathbf{H}^1)$ et tout $t \in [0, T]$,

$$\int_0^t \left(\frac{d\mathbf{C}}{dt}(s), \phi \right) + a(s, \mathbf{C}(s), \phi) ds = \int_0^t (\mathbf{G}\mathbf{C}(s), \phi) ds$$

et $\mathbf{C}(0) = \mathbf{C}^0$.

Dans la suite de ce travail nous allons démontrer le résultat suivant.

Théorème 3.3.1 *Soit $\mathbf{C}^0 \in \mathbf{H}$. Le système (3.1) admet une solution faible.*

3.4 Existence

Le résultat d'existence d'une solution faible du système (3.1) est obtenu en deux étapes. On commence par définir un problème approché dans lequel l'opérateur $\mathbf{G}$ est remplacé par un opérateur $\mathbf{G}_n$. Ce problème approché est résolu par une méthode de point fixe. Dans la deuxième étape, on passe à la limite dans le problème approché pour obtenir une solution du problème initial.

3.4.1 Le problème approché

Soit un entier $n > 0$, fixé. A partir de la fonction $\mathbf{g}(t, x, \mathbf{C})$ on définit $\mathbf{g}_n$ par,

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_n : [0, T] \times [0, L] \times \mathbb{R}^4 &\rightarrow \mathbb{R}^4 \\ (t, x, \mathbf{C}) &\rightarrow \left(\frac{(\mathbf{g}(t, x, \mathbf{C}))_i}{1 + \frac{1}{n} |(\mathbf{g}(t, x, \mathbf{C}))_i|} \right)_{i=1, \dots, 4} \end{aligned}$$

On définit alors l'opérateur non-linéaire, $\mathbf{G}_n$, par:

$$\mathbf{G}_n \mathbf{C} = \mathbf{g}_n(t, x, \mathbf{C}(t, x)), \quad (t, x) \in [0, T] \times [0, L].$$

Proposition 3.4.1 *Soit un entier $n > 0$, fixé. L'opérateur, $\mathbf{G}_n$, est bien défini de $L^2(0, T, \mathbf{H})$ dans lui même et il existe une constante $M_g > 0$, dépendant uniquement des paramètres du modèle, telle que, pour tout $\mathbf{C} \in L^2(0, T, \mathbf{H})$*

$$\|\mathbf{G}_n \mathbf{C}\|_{L^2(0, T, \mathbf{H})} \leq M_g \|\mathbf{C}\|_{L^2(0, T, \mathbf{H})}$$

L'opérateur $\mathbf{G}_n$ est continu sur $L^2(0, T, \mathbf{H})$.

Enfin, pour tout $\mathbf{C} \in L^2(0, T, \mathbf{H})$, on a également l'estimation,

$$\|\mathbf{G}_n \mathbf{C}\|_{L^2(0, T, \mathbf{H})} \leq 2n\sqrt{LT}$$

Preuve: soit $\mathbf{C} \in L^2(0, T, \mathbf{H})$, de la définition même de $\mathbf{g}_n$ et de la proposition 3.3.1 on a,

$$\|\mathbf{G}_n \mathbf{C}\|_{L^2(0, T, \mathbf{H})} \leq \|\mathbf{G} \mathbf{C}\|_{L^2(0, T, \mathbf{H})} \leq M_g \|\mathbf{C}\|_{L^2(0, T, \mathbf{H})}$$

Ainsi $\mathbf{G}_n$ est bien défini sur $L^2(0, T, \mathbf{H})$.

L'estimation, $\|\mathbf{G}_n \mathbf{C}\|_{L^2(0, T, \mathbf{H})} \leq 2n\sqrt{LT}$ découle à nouveau immédiatement du choix de la définition de $\mathbf{g}_n$.

Comme pour la proposition 3.3.1, le fait que $\mathbf{g}_n$ vérifie les conditions de Carathéodory assure la continuité de $\mathbf{G}_n$ sur $L^2(0, T, \mathbf{H})$. $\square$

On cherche maintenant une solution faible du système initial dans lequel le second membre $\mathbf{g}$ est remplacé par $\mathbf{g}_n$. Ceci s'effectue en montrant qu'une telle solution est point fixe de l'opérateur Θ défini dans la proposition suivante.

Proposition 3.4.2 *Soit $\hat{\mathbf{C}}$ fixé dans $L^2(0, T, \mathbf{H})$ et $\mathbf{C}^0 \in \mathbf{H}$. Le problème: trouver $\mathbf{C} \in W(\mathbf{H}^1)$ tel que,*

$$\forall \phi \in \mathbf{H}^1, \quad \left(\frac{d\mathbf{C}}{dt}, \phi \right) + a(t, \mathbf{C}, \phi) = (\mathbf{G}_n \hat{\mathbf{C}}, \phi),$$

au sens de $\mathcal{D}'([0, T])$,

et $\mathbf{C}(0) = \mathbf{C}^0$,

admet une unique solution définissant un opérateur Θ sur $L^2(0, T, \mathbf{H})$, $\Theta \hat{\mathbf{C}} = \mathbf{C}$.

Preuve: ce résultat est assuré par un théorème classique sur les problèmes paraboliques (Dautray et Lions, [31]), l'équation étant linéaire en $\mathbf{C}$ et le second membre $\mathbf{G}_n \hat{\mathbf{C}}$ fixé dans $L^2(0, T, \mathbf{H})$. $\square$

Il s'agit maintenant de montrer que Θ admet un point fixe. Pour ce faire nous montrons maintenant que les hypothèses du théorème de point fixe de Schauder sont vérifiées.

Lemme 3.4.1 *L'opérateur Θ est continu sur $L^2(0, T, \mathbf{H})$.*

Preuve: la continuité de Θ découle de celle de $\mathbf{G}_n$. Soit $\hat{\mathbf{C}}^1$ et $\hat{\mathbf{C}}^2 \in L^2(0, T, \mathbf{H})$. Les solutions associées $\mathbf{C}^1$ et $\mathbf{C}^2$ du problème de la proposition 3.4.2 vérifient,

$$\left(\frac{d}{dt}(\mathbf{C}^1 - \mathbf{C}^2), \phi \right) + a(t, \mathbf{C}^1 - \mathbf{C}^2, \phi) = (\mathbf{G}_n \hat{\mathbf{C}}^1 - \mathbf{G}_n \hat{\mathbf{C}}^2, \phi)$$

En prenant comme fonction test, $\phi = \mathbf{C}^1 - \mathbf{C}^2$, en intégrant sur $[0, t]$, en utilisant la coercivité de a et l'inégalité de Cauchy-Schwarz on a,

$$\int_0^t \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\mathbf{C}^1(s) - \mathbf{C}^2(s)\|^2 + c_0 \|\mathbf{C}^1(s) - \mathbf{C}^2(s)\|_1^2 ds \leq \int_0^t \|\mathbf{G}_n \hat{\mathbf{C}}^1(s) - \mathbf{G}_n \hat{\mathbf{C}}^2(s)\| \|\mathbf{C}^1(s) - \mathbf{C}^2(s)\| ds$$

Soit encore comme $\mathbf{C}^1(0) = \mathbf{C}^2(0) = \mathbf{C}^0$ et avec l'inégalité de Young,

$$\begin{aligned} & \|\mathbf{C}^1(t) - \mathbf{C}^2(t)\|^2 + \int_0^t 2c_0 \|\mathbf{C}^1(s) - \mathbf{C}^2(s)\|_1^2 ds \\ & \leq \int_0^t \frac{1}{\alpha} \|\mathbf{G}_n \hat{\mathbf{C}}^1(s) - \mathbf{G}_n \hat{\mathbf{C}}^2(s)\|^2 ds + \alpha \int_0^t \|\mathbf{C}^1(s) - \mathbf{C}^2(s)\|^2 ds \end{aligned}$$

avec $\alpha = 2c_0$,

$$\|\mathbf{C}^1(t) - \mathbf{C}^2(t)\|^2 \leq \int_0^T \frac{1}{2c_0} \|\mathbf{G}_n \hat{\mathbf{C}}^1(s) - \mathbf{G}_n \hat{\mathbf{C}}^2(s)\|^2 ds$$

d'où en intégrant à nouveau sur $[0, T]$,

$$\|\Theta \hat{\mathbf{C}}^1 - \Theta \hat{\mathbf{C}}^2\|_{L^2(0,T,\mathbf{H})} = \|\mathbf{C}^1 - \mathbf{C}^2\|_{L^2(0,T,\mathbf{H})} \leq \sqrt{\frac{T}{2c_0}} \|\mathbf{G}_n \hat{\mathbf{C}}^1 - \mathbf{G}_n \hat{\mathbf{C}}^2\|_{L^2(0,T,\mathbf{H})}$$

□

Lemme 3.4.2 *L'opérateur Θ envoie $L^2(0, T, \mathbf{H})$ dans la boule*

$$B = \{\mathbf{C} \in L^2(0, T, \mathbf{H}), \|\mathbf{C}\|_{L^2(0,T,\mathbf{H})} \leq \sqrt{T(\frac{2LTn^2}{c_0} + \|\mathbf{C}^0\|^2)}\}$$

En particulier on a, $\Theta(B) \subset B$.

Preuve: soit $\hat{\mathbf{C}} \in L^2(0, T, \mathbf{H})$. La solution associée $\mathbf{C}$ du problème de la proposition 3.4.2 vérifie,

$$(\frac{d}{dt}\mathbf{C}, \phi) + a(t, \mathbf{C}, \phi) = (\mathbf{G}_n \hat{\mathbf{C}}, \phi)$$

En prenant comme fonction test, $\phi = \mathbf{C}$, en intégrant sur $[0, t]$, en utilisant la coercivité de a et l'inégalité de Cauchy-Schwarz on a,

$$\int_0^t \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\mathbf{C}(s)\|^2 + c_0 \|\mathbf{C}(s)\|_1^2 ds \leq \int_0^t \|\mathbf{G}_n \hat{\mathbf{C}}(s)\| \|\mathbf{C}(s)\| ds$$

Soit encore

$$\|\mathbf{C}(t)\|^2 + \int_0^t 2c_0 \|\mathbf{C}(s)\|_1^2 ds \leq \int_0^t \frac{1}{\alpha} \|\mathbf{G}_n \hat{\mathbf{C}}(s)\|^2 ds + \alpha \int_0^t \|\mathbf{C}(s)\|^2 ds + \|\mathbf{C}^0\|^2$$

avec $\alpha = 2c_0$ et $\int_0^t \|\mathbf{G}_n \hat{\mathbf{C}}(s)\|^2 ds \leq 4LTn^2$, il vient

$$\|\mathbf{C}(t)\|^2 \leq \frac{4LTn^2}{2c_0} + \|\mathbf{C}^0\|^2$$

d'où en intégrant à nouveau sur $[0, T]$,

$$\|\Theta \hat{\mathbf{C}}\|_{L^2(0,T,\mathbf{H})}^2 = \|\mathbf{C}\|_{L^2(0,T,\mathbf{H})}^2 \leq T(\frac{2LTn^2}{c_0} + \|\mathbf{C}^0\|^2)$$

□

Enfin, montrons la compacité de l'opérateur Θ . Celle-ci résulte du lemme suivant.

Lemme 3.4.3 *Soient trois espaces de Banach B_0 , B et B_1 tels que*

$$\begin{aligned} B_0 &\subset B \subset B_1, \\ B_0, B_1 &\text{ réflexifs,} \\ B_0 &\rightarrow B \text{ compact} \end{aligned}$$

On définit,

$$W^{p_0, p_1} = \{v, v \in L^{p_0}(0, T, B_0), v' = \frac{dv}{dt} \in L^{p_1}(0, T, B_1)\}$$

où $1 < p_i < \infty$, $i = 0, 1$. Alors $W^{p_0, p_1} \subset L^{p_0}(0, T, B)$ et l'injection est compacte.

Preuve: ce type de résultat est dû à Aubin [7]. Le présent énoncé est extrait de Lions [71]. $\square$

Lemme 3.4.4 *L'opérateur Θ est compact.*

Preuve: soit B un ensemble borné de $L^2(0, T, \mathbf{H})$. Montrons que $\Theta(B)$ est borné dans $W(\mathbf{H}^1)$. Soit $\hat{\mathbf{C}} \in B \subset L^2(0, T, \mathbf{H})$ et la solution associée, $\mathbf{C}$, du problème de la proposition 3.4.2. Comme dans la preuve du lemme 3.4.2 on a,

$$\|\mathbf{C}(t)\|^2 + \int_0^t 2c_0 \|\mathbf{C}(s)\|_1^2 ds \leq \int_0^t \frac{1}{\alpha} \|\mathbf{G}_n \hat{\mathbf{C}}(s)\|^2 ds + \alpha \int_0^t \|\mathbf{C}(s)\|^2 ds + \|\mathbf{C}^0\|^2$$

En prenant cette fois $\alpha = c_0$, il vient,

$$\int_0^T \|\mathbf{C}(s)\|_1^2 ds \leq \frac{1}{c_0} \|\mathbf{G}_n \hat{\mathbf{C}}\|_{L^2(0, T, \mathbf{H})^2}^2 + \|\mathbf{C}^0\|^2 \leq \frac{4LTn^2}{c_0} + \|\mathbf{C}^0\|^2$$

donc $\Theta \hat{\mathbf{C}}$ est borné dans $L^2(0, T, \mathbf{H}^1)$.

De plus revenant à la définition on a,

$$\forall \phi \in \mathbf{H}^1, \quad \left(\frac{d\mathbf{C}}{dt}, \phi \right) + a(t, \mathbf{C}, \phi) = (\mathbf{G}_n \hat{\mathbf{C}}, \phi).$$

D'après le lemme 3.3.3,

$$\left| \left(\frac{d\mathbf{C}}{dt}, \phi \right) \right| \leq M_a \|\mathbf{C}\|_1 \|\phi\|_1 + \|\mathbf{G}_n \hat{\mathbf{C}}\| \|\phi\| \leq M_a \|\mathbf{C}\|_1 \|\phi\|_1 + 2n\sqrt{L} \|\phi\|_1$$

Ainsi,

$$\int_0^T \left\| \frac{d\mathbf{C}}{dt} \right\|_{(\mathbf{H}^1)'}^2 ds \leq 2 \int_0^T (4Ln^2 + M^2 \|\mathbf{C}\|_1^2) ds$$

et $\|\frac{d\mathbf{C}}{dt}\|_{L^2(0,T,(\mathbf{H}^1)')}$ est borné dans $L^2(0,T,(\mathbf{H}^1)')$.

D'après le lemme 3.3.1, l'injection $\mathbf{H}^1 \subset \mathbf{H}$ est compacte.

De plus, l'image de Θ appartient à $W(\mathbf{H}^1)$. On applique donc le lemme 3.4.3 avec $B_0 = \mathbf{H}^1$, $B = \mathbf{H}$ et $B_1 = (\mathbf{H}^1)'$ et $p_0 = p_1 = 2$, et ainsi, l'injection $W(\mathbf{H}^1) \subset L^2(0,T,\mathbf{H})$ est compact, ce qui permet de conclure. $\square$

Théorème 3.4.1 *L'entier $n > 0$ étant fixé, $\mathbf{C}^0$ étant donné dans $\mathbf{H}$, le problème: trouver $\mathbf{C} \in W(\mathbf{H}^1)$ tel que,*

$$\forall \phi \in \mathbf{H}^1, \quad \left(\frac{d\mathbf{C}}{dt}, \phi\right) + a(t, \mathbf{C}, \phi) = (\mathbf{G}_n \mathbf{C}, \phi),$$

au sens de $\mathcal{D}'([0,T[)$,

et $\mathbf{C}(0) = \mathbf{C}^0$,

admet une solution, notée $\mathbf{C}_n$.

Preuve: d'après les lemmes 3.4.1, 3.4.2, 3.4.4 et le théorème de point fixe de Schauder, l'opérateur Θ admet un point fixe qui est la solution recherchée. $\square$

3.4.2 Passage à la limite lorsque $n \rightarrow \infty$

Dans ce paragraphe on montre le théorème d'existence suivant.

Théorème 3.4.2 *$\mathbf{C}^0$ étant donné dans $\mathbf{H}$, le système (3.1)(3.2) admet une solution faible.*

Preuve: la preuve s'effectue en passant à la limite quand $n \rightarrow \infty$ dans les équations,

$$\begin{aligned} \forall \phi \in \mathbf{H}^1, \quad & \left(\frac{d\mathbf{C}_n}{dt}(t), \phi\right) + a(t, \mathbf{C}_n, \phi) = (\mathbf{G}_n \mathbf{C}_n(t), \phi) \\ & \mathbf{C}_n(0) = \mathbf{C}^0 \end{aligned} \tag{3.4}$$

Ceci s'effectue en deux étapes:

- 1) estimations a priori sur la suite $\mathbf{C}_n$
- 2) extractions de sous-suites et passage à la limite

1) **estimations.** Montrons que:

- (i) la suite $(\mathbf{C}_n)_{n>0}$ est bornée dans $L^\infty(0, T, \mathbf{H})$
- (ii) la suite $(\mathbf{C}_n)_{n>0}$ est bornée dans $L^2(0, T, \mathbf{H}^1)$
- (iii) la suite $(\frac{d\mathbf{C}_n}{dt})_{n>0}$ est bornée dans $L^2(0, T, (\mathbf{H}^1)')$

On prend $\mathbf{C}_n$ comme test dans (3.4). On obtient,

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\mathbf{C}_n\|^2 + a(t, \mathbf{C}_n, \mathbf{C}_n) = (\mathbf{G}_n \mathbf{C}_n, \mathbf{C}_n)$$

soit encore,

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\mathbf{C}_n\|^2 + c_0 \|\mathbf{C}_n\|_1^2 \leq \|\mathbf{G}_n \mathbf{C}_n\| \|\mathbf{C}_n\| \leq M_g \|\mathbf{C}_n\|^2$$

d'où en intégrant sur $[0, t]$

$$\|\mathbf{C}_n\|^2 + 2c_0 \int_0^t \|\mathbf{C}_n\|_1^2 ds \leq 2M_g \int_0^t \|\mathbf{C}_n\|^2 ds + \|\mathbf{C}^0\|^2 \quad (3.5)$$

L'équation (3.5) donne,

$$\|\mathbf{C}_n\|^2 \leq 2M_g \int_0^t \|\mathbf{C}_n\|^2 ds + \|\mathbf{C}^0\|^2$$

d'où en utilisant le lemme Gronwall,

$$\|\mathbf{C}_n(t)\|^2 \leq \|\mathbf{C}^0\|^2 \exp(2M_g T) \quad (3.6)$$

et donc la suite $(\mathbf{C}_n)_{n>0}$ est bornée dans $L^\infty(0, T, \mathbf{H})$.

L'équation (3.5) donne également,

$$\int_0^t \|\mathbf{C}_n\|_1^2 ds \leq \frac{M_g}{c_0} \int_0^t \|\mathbf{C}_n\|^2 ds + \frac{1}{2c_0} \|\mathbf{C}^0\|^2$$

et avec (3.6),

$$\int_0^t \|\mathbf{C}_n\|_1^2 ds \leq \frac{M_g T}{c_0} \|\mathbf{C}^0\|^2 \exp(2M_g T) + \frac{1}{2c_0} \|\mathbf{C}^0\|^2$$

et donc la suite $(\mathbf{C}_n)_{n>0}$ est bornée dans $L^2(0, T, \mathbf{H}^1)$.

Donnons maintenant une estimation pour la suite $(\frac{d\mathbf{C}_n}{dt})_{n>0}$. On a,

$$|(\frac{d\mathbf{C}_n}{dt}, \phi)| \leq |a(t, \mathbf{C}_n, \phi)| + |(\mathbf{G}_n \mathbf{C}_n, \phi)|$$

et donc,

$$|(\frac{d\mathbf{C}_n}{dt}, \phi)| \leq M_a \|\mathbf{C}_n\|_1 \|\phi\|_1 + M_g \|\mathbf{C}_n\|_1 \|\phi\|_1$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} \int_0^T \|\frac{d\mathbf{C}_n}{dt}\|_{(\mathbf{H}^1)'}^2 &\leq 2(M_a^2 + M_g^2) \int_0^T \|\mathbf{C}_n\|_1^2 \\ &\leq 2(M_a^2 + M_g^2) \left(\frac{M_g T}{c_0} \|\mathbf{C}^0\|^2 \exp(2M_g T) + \frac{1}{2c_0} \|\mathbf{C}^0\|^2 \right) \end{aligned}$$

et la suite $(\frac{d\mathbf{C}_n}{dt})_{n>0}$ est bornée dans $L^2(0, T, (\mathbf{H}^1)')$.

2) **passage à la limite.** Commençons par rappeler que $\mathcal{D}(]0, T[, \mathbf{H}^1) \subset W(\mathbf{H}^1)$. Donc $\forall \phi \in \mathbf{H}^1$ et $\forall \varphi \in \mathcal{D}(]0, T[)$, on a $\psi = \phi \otimes \varphi \in L^2(0, T, \mathbf{H}^1)$ et $\frac{d\psi}{dt} \in L^2(0, T, (\mathbf{H}^1)').$

a) Terme $(\frac{d\mathbf{C}_n}{dt}, \phi)$. D'après (iii), on peut extraire de la suite $(\frac{d\mathbf{C}_n}{dt})_{n>0}$ une sous-suite (notée de la même manière) qui converge vers un certain $\mathbf{h}$ dans $L^2(0, T, (\mathbf{H}^1)')$ faible *. Soit, pour tout $\phi \in \mathbf{H}^1$ et tout $\varphi \in \mathcal{D}(]0, T[)$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^T (\frac{d\mathbf{C}_n}{dt}, \phi) \varphi ds = \int_0^T (\mathbf{h}, \phi) \varphi ds$$

De plus, par définition,

$$\int_0^T (\frac{d\mathbf{C}_n}{dt}, \phi) \varphi ds = - \int_0^T (\mathbf{C}_n, \phi) \frac{d\varphi}{dt} ds$$

D'après (ii), on peut extraire de la suite $(\mathbf{C}_n)_{n>0}$ une sous-suite (notée de la même manière) qui converge vers un certain $\mathbf{C}$ dans $L^2(0, T, \mathbf{H}^1)$ faible. Ainsi, pour tout $\phi \in \mathbf{H}^1$ et tout $\varphi \in \mathcal{D}(]0, T[)$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} - \int_0^T (\mathbf{C}_n, \phi) \frac{d\varphi}{dt} ds = - \int_0^T (\mathbf{C}, \phi) \frac{d\varphi}{dt} ds$$

et donc $\mathbf{h} = \frac{d\mathbf{C}}{dt}$ dans $L^2(0, T, (\mathbf{H}^1)').$

- b) Terme $a(t, \mathbf{C}_n, \phi)$. D'après a), on peut maintenant supposer que la suite $(\mathbf{C}_n)_{n>0}$ converge vers $\mathbf{C}$ dans $L^2(0, T, \mathbf{H}^1)$ faible, donc la suite $(\partial_x \mathbf{C}_n)_{n>0}$ converge vers $\partial_x \mathbf{C}$ dans $L^2(0, T, \mathbf{H})$ faible. Ainsi, pour tout $\phi \in \mathbf{H}^1$ et tout $\varphi \in \mathcal{D}(]0, T[)$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^T a(s, \mathbf{C}_n, \phi) \varphi ds = \int_0^T a(s, \mathbf{C}, \phi) \varphi ds$$

- c) Terme $(\mathbf{G}_n \mathbf{C}_n, \phi)$. Nous allons ici raisonner composante par composante. D'après les points (ii) et (iii), et d'après la compacité de l'injection $W(\mathbf{H}^1) \rightarrow L^2(0, T, \mathbf{H})$, on peut supposer que la suite $(\mathbf{C}_n)_{n>0}$ converge vers $\mathbf{C}$ dans $L^2(0, T, \mathbf{H})$ fort. Ainsi, chaque composante $\mathbf{C}_{n,i}$, $i = 1, \dots, 4$, converge vers $\mathbf{C}_i$ dans $L^2(0, T, L^2(0, L))$ fort. Du théorème de Lebesgue inverse (Brézis, [13], théorème IV.9. page 58), on déduit que l'on peut supposer (à une extraction de sous-suite près):

- (c1) les suites $(\mathbf{C}_{n,i})_{n>0}$, $i = 1, \dots, 4$, convergent vers $\mathbf{C}_i$ p.p dans $]0, T[\times]0, L[$.
(c2) pour $i = 1$ à 4 , $|\mathbf{C}_{n,i}| \leq h_i$, $\forall n > 0$, p.p dans $]0, T[\times]0, L[$ et $h_i \in L^2(0, T, L^2(0, L))$.

Comme $\mathbf{g}_{n,i}(t, x, \mathbf{C})$ est continue par rapport à la troisième variable, on déduit de (c1), que $\forall \phi_i \in H^1(0, L)$ et $\forall \varphi \in \mathcal{D}(]0, T[)$,

$$u_{n,i}(t, x) = \mathbf{g}_{n,i}(t, x, \mathbf{C}_n(t, x)) \phi_i(x) \varphi(t) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \mathbf{g}_i(t, x, \mathbf{C}(t, x)) \phi_i(x) \varphi(t)$$

p.p. dans $]0, T[\times]0, L[$.

De plus, d'après le lemme 3.3 et avec (c2),

$$|u_{n,i}| \leq M_i \left(\sum_{i=1}^4 h_i \right) |\phi_i| |\varphi| \in L^1(]0, T[\times]0, L[)$$

où les M_i sont des constantes. Ainsi, d'après le théorème de convergence dominée de Lebesgue,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^T \int_0^L u_{n,i}(t, x) dx dt = \int_0^T \int_0^L \mathbf{g}_i(t, x, \mathbf{C}(t, x)) \phi_i(x) \varphi(t) dx dt$$

et finalement, pour tout $\phi \in \mathbf{H}^1$ et tout $\varphi \in \mathcal{D}(]0, T[)$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^T (\mathbf{G}_n \mathbf{C}_n, \phi) \varphi = \int_0^T (\mathbf{G} \mathbf{C}, \phi) \varphi$$

Ce qui achève la preuve de la partie existence du théorème 3.3.1. $\square$

3.5 Unicité

Dans cette partie on montre l'unicité de la solution faible en formulant une hypothèse supplémentaire sur L_I . On montre ensuite comment dans ce cadre, la démonstration du résultat d'existence peut être simplifiée.

3.5.1 Hypothèse et propriété supplémentaires

Hypothèse 3.5.1 *En plus des hypothèses 3.2.2, L_I vérifie l'hypothèse:*

Il existe une constante, $K_I > 0$, telle que $\forall(t, x) \in [0, T] \times [0, L]$, $\forall P, \hat{P} \in \mathbb{R}$,

$$|L_I(t, x, P) - L_I(t, x, \hat{P})| \leq K_I |P - \hat{P}|$$

Lemme 3.5.1 *Les termes de réaction f_N , f_P , f_Z et f_D définis au paragraphe 3.2.1 vérifient la propriété suivante:*

(P3) *Pour tout $t \geq 0$, tout $x \in [0, L]$, tout $\mathbf{C}, \hat{\mathbf{C}} \in \mathbb{R}^4$,*

$$\begin{aligned} |f_N(t, x, \mathbf{C}) - f_N(t, x, \hat{\mathbf{C}})| \leq & M_1(|P|, |\hat{P}|) |N - \hat{N}| \\ & + (\tau + M_2(|P|, |\hat{P}|)) |P - \hat{P}| \\ & + (\mu_z + \tau) |Z - \hat{Z}| \\ & + (\mu_d + \tau) |D - \hat{D}| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |f_P(t, x, \mathbf{C}) - f_P(t, x, \hat{\mathbf{C}})| \leq & M_1(|P|, |\hat{P}|) |N - \hat{N}| \\ & + (\tau + m_p + M_2(|P|, |\hat{P}|) + M_3(|Z|, |\hat{Z}|)) |P - \hat{P}| \\ & + M_3(|Z|, |\hat{Z}|) |Z - \hat{Z}| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |f_Z(t, x, \mathbf{C}) - f_Z(t, x, \hat{\mathbf{C}})| \leq & (m_z + \mu_z + \tau + (a_p + a_d) M_3(|Z|, |\hat{Z}|)) |Z - \hat{Z}| \\ & + a_p M_3(|Z|, |\hat{Z}|) |P - \hat{P}| \\ & + a_d M_3(|Z|, |\hat{Z}|) |D - \hat{D}| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |f_D(t, x, \mathbf{C}) - f_D(t, x, \hat{\mathbf{C}})| \leq & (m_z + (a_d + (1 - a_p)) M_3(|Z|, |\hat{Z}|)) |Z - \hat{Z}| \\ & + (m_p + (1 - a_p) M_3(|Z|, |\hat{Z}|)) |P - \hat{P}| \\ & + (\mu_d + \tau + a_d M_3(|Z|, |\hat{Z}|)) |D - \hat{D}| \end{aligned}$$

où

$$M_1(|P|, |\hat{P}|) = \mu_p(1 - \gamma) \max\left(\frac{1}{2k_n}(|P| + |\hat{P}|), 1\right)$$

$$M_2(|P|, |\hat{P}|) = \mu_p(1 - \gamma) \max\left(\frac{1}{2k_n}(|P| + |\hat{P}|), 1, K_I|P|\right)$$

et

$$M_3(|Z|, |\hat{Z}|) = g_z \max\left(\frac{3\sqrt{3}}{16\sqrt{k_z}}(|Z| + |\hat{Z}|), 1\right)$$

Preuve: il suffit de remarquer que les fonctions l et g sont de classe C^1 sur $\mathbb{R}$ et que pour tout $x \in \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned} |l'(x)| &\leq \frac{1}{k_n} \\ |g'(x)| &\leq \frac{3\sqrt{3}}{8\sqrt{k_z}} \end{aligned}$$

□

Proposition 3.5.1 *Pour $t \in [0, T]$, $\mathbf{C}(t), \hat{\mathbf{C}}(t) \in \mathbf{H}^1$, il existe une constante L_∞ dépendant de $\|\mathbf{C}(t)\|_\infty$ et $\|\hat{\mathbf{C}}(t)\|_\infty$ telle que, l'opérateur, $\mathbf{G}$, de la proposition 3.3.1 vérifie,*

$$\|\mathbf{G}\mathbf{C}(t) - \mathbf{G}\hat{\mathbf{C}}(t)\| \leq L_\infty \|\mathbf{C}(t) - \hat{\mathbf{C}}(t)\|$$

Preuve: avec le point (P3) du lemme 3.5.1, et comme d'après le lemme 3.3.1, $\mathbf{H}^1 \subset \mathbf{L}^\infty$, il vient,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{G}\mathbf{C}(t) - \mathbf{G}\hat{\mathbf{C}}(t)\|^2 &= \int_0^L |f_N(t, x, \mathbf{C}(t, x)) - f_N(t, x, \hat{\mathbf{C}}(t, x)) + \lambda(N(t, x) - \hat{N}(t, x))|^2 \\ &\quad + |f_P(t, x, \mathbf{C}(t, x)) - f_P(t, x, \hat{\mathbf{C}}(t, x)) + \lambda(P(t, x) - \hat{P}(t, x))|^2 \\ &\quad + |f_Z(t, x, \mathbf{C}(t, x)) - f_Z(t, x, \hat{\mathbf{C}}(t, x)) + \lambda(Z(t, x) - \hat{Z}(t, x))|^2 \\ &\quad + |f_D(t, x, \mathbf{C}(t, x)) - f_D(t, x, \hat{\mathbf{C}}(t, x)) + \lambda(D(t, x) - \hat{D}(t, x))|^2 dx \\ &\leq cte[(M_1(\|P(t)\|_\infty, \|\hat{P}(t)\|_\infty)^2 + \lambda^2)\|N(t) - \hat{N}(t)\|_{L^2(0,L)}^2 \\ &\quad + (\tau + M_2(\|P(t)\|_\infty, \|\hat{P}(t)\|_\infty))^2\|P(t) - \hat{P}(t)\|_{L^2(0,L)}^2 \\ &\quad + (\mu_z + \tau)^2\|Z(t) - \hat{Z}(t)\|_{L^2(0,L)}^2 \\ &\quad + (\mu_d + \tau)^2\|D(t) - \hat{D}(t)\|_{L^2(0,L)}^2] \\ &\quad + \dots \\ &\leq L_\infty(\|\mathbf{C}(t)\|_\infty, \|\hat{\mathbf{C}}(t)\|_\infty)^2 \|\mathbf{C}(t) - \hat{\mathbf{C}}(t)\|^2 \end{aligned}$$

□

3.5.2 Unicité de la solution

Proposition 3.5.2 *Avec l'hypothèse 3.5.1, la solution faible, $\mathbf{C} \in W(\mathbf{H}^1)$, du système (3.1)(3.2), est unique.*

Preuve: supposons qu'il existe deux solutions $\mathbf{C}^1$ et $\mathbf{C}^2 \in W(\mathbf{H}^1)$. Elles vérifient,

$$\forall \phi \in \mathbf{H}^1, \quad \left(\frac{d}{dt}(\mathbf{C}^1 - \mathbf{C}^2), \phi \right) + a(t, \mathbf{C}^1 - \mathbf{C}^2, \phi) = (\mathbf{G}\mathbf{C}^1 - \mathbf{G}\mathbf{C}^2, \phi),$$

Prenons $\phi = \mathbf{C}^1 - \mathbf{C}^2$. En utilisant la coercivité de la forme bilinéaire a et l'inégalité de Cauchy-Schwarz, il vient,

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\mathbf{C}^1(t) - \mathbf{C}^2(t)\|^2 + c_0 \|\mathbf{C}^1(t) - \mathbf{C}^2(t)\|_1^2 \leq \|\mathbf{G}\mathbf{C}^1(t) - \mathbf{G}\mathbf{C}^2(t)\| \|\mathbf{C}^1(t) - \mathbf{C}^2(t)\|$$

En utilisant l'inégalité de Young, on a,

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\mathbf{C}^1(t) - \mathbf{C}^2(t)\|^2 + c_0 \|\mathbf{C}^1(t) - \mathbf{C}^2(t)\|_1^2 \leq \frac{1}{2\alpha} \|\mathbf{G}\mathbf{C}^1(t) - \mathbf{G}\mathbf{C}^2(t)\|^2 + \frac{\alpha}{2} \|\mathbf{C}^1(t) - \mathbf{C}^2(t)\|^2$$

En choisissant $\alpha = 2c_0$,

$$\frac{d}{dt} \|\mathbf{C}^1(t) - \mathbf{C}^2(t)\|^2 \leq \frac{1}{2c_0} \|\mathbf{G}\mathbf{C}^1(t) - \mathbf{G}\mathbf{C}^2(t)\|^2$$

D'après la proposition (3.5.1) on a,

$$\frac{d}{dt} \|\mathbf{C}^1(t) - \mathbf{C}^2(t)\|^2 \leq \frac{1}{2c_0} L_\infty^2(t) \|\mathbf{C}^1(t) - \mathbf{C}^2(t)\|^2$$

Ainsi, en intégrant sur $[0, t]$ et en utilisant le lemme de Gronwall (ce qui est possible car pour $\mathbf{C}^1(t)$ et $\mathbf{C}^2(t) \in W(\mathbf{H}^1)$, $L_\infty^2(t) \in L^1(0, T)$ et $\|\mathbf{C}^1(t) - \mathbf{C}^2(t)\|^2 \in L^\infty(0, T)$),

$$\|\mathbf{C}^1(t) - \mathbf{C}^2(t)\|^2 \leq \|\mathbf{C}^1(0) - \mathbf{C}^2(0)\|^2 \exp\left(\int_0^t \frac{1}{2c_0} L_\infty^2(s) ds\right)$$

Cette inéquation montre l'unicité de la solution lorsque $\mathbf{C}^1(t)$ et $\mathbf{C}^2(t)$ sont deux solutions avec la même donnée initiale $\mathbf{C}^0$. Elle exprime également la continuité de la solution par rapport à la condition initiale. □

3.5.3 Remarque sur la simplification du résultat d'existence

On montre dans ce paragraphe comment la preuve du résultat d'existence peut être simplifiée lorsque on fait l'hypothèse 3.5.1 sur L_I . Considérons l'opérateur de point fixe Θ , comme étant défini par le système originel, c'est-à-dire avec $\mathbf{GC}$ comme second membre.

Proposition 3.5.3 *Soit $\hat{\mathbf{C}}$ fixé dans $W(\mathbf{H}^1) \subset L^2(0, T, \mathbf{H}^1) \cap L^\infty(0, T, \mathbf{H})$ et $\mathbf{C}^0 \in \mathbf{H}$.*

Le problème:

trouver $\mathbf{C} \in W(\mathbf{H}^1)$ tel que,

$$\forall \phi \in \mathbf{H}^1, \quad \left(\frac{d\mathbf{C}}{dt}, \phi \right) + a(t, \mathbf{C}, \phi) = (\mathbf{G}\hat{\mathbf{C}}, \phi),$$

au sens de $\mathcal{D}'([0, T[)$,

et $\mathbf{C}(0) = \mathbf{C}^0$,

admet une unique solution définissant un opérateur Θ sur $W(\mathbf{H}^1)$, $\Theta\hat{\mathbf{C}} = \mathbf{C}$.

Preuve: voir la preuve de la proposition 3.4.2. $\square$

Montrons alors que pour T petit mais indépendant des conditions initiales, $\mathbf{C}^0$,

(1) Θ laisse une boule de $L^\infty(0, T, \mathbf{H})$ invariante.

(2) Θ est une contraction sur cette boule.

Par application du théorème du point fixe de Banach, on a alors une (unique) solution sur $(0, T)$, pour T suffisamment petit. Mais comme T ne dépend pas de $\mathbf{C}^0$, on peut réitérer le procédé sur $(T, 2T)$, ... jusqu'à obtenir une solution sur l'intervalle de temps désiré.

Lemme 3.5.2 *Il existe un temps $T < \frac{2c_0}{M_g}$, indépendant de $\mathbf{C}^0$, tel que:*

(1) *La boule, $B = \{\mathbf{C} \in W(\mathbf{H}^1), \quad \|\mathbf{C}\|_{L^\infty(0, T, \mathbf{H})} \leq R, \quad R \geq \frac{\|\mathbf{C}^0\|}{\sqrt{1 - (M_g/2c_0)T}}\}$, est invariante par Θ , $\Theta B \subset B$*

(2) *$\forall \mathbf{C}^1, \mathbf{C}^2 \in B$, on a, $\|\Theta\mathbf{C}^1 - \Theta\mathbf{C}^2\|_{L^\infty(0, T, \mathbf{H})} \leq l\|\mathbf{C}^1 - \mathbf{C}^2\|_{L^\infty(0, T, \mathbf{H})}$, avec $l < 1$.*

Preuve:

(1) En reprenant un calcul similaire à celui de la preuve du lemme 3.4.2, on a,

$$\|\mathbf{C}(t)\|^2 \leq \frac{1}{2c_0} \int_0^t \|\mathbf{G}\hat{\mathbf{C}}(s)\|^2 ds + \|\mathbf{C}^0\|^2$$

soit,

$$\|\mathbf{C}(t)\|^2 \leq \frac{M_g}{2c_0} \int_0^t \|\hat{\mathbf{C}}(s)\|^2 ds + \|\mathbf{C}^0\|^2$$

et donc,

$$\|\mathbf{C}\|_{L^\infty(0,T,\mathbf{H})}^2 \leq \frac{M_g}{2c_0} T \|\hat{\mathbf{C}}\|_{L^\infty(0,T,\mathbf{H})}^2 + \|\mathbf{C}^0\|^2$$

Si $\|\hat{\mathbf{C}}\|_{L^\infty(0,T,\mathbf{H})} \leq R$, alors $\|\mathbf{C}\|_{L^\infty(0,T,\mathbf{H})} \leq R$, pour, $\frac{M_g}{2c_0} T R^2 + \|\mathbf{C}^0\|^2 \leq R^2$. Ceci impose, $\frac{M_g}{2c_0} T - 1 < 0$ et $R \geq \frac{\|\mathbf{C}^0\|}{\sqrt{1 - (M_g/2c_0)T}}$.

(2) En reprenant un calcul similaire à celui de la preuve de la proposition 3.5.2, on a,

$$\frac{d}{dt} \|\mathbf{C}^1(t) - \mathbf{C}^2(t)\|^2 \leq \frac{1}{2c_0} \|\mathbf{G}\hat{\mathbf{C}}^1(t) - \mathbf{G}\hat{\mathbf{C}}^2(t)\|^2$$

Comme $\mathbf{C}^1(0) = \mathbf{C}^2(0) = \mathbf{C}^0$, il vient,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{C}^1(t) - \mathbf{C}^2(t)\|^2 &\leq \frac{1}{2c_0} \int_0^t \|\mathbf{G}\hat{\mathbf{C}}^1(s) - \mathbf{G}\hat{\mathbf{C}}^2(s)\|^2 ds \\ &\leq \frac{1}{2c_0} \int_0^t L_\infty^2(s) \|\hat{\mathbf{C}}^1(s) - \hat{\mathbf{C}}^2(s)\|^2 ds \end{aligned}$$

et,

$$\|\mathbf{C}^1 - \mathbf{C}^2\|_{L^\infty(0,T,\mathbf{H})}^2 \leq \frac{1}{2c_0} \int_0^T L_\infty^2(s) ds \|\hat{\mathbf{C}}^1 - \hat{\mathbf{C}}^2\|_{L^\infty(0,T,\mathbf{H})}^2$$

Comme $L_\infty^2(t)$ est dans L^1 , il existe un temps T , dépendant de $\hat{\mathbf{C}}^1$ et $\hat{\mathbf{C}}^2$, tel que, pour $l < 1$,

$$\int_0^T L_\infty^2(s) ds \leq l 2c_0$$

□

3.6 Positivité

Nous donnons dans ce qui suit un dernier résultat concernant la positivité de la solution du modèle biologique (avec valeur absolue dans L_N). La démonstration nécessite de prendre les 4 équations séparément en détail et dans un ordre convenable. On commence par montrer la positivité de Z et P . La démonstration de la positivité de D utilise la positivité de Z et P . Enfin pour montrer que la dernière variable N est positive, on utilise le fait que Z , P et D le sont.

Lemme 3.6.1 *Si N^0, P^0, Z^0 et D^0 sont positifs alors les solutions du modèle biologique, N, P, Z et D sont positives pour tout $t \in [0, T]$.*

Preuve:

- rappelons que pour tout $\mathbf{C} \in \mathbf{H}^1$ et tout $t \in [0, T]$

$$a_N(t, N, N) \geq 0$$

$$a_P(t, P, P) \geq 0$$

$$a_Z(t, Z, Z) \geq 0$$

$$a_D(t, D, D) \geq 0$$

- Z est positif:

soit $\mathbf{C}$ la solution faible du modèle NPZD. Prenons la fonction test

$$-Z^- = -\max(0, -Z)$$

Ceci est possible car $Z^-(t) \in H^1(0, L)$. Multiplions les deux membres de l'équation pour le zooplancton par $-Z^-$ et intégrons sur $(0, L)$. Comme,

$$\int_0^L \frac{\partial Z(t, x)}{\partial t} Z^-(t, x) dx = -\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|Z^-(t)\|_{L^2(0, L)}^2$$

et,

$$a_Z(t, Z(t), Z^-(t)) = -a_Z(t, Z(t)^-, Z(t)^-)$$

il vient,

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|Z(t)^-\|_{L^2(0, L)}^2 + a_Z(t, Z(t)^-, Z(t)^-) = -(g_Z(\mathbf{C}(t)), Z(t)^-)$$

Regardons en détail le terme $(g_Z(\mathbf{C}), Z^-)$.

$$(g_Z(\mathbf{C}), Z^-)_{L^2(0,L)} = \int_0^L (a_p \frac{g_z P^2}{k_z + P^2} Z Z^- + a_d \frac{g_z D^2}{k_z + D^2} Z Z^- - m_z Z Z^- - \mu_z Z Z^-) \mathbb{1}_{[0,l]} + (-\tau Z Z^-) \mathbb{1}_{[l,L]} + \lambda Z Z^-$$

Sachant que $Z Z^- = -(Z^-)^2$, on a,

$$(g_Z(\mathbf{C}), Z^-)_{L^2(0,L)} = \int_0^L (-(a_p \frac{g_z P^2}{k_z + P^2})(Z^-)^2 - (a_d \frac{g_z D^2}{k_z + D^2})(Z^-)^2 + m_z (Z^-)^2 + \mu_z (Z^-)^2) \mathbb{1}_{[0,l]} + (\tau (Z^-)^2) \mathbb{1}_{[l,L]} - \lambda (Z^-)^2$$

et donc

$$(g_Z(\mathbf{C}), Z^-)_{L^2(0,L)} \geq \int_0^L (-(a_p \frac{g_z P^2}{k_z + P^2})(Z^-)^2 - (a_d \frac{g_z D^2}{k_z + D^2})(Z^-)^2) \mathbb{1}_{[0,l]} - \lambda (Z^-)^2$$

ou encore,

$$-(g_Z(\mathbf{C}), Z^-)_{L^2(0,L)} \leq \int_0^L ((a_p \frac{g_z P^2}{k_z + P^2})(Z^-)^2 + (a_d \frac{g_z D^2}{k_z + D^2})(Z^-)^2) + \lambda (Z^-)^2$$

Ainsi,

$$-(g_Z(\mathbf{C}), Z^-)_{L^2(0,L)} \leq \int_0^L (g_z(a_p + a_d) + \lambda)(Z^-)^2 = (g_z(a_p + a_d) + \lambda) \|Z^-\|_{L^2(0,L)}^2$$

Comme $a_Z(t, Z^-, Z^-) \geq 0$, on obtient,

$$\frac{d}{dt} \|Z^-\|_{L^2(0,L)}^2 \leq 2(g_z(a_p + a_d) + \lambda) \|Z^-\|_{L^2(0,L)}^2$$

En intégrant cette inégalité sur $[0, t]$ et en utilisant le lemme de Gronwall on obtient,

$$\|Z^-(t)\|_{L^2(0,L)}^2 \leq \|Z^-(0)\|_{L^2(0,L)}^2 \exp(2(g_z(a_p + a_d) + \lambda)t)$$

et donc Z est positif.

- P est positif:

de la même manière, examinons le terme $(g_P(\mathbf{C}), P^-)_{L^2(0,L)}$.

$$\begin{aligned}
(g_P(\mathbf{C}), P^-)_{L^2(0,L)} &= \int_0^L (\mu_p(1-\gamma)L_IL_NPP^- - (\frac{g_zP^2}{k_z+P^2}ZP^-) - m_pPP^-)\mathbb{I}_{]0,l]} \\
&\quad + (-\tau PP^-)\mathbb{I}_{]l,L[} + \lambda PP^- \\
&= \int_0^L (-\mu_p(1-\gamma)L_IL_N(P^-)^2 - (\frac{g_zP^2}{k_z+P^2}ZP^-) + m_p(P^-)^2)\mathbb{I}_{]0,l]} \\
&\quad + (\tau(P^-)^2)\mathbb{I}_{]l,L[} - \lambda(P^-)^2 \\
&\geq \int_0^L (-\mu_p(1-\gamma)L_IL_N(P^-)^2 - (\frac{g_zP^2}{k_z+P^2}ZP^-))\mathbb{I}_{]0,l]} - \lambda(P^-)^2 \\
-(g_P(\mathbf{C}), P^-)_{L^2(0,L)} &\leq \int_0^L \mu_p(1-\gamma)L_IL_N(P^-)^2 + (\frac{-g_zP}{k_z+P^2}Z(P^-)^2)\mathbb{I}_{]0,l]} + \lambda(P^-)^2
\end{aligned}$$

La fonction $x \mapsto \frac{-x}{k_z+x^2}$ est majorée par $\frac{1}{2\sqrt{k_z}}$ sur $\mathbb{R}$.

L_N et L_I sont majorés par 1.

$Z(t)$, étant solution du modèle biologique, est dans $H^1(0, L) \subset L^\infty(0, L)$, et l'on a $\forall t, \quad Z(t) \leq \|Z(t)\|_\infty$. Alors,

$$-(g_P(\mathbf{C}), P^-)_{L^2(0,L)} \leq (\lambda + \mu_p(1-\gamma) + g_z \frac{1}{2\sqrt{k_z}} \|Z(t)\|_\infty) \|P^-(t)\|_{L^2(0,L)}^2$$

On conclut de la même manière pour obtenir,

$$\|P^-(t)\|_{L^2(0,L)}^2 \leq \|P^-(0)\|_{L^2(0,L)}^2 \exp\left(\int_0^t 2(\lambda + \mu_p(1-\gamma) + g_z \frac{1}{2\sqrt{k_z}} \|Z(s)\|_\infty) ds\right)$$

- D est positif:

$$\begin{aligned}
(g_D(\mathbf{C}), D^-)_{L^2(0,L)} &= \int_0^L ((1-a_p)(\frac{g_zP^2}{k_z+P^2}ZD^-) - a_d(\frac{g_zD^2}{k_z+D^2}ZD^-) + m_pPD^- + m_zZD^- + \mu_d(D^-)^2)\mathbb{I}_{]0,l]} \\
&\quad + (\tau(D^-)^2)\mathbb{I}_{]l,L[} + \lambda DD^-
\end{aligned}$$

Comme P, Z et D^- sont positifs,

$$\begin{aligned}
(g_D(\mathbf{C}), D^-)_{L^2(0,L)} &\geq \int_0^L (-a_d(\frac{g_zD^2}{k_z+D^2}ZD^-))\mathbb{I}_{]0,l]} - \lambda(D^-)^2 \\
-(g_D(\mathbf{C}), D^-)_{L^2(0,L)} &\leq \int_0^L (-a_d(\frac{g_zD}{k_z+D^2}Z(D^-)^2))\mathbb{I}_{]0,l]} + \lambda(D^-)^2 \\
-(g_D(\mathbf{C}), D^-)_{L^2(0,L)} &\leq \int_0^L (a_d(g_z \frac{1}{2\sqrt{k_z}} \|Z\|_\infty)(D^-)^2)\mathbb{I}_{]0,l]} + \lambda(D^-)^2 \\
-(g_D(\mathbf{C}), D^-)_{L^2(0,L)} &\leq (\lambda + a_d(g_z \frac{1}{2\sqrt{k_z}} \|Z\|_\infty)) \|D^-\|_{L^2(0,L)}^2
\end{aligned}$$

Donc,

$$\frac{d}{dt} \|D^-\|_{L^2(0,L)}^2 \leq 2(\lambda + a_d(g_z \frac{1}{2\sqrt{k_z}} \|Z\|_\infty)) \|D^-\|_{L^2(0,L)}^2$$

ce qui permet à nouveau de conclure.

- N est positif:

$$\begin{aligned} (g_N(\mathbf{C}), N^-)_{L^2(0,L)} &= \int_0^L (-\mu_p(1-\gamma)L_I L_N P N^- + \mu_z Z N^- + \mu_d D N^-) \mathbb{I}_{[0,l]} \\ &\quad + (\tau(P+Z+D)N^-) \mathbb{I}_{[l,L]} + \lambda N N^- \end{aligned}$$

Comme P, Z, D et N^- sont positifs,

$$\begin{aligned} (g_N(\mathbf{C}), N^-)_{L^2(0,L)} &\geq \int_0^L (-\mu_p(1-\gamma)L_I L_N P N^-) \mathbb{I}_{[0,l]} - \lambda (N^-)^2 \\ -(g_N(\mathbf{C}), N^-)_{L^2(0,L)} &\leq \int_0^L (-\mu_p(1-\gamma)L_I \frac{1}{k_n + |N|} P (N^-)^2) \mathbb{I}_{[0,l]} + \lambda (N^-)^2 \end{aligned}$$

Ce qui permet à nouveau de conclure et achève la preuve du lemme.

□

Ainsi, si les concentrations initiales sont positives alors les concentrations à tout temps sont positives et les modèles avec et sans valeur absolue pour le terme L_N sont équivalents.

3.7 Cas du modèle NNPZD-DOM

Dans ce paragraphe on montre que la démarche utilisée pour obtenir existence, unicité et positivité de la solution du modèle NPZD, s'applique également au modèle NNPZD-DOM. Commençons par rappeler les équations de ce dernier modèle. Pour $i = 1$ à 6:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial C_i}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} (d(t, x) \frac{\partial C_i}{\partial x}) + \delta_{i,5} v_d \frac{\partial C_i}{\partial x} = f_i(t, x, \mathbf{C}) & t \in]0, T], x \in]0, L[\\ \frac{\partial C_i}{\partial x}(t, 0) = \frac{\partial C_i}{\partial x}(t, L) = 0 & t \in]0, T] \\ C_i(0, x) = C^0(x) & x \in]0, L[\end{array} \right. \quad (3.7)$$

avec,

$$\left\{ \begin{array}{lcl} f_{NO_3}(t, x, \mathbf{C}) & = & (-\mu_p L_I(t, x, P) L_{NO_3}(NO_3, NH_4) P + \mu_n NH_4) \mathbb{I}_{]0, l]}(x) \\ & & + (\tau(NH_4 + P + Z + D + DOM) + \frac{d}{dx}((x/l)^{h_r}) \int_0^l m_z Z^2 dx) \mathbb{I}_{]l, L]}(x) \\ f_{NH_4}(t, x, \mathbf{C}) & = & (-\mu_p L_I(t, x, P) L_{NH_4}(NH_4) P + f_n(\gamma \mu_p L_I(t, x, P)(L_{NO_3}(NO_3, NH_4) \\ & & + L_{NH_4}(NH_4)) P + \mu_z Z + \mu_d D) - \mu_n NH_4 + \mu_{DOM} DOM) \mathbb{I}_{]0, l]}(x) \\ & & + (-\tau NH_4) \mathbb{I}_{]l, L]}(x) \\ f_P(t, x, \mathbf{C}) & = & ((1 - \gamma) \mu_p L_I(t, x, P)(L_{NO_3}(NO_3, NH_4) + L_{NH_4}(NH_4)) P \\ & & - G_P(P, Z) - m_p P) \mathbb{I}_{]0, l]}(x) \\ & & + (-\tau P) \mathbb{I}_{]l, L]}(x) \\ f_Z(t, x, \mathbf{C}) & = & (a_p G_P(P, Z) + a_d G_D(D, Z) - m_z Z^2 - \mu_z Z) \mathbb{I}_{]0, l]}(x) \\ & & + (-\tau Z) \mathbb{I}_{]l, L]}(x) \\ f_D(t, x, \mathbf{C}) & = & ((1 - a_p) G_P(P, Z) - a_d G_D(D, Z) + m_p P - \mu_d D) \mathbb{I}_{]0, l]}(x) \\ & & + (-\tau D) \mathbb{I}_{]l, L]}(x) \\ f_{DOM}(t, x, \mathbf{C}) & = & ((1 - f_n)(\gamma \mu_p L_I(t, x, P)(L_{NO_3}(NO_3, NH_4) + L_{NH_4}(NH_4)) P \\ & & + \mu_z Z + \mu_d D) - \mu_{DOM} DOM) \mathbb{I}_{]0, l]}(x) \\ & & + (-\tau DOM) \mathbb{I}_{]l, L]}(x) \end{array} \right. \quad (3.8)$$

Avec,

$$L_{NH_4}(NH_4) = \frac{NH_4}{k_n + NH_4}$$

$$L_{NO_3}(NO_3, NH_4) = \frac{k_n NO_3}{(k_n + NH_4)(k_n + NO_3 + NH_4)}$$

donc,

$$L_{NO_3} + L_{NH_4}(NO_3, NH_4) = \frac{NO_3 + NH_4}{(k_n + NO_3 + NH_4)}$$

et $G_P(P, Z)$, $G_D(D, Z)$ inchangés.

La seule difficulté supplémentaire apparaissant, par rapport au modèle NPZD, provient donc du terme de mortalité du zooplancton dans f_Z , $-m_z Z^2$, que l'on retrouve aussi dans f_D , $\frac{d}{dx}((x/l)^{h_r}) \int_0^l m_z Z^2 dx$. Bien que ces deux termes n'apparaissent pas dans la

même équation, il suffit, pour que tout rentre dans l'ordre, de montrer le lemme suivant.

Lemme 3.7.1 *L'opérateur*

$$F_Z Z = -m_z Z^2 \mathbb{1}_{]0,l[}(x) + \frac{d}{dx}((x/l)^{h_r}) \int_0^l m_z Z^2 dx \mathbb{1}_{[l,L[}(x), \quad x \in]0, L[, t \in]0, T[$$

est bien défini de $L^2(0, T, H^1(0, L)) \cap L^\infty(0, T, L^2(0, L))$ dans $L^2(0, T, L^2(0, L))$.

De plus, on a la propriété de Lipschitz:

$\forall Z(t), \hat{Z}(t) \in H^1(0, L)$, il existe une constante L_∞ dépendant de $\|Z(t)\|_{L^\infty(0,L)}$ et $\|\hat{Z}(t)\|_{L^\infty(0,L)}$ telle que

$$\|F_Z \hat{Z}(t) - F_Z Z(t)\|_{L^2(0,L)} \leq L_\infty \|Z(t) - \hat{Z}(t)\|_{L^2(0,L)}$$

Preuve:

$$\begin{aligned} \|F_Z Z\|_{L^2(0,T,L^2(0,L))}^2 &\leq 2 \left[\int_0^T \int_0^L m_z^2 Z^4(t, x) \mathbb{1}_{]0,l[}(x) dx dt \right. \\ &\quad \left. + \int_0^L \left(\frac{d}{dx}((x/l)^{h_r}) \right)^2 \mathbb{1}_{[l,L[}(x) dx \int_0^T \left(\int_0^l m_z Z(t, x)^2 dx \right)^2 dt \right] \end{aligned}$$

Comme,

$$\int_0^L m_z^2 Z^4(t, x) \mathbb{1}_{]0,l[}(x) dx \leq \|Z(t)\|_{L^\infty(0,L)}^2 \|Z(t)\|_{L^2(0,L)}^2 \leq cte_1 \|Z(t)\|_{H^1(0,L)}^2 \|Z(t)\|_{L^2(0,L)}^2$$

on a,

$$\int_0^T \int_0^L m_z^2 Z^4(t, x) \mathbb{1}_{]0,l[}(x) dx \leq cte_1 \|Z\|_{L^2(0,T,H^1(0,L))}^2 \|Z\|_{L^\infty(0,T,L^2(0,L))}^2$$

De plus, $\left(\frac{d}{dx}((x/l)^{h_r}) \right)^2 \mathbb{1}_{[l,L[}(x) \in L^1(0, L)$ et $\int_0^L \left(\frac{d}{dx}((x/l)^{h_r}) \right)^2 \mathbb{1}_{[l,L[}(x) dx = cte_2$.

Enfin,

$$\left(\int_0^l m_z Z(t, x)^2 dx \right)^2 \leq m_z^2 \|Z(t)\|_{L^2(0,L)}^4 \leq m_z^2 \|Z(t)\|_{L^2(0,L)}^2 \|Z(t)\|_{H^1(0,L)}^2$$

et donc,

$$\int_0^T \left(\int_0^l m_z Z(t, x)^2 dx \right)^2 dt \leq m_z^2 \|Z\|_{L^2(0,T,H^1(0,L))}^2 \|Z\|_{L^\infty(0,T,L^2(0,L))}^2$$

Finalement,

$$\|F_Z Z\|_{L^2(0,T,L^2(0,L))}^2 \leq 2m_z^2 (cte_1 + cte_2) \|Z\|_{L^2(0,T,H^1(0,L))}^2 \|Z\|_{L^\infty(0,T,L^2(0,L))}^2$$

et l'opérateur est bien défini.

Enfin, on a,

$$\begin{aligned} \|F_Z \hat{Z}(t) - F_Z Z(t)\|_{L^2(0,L)}^2 \leq & 2 \left[\int_0^L m_z^2 (Z(t,x)^2 - \hat{Z}(t,x)^2)^2 \mathbb{1}_{[0,l]}(x) dx \right. \\ & \left. + m_z^2 \left(\int_0^l Z(t,x)^2 - \hat{Z}(t,x)^2 dx \right)^2 \int_0^L \mathbb{1}_{[l,L]}(x) \left(\frac{d}{dx} ((x/l)^{h_r}) \right)^2 dx \right] \end{aligned}$$

et en utilisant l'identité $a^2 - b^2 = (a - b)(a + b)$ et l'inégalité de Cauchy-Schwarz on montre que,

$$\|F_Z \hat{Z}(t) - F_Z Z(t)\|_{L^2(0,L)}^2 \leq m_z^2 (1 + Lct e_2) \|\hat{Z}(t) + Z(t)\|_{L^\infty(0,L)}^2 \|\hat{Z}(t) - Z(t)\|_{L^2(0,L)}^2$$

□

Concernant, la positivité de la solution, la preuve est un peu fastidieuse, mais se calque sur ce qui a été fait pour le modèle NPZD. On commence par montrer que Z , et P sont positifs. Sachant cela, on montre que D est positif. On peut alors montrer que DOM est positif, puis NH_4 et on termine par NO_3 .

3.8 Annexe: existence-unicité par la méthode des semi-groupes

Cette dernière partie est assez technique pour qui n'a jamais étudié la théorie des semi-groupes appliquée aux équations aux dérivées partielles. Celle-ci a le grand avantage de permettre de voir certaines EDP comme des équations différentielles dans des espaces de Banach. Par contre son inconvénient réside dans le fait que la prise en compte de la dépendance temporelle de d , le coefficient de diffusion, n'est pas très aisée. Elle oblige en fait à faire des développements lourds, techniques et difficiles pour passer de la théorie des semi-groupes à celle des opérateurs d'évolution. Nous la négligerons donc et donnerons en fin de chapitre quelques commentaires et références pour traiter le cas où d dépend du temps.

Dans tous les cas et contrairement au début de ce chapitre, nous supposons que d est assez régulier. Précisons ceci.

Hypothèse 3.8.1

- $d \in C^1([0, L], \mathbb{R})$.
- $d(x) \geq d_0 > 0, \quad \forall x \in [0, L]$.

Nous allons également être obligé de supposer la fonction $L_I(t, x, P)$ plus régulière qu'elle ne l'était auparavant.

Hypothèse 3.8.2

- L_I est une fonction continue de $\mathbb{R}^+ \times [0, L] \times \mathbb{R}$ dans $[0, 1]$.
- Il existe une constante K_I telle que

$$|L_I(t, x, P) - L_I(s, x, \hat{P})| \leq K_I(|t-s| + |P - \hat{P}|) \quad \forall t, s \in \mathbb{R}^+, \quad \forall P, \hat{P} \in \mathbb{R} \quad \text{et} \quad \forall x \in [0, L].$$

Enfin dans tout ce qui suit, le terme d'advection des détritus, D , est traité avec les termes de réaction non-linéaires et non pas avec les termes de diffusion. Ainsi, sans changer les notations, la fonction $f_D(t, x, \mathbf{C})$ devient $f_D(t, x, \mathbf{C}, \frac{\partial D}{\partial x})$. Ce changement n'est pas nécessaire dans le cas où d ne dépend pas du temps, il l'est par contre dans le cas contraire.

3.8.1 Propriétés de l'opérateur linéaire, A , défini par les termes de diffusion

Dans cette section on montre que l'opérateur linéaire défini par les termes de diffusion est un opérateur maximal monotone auto-adjoint et donc qu'il génère un C^0 semi-groupe. On montre ensuite qu'il génère également un semi-groupe analytique.

 A est auto-adjoint maximal monotone

On note $A(x, \frac{\partial}{\partial x})$ l'opérateur différentiel suivant,

$$A(x, \frac{\partial}{\partial x}) = \text{diag}[-\frac{\partial}{\partial x}(d\frac{\partial}{\partial x}), -\frac{\partial}{\partial x}(d\frac{\partial}{\partial x}), -\frac{\partial}{\partial x}(d\frac{\partial}{\partial x}), -\frac{\partial}{\partial x}(d\frac{\partial}{\partial x})]$$

Avec cet opérateur différentiel et les conditions aux limites de Neumann pour les espèces biologiques, on définit un opérateur linéaire non-borné sur $\mathbf{H}$ dont nous donnons maintenant quelques caractéristiques.

Proposition 3.8.1 *Pour tout $f \in \mathbf{H}$ et tout $\lambda > 0$, il existe une unique solution faible $\mathbf{C} \in \mathbf{H}^1$ au problème:*

$$\begin{aligned} A(x, \frac{\partial}{\partial x})\mathbf{C} + \lambda\mathbf{C} &= f \\ \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial x}(0) &= \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial x}(L) = 0 \end{aligned}$$

Preuve: la preuve est classique et l'on peut la trouver par exemple dans Dautray et Lions [30]. Donnons en les points principaux. On définit une forme bilinéaire a sur $\mathbf{H}^1 \times \mathbf{H}^1$ par:

$$a(\mathbf{C}, \hat{\mathbf{C}}) = \int_0^L \sum_{i=1}^4 d(x) \frac{\partial C_i}{\partial x} \frac{\partial \hat{C}_i}{\partial x} dx + \int_0^L \lambda \sum_{i=1}^4 C_i \hat{C}_i$$

et une forme linéaire l sur $\mathbf{H}^1$ par

$$l(\mathbf{C}) = \int_0^L \sum_{i=1}^4 f_i C_i dx$$

a et l sont continues sur $\mathbf{H}^1$ car,

$$\begin{aligned} |a(\mathbf{C}, \hat{\mathbf{C}})| &\leq \max(\|d\|_\infty, \lambda) \|\mathbf{C}\|_1 \|\hat{\mathbf{C}}\|_1, \\ |l(\mathbf{C})| &\leq \|f\| \|\mathbf{C}\| \leq \|f\| \|\mathbf{C}\|_1 \end{aligned}$$

a est $\mathbf{H}_1$ -elliptique,

$$a(\mathbf{C}, \mathbf{C}) \geq \min(d_0, \lambda) \|\mathbf{C}\|_1^2$$

On peut alors appliquer le théorème de Lax-Milgram qui donne l'existence et l'unicité d'une solution au problème,

$$a(\mathbf{C}, \hat{\mathbf{C}}) = l(\hat{\mathbf{C}}) \quad \forall \hat{\mathbf{C}} \in \mathbf{H}^1$$

□

Proposition 3.8.2 *L'opérateur $A : D(A) \subset \mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H}$ défini par,*

$$\left\{ \begin{array}{l} D(A) = \mathbf{H}^2 \cap \{\mathbf{C} \in \mathbf{H}^1, \quad \frac{\partial C_i}{\partial x}(0) = \frac{\partial C_i}{\partial x}(L) = 0, \quad i = 1, \dots, 4\} \\ A\mathbf{C} = A(x, \frac{\partial}{\partial x})\mathbf{C} \quad \text{pour} \quad \mathbf{C} \in D(A) \end{array} \right.$$

est un opérateur maximal monotone et autoadjoint sur $\mathbf{H}$

Preuve: soit $\mathbf{C} \in \mathbf{H}^1$ la solution faible de la proposition 3.8.1. Il se trouve que cette solution est en fait dans $\mathbf{H}^2$ sous l'hypothèse $d \in C^1([0, L], \mathbb{R})$. Ce théorème de régularité se trouve par exemple dans Brézis [13], théorème IX.2.6. Ainsi, avec $\lambda = 1$, on a pour tout $f \in \mathbf{H}$ une unique solution $\mathbf{C} \in D(A)$ à l'équation

$$A\mathbf{C} + \mathbf{C} = f$$

En d'autres termes, l'image de $D(A)$ par $I + A$, $R(I + A)$, vérifie,

$$R(I + A) = \mathbf{H},$$

c'est-à-dire A est maximal.

La monotonie de A provient de,

$$(A\mathbf{C}, \mathbf{C}) \geq d_0 |\mathbf{C}|_1^2 \geq 0 \quad \forall \mathbf{C} \in D(A)$$

Toujours d'après Brézis [13], proposition VII.6, comme A est maximal monotone, il suffit de montrer que A est symétrique pour qu'il soit autoadjoint. Or, un simple calcul d'intégration par partie montre que,

$$(A\mathbf{C}, \hat{\mathbf{C}}) = (\mathbf{C}, A\hat{\mathbf{C}}) \quad \forall \mathbf{C}, \hat{\mathbf{C}} \in D(A)$$

□

Remarquons dès maintenant qu'il ressort de la preuve de la proposition (3.8.2) ou tout simplement de Brézis [13], proposition VII.1, la,

Proposition 3.8.3 *L'opérateur A_λ défini par,*

$$\left\{ \begin{array}{l} A_\lambda = A + \lambda I, \quad \lambda > 0 \\ D(A_\lambda) = D(A) = \mathbf{H}^2 \cap \{\mathbf{C} \in \mathbf{H}^1, \quad \frac{\partial C_i}{\partial x}(0) = \frac{\partial C_i}{\partial x}(L) = 0, \quad i = 1, \dots, 4\} \end{array} \right.$$

est bijectif de $D(A)$ sur $\mathbf{H}$ pour tout $\lambda > 0$.

– A est le générateur infinitésimal d'un C^0 semi-groupe

Rappelons maintenant la définition d'un C^0 semi-groupe d'opérateurs linéaires bornés sur $\mathbf{H}$.

Définition 3.8.1 Une famille à un paramètre d'opérateurs linéaires bornés de $\mathbf{H}$ dans $\mathbf{H}$, $T(t)$, $0 \leq t < \infty$ est un C^0 semi-groupe sur $\mathbf{H}$ si

$$(i) \quad T(0) = I$$

$$(ii) \quad T(t+s) = T(t)T(s), \quad \forall t, s \geq 0$$

$$(iii) \quad \lim_{t \rightarrow 0^+} \|T(t)\mathbf{C} - \mathbf{C}\| = 0, \quad \forall \mathbf{C} \in \mathbf{H}$$

Le C^0 semi-groupe $T(t)$ est dit uniformément borné si il existe $M \geq 1$ tel que

$$\|T(t)\|_{\mathcal{L}(\mathbf{H})} \leq M, \quad \forall t \geq 0$$

Il est dit de contraction si

$$\|T(t)\|_{\mathcal{L}(\mathbf{H})} \leq 1, \quad \forall t \geq 0$$

Nous avons alors le

Théorème 3.8.1 L'opérateur $-A$ est le générateur infinitésimal d'un C^0 semi-groupe de contraction sur $\mathbf{H}$.

Preuve: ceci est une conséquence classique et directe du théorème de Hille-Yosida, Brézis [13], théorème VII.4. Ce dernier est l'expression d'une correspondance bijective entre les opérateurs maximaux monotones et les C^0 semi-groupes de contraction. Donnons quelques précisions. A étant maximal monotone autoadjoint d'après la proposition 3.8.2, le théorème VII.7 de Brézis [13] s'applique et le problème d'évolution,

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{C}}{dt} + A\mathbf{C} = 0 \\ \mathbf{C}(0) = \mathbf{C}_0 \end{cases} \quad (3.9)$$

admet, pour tout $\mathbf{C}_0 \in \mathbf{H}$, une unique solution

$$\mathbf{C} \in C^0([0, +\infty[, \mathbf{H}) \cap C^1(]0, +\infty[, \mathbf{H}) \cap C^0(]0, +\infty[, D(A)).$$

De plus on a $\|\mathbf{C}(t)\| \leq \|\mathbf{C}_0\|$. Soit alors l'opérateur linéaire $T_A(t) : D(A) \rightarrow D(A)$ défini par $T_A(t)\mathbf{C}_0 = \mathbf{C}(t)$, où $\mathbf{C}(t)$ est la solution de (3.9). Comme $\|T_A(t)\mathbf{C}_0\| \leq \|\mathbf{C}_0\|$, on

peut prolonger $T_A(t)$ par continuité et densité en un opérateur linéaire continu de $\mathbf{H}$ dans lui-même. Ce prolongement, encore noté $T_A(t)$, est le C^0 semi-groupe de contraction généré par $-A$. Il vérifie bien $\|T_A(t)\|_{\mathcal{L}(\mathbf{H})} \leq 1, \quad \forall t \geq 0$. $\square$

De même on a,

Théorème 3.8.2 *L'opérateur $-A_\lambda$ est le générateur infinitésimal d'un C^0 semi-groupe de contraction sur $\mathbf{H}$.*

Preuve: soit le semi-groupe $S(t) = e^{-\lambda t} T_A(t)$. Ce semi-groupe est généré par $-(A + \lambda I) = -A_\lambda$ et vérifie $\|S(t)\|_{\mathcal{L}(\mathbf{H})} \leq \|T_A(t)\|_{\mathcal{L}(\mathbf{H})} \leq 1$. On le note $T_{A_\lambda}(t)$. $\square$

$-A$ est le générateur infinitésimal d'un semi-groupe analytique

Afin d'énoncer un théorème d'existence-unicité pour le modèle NPZD nous allons avoir besoin de demander à l'opérateur A d'avoir des propriétés plus fortes que celles énoncées jusqu'à maintenant. Plus précisément nous allons montrer que $-A$ est le générateur infinitésimal d'un semi-groupe analytique. Pour l'étude approfondie de tels semi-groupes nous renvoyons à Pazy [91].

Rappelons, pour commencer, ce qu'est un semi-groupe analytique.

Définition 3.8.2 *Soit $\Delta = \{z \in \mathbb{C}, \quad \phi_1 < \arg(z) < \phi_2, \quad \phi_1 < 0 < \phi_2\}$. On suppose que pour tout z dans Δ , $T(z)$ est un opérateur linéaire borné. La famille $T(z), \quad z \in \Delta$ est un semi-groupe analytique sur Δ si:*

- (i) $z \rightarrow T(z)$ est analytique sur Δ
- (ii) $T(0) = I$ et $\lim_{\substack{z \in \Delta \\ z \rightarrow 0}} T(z)x = x, \quad \forall x \in \mathbf{H}$
- (iii) $T(z_1 + z_2) = T(z_1)T(z_2), \quad \forall z_1, z_2 \in \Delta$

Un semi-groupe est dit analytique s'il est analytique dans un secteur angulaire Δ contenant la demi-droite réelle $]0, +\infty[$. Il est clair que la restriction d'un semi-groupe analytique à l'axe réel est un C^0 semi-groupe. Il va être intéressant de montrer que $-A$ et $-A_\lambda$ génèrent des semi-groupes analytiques car alors on peut définir des puissances

fractionnaires d'opérateurs qui sont utiles à l'étude des équations paraboliques semi-linéaires.

Théorème 3.8.3 *Les opérateurs $-A$ et $-A_\lambda$ sont les générateurs infinitésimaux de semi-groupes analytiques sur $\mathbf{H}$.*

Preuve: la preuve est une adaptation très simple de celle du théorème 7.2.7 de Pazy [91] dans lequel est traité le cas de fonctions à valeurs scalaires et des conditions aux limite de type Dirichlet homogène.

Commençons par considérer les fonctions $\mathbf{C}$ comme des fonctions à valeurs complexes. On note $\mathbf{H}_{\mathbb{C}}$ et $\mathbf{H}_{\mathbb{C}}^1$ les Hilberts complexes associés à $\mathbf{H}$ et $\mathbf{H}^1$. Ils sont munis des produits scalaires,

$$\begin{aligned} (\mathbf{C}, \hat{\mathbf{C}})_{\mathbb{C}} &= \int_0^L \sum_{i=1}^4 C_i(x) \hat{C}_i^*(x) dx \\ &= \sum_{i=1}^4 (C_i, \hat{C}_i)_{L^2_{\mathbb{C}}(0,L)} \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} (\mathbf{C}, \hat{\mathbf{C}})_{1\mathbb{C}} &= \int_0^L \sum_{i=1}^4 C_i(x) \hat{C}_i^*(x) dx + \int_0^L \sum_{i=1}^4 \frac{\partial C_i(x)}{\partial x} \frac{\partial \hat{C}_i^*(x)}{\partial x} dx \\ &= \sum_{i=1}^4 (C_i, \hat{C}_i)_{L^2_{\mathbb{C}}(0,L)} + \sum_{i=1}^4 \left(\frac{\partial C_i}{\partial x}, \frac{\partial \hat{C}_i}{\partial x} \right)_{L^2_{\mathbb{C}}(0,L)} \end{aligned}$$

où $*$ désigne la conjugaison complexe. On note $\|\cdot\|_{\mathbb{C}}$ et $\|\cdot\|_{1\mathbb{C}}$ les normes induites.

Soit $\mathbf{C} = \mathbf{C}_r + i\mathbf{C}_i$, $\mathbf{C}_r = \text{Re}(\mathbf{C})$ et $\mathbf{C}_i = \text{Im}(\mathbf{C})$. Comme A_λ est symétrique, un calcul simple montre que,

$$(A_\lambda \mathbf{C}, \mathbf{C})_{\mathbb{C}} = (A_\lambda \mathbf{C}_1, \mathbf{C}_1) + (A_\lambda \mathbf{C}_2, \mathbf{C}_2)$$

donc,

$$\begin{aligned} (A_\lambda \mathbf{C}, \mathbf{C})_{\mathbb{C}} &\geq \min(d_0, \lambda) (\|\mathbf{C}_1\|_1^2 + \|\mathbf{C}_2\|_1^2) \\ &\geq c_0 \|\mathbf{C}\|_{1\mathbb{C}}^2 \\ &\geq c_0 \|\mathbf{C}\|_{\mathbb{C}}^2 \end{aligned}$$

Comme $\text{Im}(A_\lambda \mathbf{C}, \mathbf{C})_{\mathbb{C}} = 0$ on a,

$$\text{Im}(A_\lambda \mathbf{C}, \mathbf{C})_{\mathbb{C}} \leq b \|\mathbf{C}\|_{\mathbb{C}}^2, \quad b > 0$$

et de plus

$$\operatorname{Re}(A_\lambda \mathbf{C}, \mathbf{C})_{\mathbb{C}} \geq c_0 \|\mathbf{C}\|_{\mathbb{C}}^2$$

Ainsi l'ensemble du plan complexe $S(A_\lambda) = \{(A_\lambda \mathbf{C}, \mathbf{C})_{\mathbb{C}}, \mathbf{C} \in D(A)_{\mathbb{C}}, \|\mathbf{C}\|_{\mathbb{C}} = 1\}$ est inclu dans $S_{v_1} = \{z \in \mathbb{C}, |\arg(z)| < v_1\}$, où $v_1 = \arctan(b/c_0) < \pi/2$.

Fixons alors, v , tel que $v_1 < v < \pi/2$ et posons $\Sigma_v = \{z \in \mathbb{C}, |\arg(z)| > v\}$.

Alors il existe une constante C_v telle que, pour tout $z \in \mathbb{C}$,

$$d(z, S(A_\lambda)) \geq C_v |z|$$

où $d(z, S)$ est la distance de z à $S \subset \mathbb{C}$.

Rappelons que pour un opérateur linéaire $A : D(A)_{\mathbb{C}} \subset \mathbf{H}_{\mathbb{C}} \rightarrow \mathbf{H}_{\mathbb{C}}$, on note $\rho(A) = \{z \in \mathbb{C}, (zI - A)^{-1} \text{ existe et est borné}\}$ et pour $z \in \rho(A)$, $R(z : A) = (zI - A)^{-1}$.

Il faut maintenant remarquer que $\forall z > 0, z \in \rho(-A_\lambda)$. En effet, l'équation complexe $z\mathbf{C} + A_\lambda \mathbf{C} = f$, $f \in \mathbf{H}_{\mathbb{C}}$ est équivalente aux deux équations réelles, $z\mathbf{C}_r + A_\lambda \mathbf{C}_r = f_r$, $f_r \in \mathbf{H}$ et $z\mathbf{C}_i + A_\lambda \mathbf{C}_i = f_i$, $f_i \in \mathbf{H}$. D'après la proposition (3.8.1), chacune de ces équations admet une unique solution dans $D(A)$.

Ainsi $\forall z < 0$, $z \in \rho(A_\lambda)$ et donc $\rho(A_\lambda) \cap \Sigma_v \neq \emptyset$.

Comme de plus $\Sigma_v \subset \mathbb{C} \setminus \overline{S(A_\lambda)}$, on peut appliquer le théorème 1.3.9 de Pazy [91]. On a alors, $\rho(A_\lambda) \supset \Sigma_v$ et pour $z \in \Sigma_v$,

$$\|R(z : A_\lambda)\| \leq \frac{1}{d(z : \overline{S(A_\lambda)})} \leq \frac{1}{C_v |z|}$$

Ceci peut encore s'écrire, sachant que $\rho(-A_\lambda) = -\rho(A_\lambda)$, $\rho(-A_\lambda) \supset \Sigma_{\pi-v}$ et $\forall z \in \Sigma_{\pi-v}$,

$$\|R(z : -A_\lambda)\| \leq \frac{1}{C_v |z|}$$

Le théorème 2.5.2 de Pazy [91] s'applique et le C^0 semi-groupe $T_{A_\lambda}(t)$ engendré par $-A_\lambda$ se prolonge en un semi-groupe analytique uniformément borné sur le secteur angulaire $\{z \in \mathbb{C}, |\arg(z)| < (\frac{\pi}{2} - v)\}$.

Enfin grâce au théorème 3.2.2 de Pazy [91] $-A$ est le générateur infinitésimal d'un semi-groupe analytique. $\square$

De la preuve précédente il ressort que les opérateurs $-A_\lambda$ et $-A$ sont les générateurs de semi-groupes analytiques uniformément bornés. De plus A_λ est inversible contrairement à A . D'après Pazy [91], chapitre 2, section 2.6, on peut définir les puissances fractionnaires A_λ^α pour $0 \leq \alpha \leq 1$. Cet opérateur linéaire est inversible, fermé, et à domaine, $D(A_\lambda^\alpha)$ dense dans $\mathbf{H}$.

A_λ^α étant fermé, l'espace $D(A_\lambda^\alpha)$ muni de la norme du graphe de A_λ^α ,

$$||| \mathbf{C} ||| = || \mathbf{C} || + || A_\lambda^\alpha \mathbf{C} ||$$

est un espace de Banach.

Comme A_λ^α est inversible, la norme $||| \cdot |||$ est équivalente à la norme $|| \mathbf{C} ||_\alpha = || A_\lambda^\alpha \mathbf{C} ||$. Ainsi $D(A_\lambda^\alpha)$ muni de la norme $|| \cdot ||_\alpha$ est un espace de Banach que l'on note $\mathbf{H}_\alpha$.

Enfin concernant l'espace $\mathbf{H}_\alpha$ on le,

Théorème 3.8.4 *Pour $0 \leq \alpha \leq 1$, on a les injections continues suivantes,*

$$\mathbf{H}_\alpha \subset (W^{k,q}(0, L))^4 = \mathbf{W}^{k,q}(0, L), \quad \text{pour } \alpha > \frac{1}{2}(k - \frac{1}{q} + \frac{1}{2}) \quad \text{et } q \geq 2$$

Preuve: c'est un cas particulier du théorème 1.6.1 de Henry [52]. En particulier on a $\mathbf{H}_\alpha \subset \mathbf{L}^\infty(0, L)$ pour $\alpha > \frac{1}{4}$ et $\mathbf{H}_\alpha \subset \mathbf{H}^1$ pour $\alpha > \frac{1}{2}$. $\square$

3.8.2 Existence et unicité d'une solution pour le modèle NPZD

Dans cette partie on montre l'existence et l'unicité d'une solution pour le modèle NPZD après avoir formulé un problème de Cauchy abstrait.

Le second membre $\mathbf{F}$

Afin de formuler un problème de Cauchy abstrait pour le modèle NPZD on cherche à définir une application $\mathbf{F} : \mathbb{R}^+ \times X \rightarrow Y$, où X et Y sont deux espaces fonctionnels, par

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{C})(x) = \mathbf{f}(t, x, \mathbf{C}(x), \frac{\partial D}{\partial x}(x)), \quad x \in (0, L)$$

Il faut clairement que $X \subset \mathbf{H}^1$ en raison du terme $\frac{\partial D}{\partial x}(x)$. Il est également clair qu'on ne peut pas avoir $Y \subset \mathbf{H}^1$ en raison du lemme 3.3.1 et de la présence des fonctions caractéristiques $\mathbb{1}_{]0, l[}(x)$ et $\mathbb{1}_{[l, L[}(x)$ qui introduisent une discontinuité dans $\mathbf{f}$. Une bonne façon de voir les choses est alors donnée par la,

Proposition 3.8.4 *L'application,*

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{C})(x) = \mathbf{f}(t, x, \mathbf{C}(x), \frac{\partial D}{\partial x}(x)), \quad x \in (0, L)$$

est bien défini de $\mathbb{R}^+ \times \mathbf{H}_\alpha$ dans $\mathbf{H}$ pour $1 \geq \alpha > \frac{1}{2}$.

Preuve: d'après le théorème 3.8.4, on a pour $\alpha > \frac{1}{2}$,

$$\mathbf{H}_\alpha \subset \mathbf{H}^1$$

Soit $\mathbf{C} \in \mathbf{H}_\alpha$ et $t \geq 0$ on a, en utilisant des estimations similaires à celles données dans le lemme 3.3.4,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{F}(t, \mathbf{C})\|^2 &\leq \int_0^L |f_N(t, x, \mathbf{C}(x))|^2 + |f_P(t, x, \mathbf{C}(x))|^2 \\ &\quad + |f_Z(t, x, \mathbf{C}(x))|^2 + |f_D(t, x, \mathbf{C}(x), \partial_x D(x))|^2 dx \\ &\leq cte_1(\|P\|_{L^2(0,L)}^2 + \|Z\|_{L^2(0,L)}^2 + \|D\|_{L^2(0,L)}^2) \\ &\quad + cte_2(\|P\|_{L^2(0,L)}^2 + \|Z\|_{L^2(0,L)}^2) \\ &\quad + cte_3(\|Z\|_{L^2(0,L)}^2) \\ &\quad + cte_4(\|Z\|_{L^2(0,L)}^2 + \|P\|_{L^2(0,L)}^2 + \|D\|_{L^2(0,L)}^2 + \|\partial_x D\|_{L^2(0,L)}^2) \\ &\leq M\|\mathbf{C}\|_1^2 \leq \hat{M}_\alpha\|\mathbf{C}\|_\alpha^2 \end{aligned}$$

c'est-à-dire

$$\|\mathbf{F}(t, \mathbf{C})\| \leq M_\alpha\|\mathbf{C}\|_\alpha$$

où M_α est une constante dépendant des paramètres du modèle. $\square$

Cette application non linéaire $\mathbf{F}$ vérifie également une propriété de Lipschitz locale donnée par la,

Proposition 3.8.5 *Soient $1 \geq \alpha > \frac{1}{2}$, $t, s \geq 0$ et $\mathbf{C}, \hat{\mathbf{C}} \in \mathbf{H}_\alpha$. Il existe une constante L_α dépendant de $\|\mathbf{C}\|_\alpha$, $\|\hat{\mathbf{C}}\|_\alpha$ et des paramètres du modèle telle que,*

$$\|\mathbf{F}(t, \mathbf{C}) - \mathbf{F}(s, \hat{\mathbf{C}})\| \leq L_\alpha(|t - s| + \|\mathbf{C} - \hat{\mathbf{C}}\|_\alpha)$$

Preuve: on a,

$$\|\mathbf{F}(t, \mathbf{C}) - \mathbf{F}(s, \hat{\mathbf{C}})\| \leq \|\mathbf{F}(t, \mathbf{C}) - \mathbf{F}(s, \mathbf{C})\| + \|\mathbf{F}(s, \mathbf{C}) - \mathbf{F}(s, \hat{\mathbf{C}})\|$$

D'après le lemme 3.3.1,

$$\mathbf{H}^1 \subset C([0, L], \mathbb{R}^4) \subset \mathbf{L}^\infty$$

et l'injection

$$\mathbf{H}_\alpha \subset \mathbf{H}^1$$

on a, avec des estimations similaires à celles du lemme 3.5.1,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{F}(t, \mathbf{C}) - \mathbf{F}(s, \mathbf{C})\|^2 &= \int_0^L |f_N(t, x, \mathbf{C}(x)) - f_N(s, x, \mathbf{C}(x))|^2 \\ &\quad + |f_P(t, x, \mathbf{C}(x)) - f_P(s, x, \mathbf{C}(x))|^2 dx \\ &\leq \int_0^L 2(\mu_p(1 - \gamma))^2 K_I^2 |P(x)|^2 |t - s|^2 dx \\ &\leq 2L(\mu_p(1 - \gamma))^2 K_I^2 \|P\|_\infty^2 |t - s|^2 \\ \|\mathbf{F}(t, \mathbf{C}) - \mathbf{F}(s, \mathbf{C})\| &\leq \sqrt{2L}\mu_p(1 - \gamma)K_I \|\mathbf{C}\|_\alpha |t - s| \end{aligned}$$

De la même façon,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{F}(s, \mathbf{C}) - \mathbf{F}(s, \hat{\mathbf{C}})\|^2 &= \int_0^L |f_N(s, x, \mathbf{C}(x)) - f_N(s, x, \hat{\mathbf{C}}(x))|^2 \\ &\quad + |f_P(s, x, \mathbf{C}(x)) - f_P(s, x, \hat{\mathbf{C}}(x))|^2 \\ &\quad + |f_Z(s, x, \mathbf{C}(x)) - f_Z(s, x, \hat{\mathbf{C}}(x))|^2 \\ &\quad + |f_D(s, x, \mathbf{C}(x), \partial_x D(x)) - f_D(s, x, \hat{\mathbf{C}}(x), \partial_x D(x))|^2 dx \\ &\leq \dots \\ &\leq M(\|\mathbf{C}\|_\infty, \|\hat{\mathbf{C}}\|_\infty)^2 \|\mathbf{C} - \hat{\mathbf{C}}\|_1^2 \\ &\leq M(\|\mathbf{C}\|_\alpha, \|\hat{\mathbf{C}}\|_\alpha)^2 \|\mathbf{C} - \hat{\mathbf{C}}\|_\alpha^2 \end{aligned}$$

c'est-à-dire

$$\|\mathbf{F}(s, \mathbf{C}) - \mathbf{F}(s, \hat{\mathbf{C}})\| \leq M(\|\mathbf{C}\|_\alpha, \|\hat{\mathbf{C}}\|_\alpha) \|\mathbf{C} - \hat{\mathbf{C}}\|_\alpha$$

□

Le problème de Cauchy abstrait

On peut maintenant écrire le problème (3.1)(3.2), sous la forme du problème de Cauchy abstrait sur $\mathbf{H}$,

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{C}(t)}{dt} + A\mathbf{C}(t) = \mathbf{F}(t, \mathbf{C}(t)), & t > 0 \\ \mathbf{C}(0) = \mathbf{C}_0 \end{cases} \quad (3.10)$$

où l'opérateur linéaire A est celui défini dans la section 3.8.1 et l'opérateur non linéaire $\mathbf{F}$ est celui défini par la proposition 3.8.4.

Donnons maintenant la définition d'une solution du problème (3.10).

Définition 3.8.3 Une fonction $\mathbf{C} : [0, T[\rightarrow \mathbf{H}$ est une solution classique de (3.10) si $\mathbf{C} \in C([0, T[, \mathbf{H}) \cap C^1(]0, T[, \mathbf{H})$, $\mathbf{C}(t) \in D(A)$ pour $0 < t < T$ et (3.10) est vérifiée sur $[0, T[$.

On a alors enfin le,

Théorème 3.8.5 Soit $\frac{1}{2} < \alpha < 1$. Pour tout $\mathbf{C}_0 \in \mathbf{H}_\alpha$ le problème (3.10) admet, pour tout $T > 0$ une solution classique $\mathbf{C} \in C([0, T[, \mathbf{H}) \cap C^1(]0, T[, \mathbf{H})$.

Preuve: la preuve est un cas particulier des théorèmes 6.3.1 et 6.3.3 de Pazy [91]. En ajoutant à chaque membre de l'équation 3.10 $\lambda\mathbf{C}$, avec $\lambda > 0$, on obtient le problème de Cauchy équivalent,

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{C}(t)}{dt} + (A + \lambda I)\mathbf{C}(t) = \mathbf{G}(t, \mathbf{C}(t)), & t > 0 \\ \mathbf{C}(0) = \mathbf{C}_0 \end{cases}$$

$-(A + \lambda I) = -A_\lambda$ est le générateur infinitésimal d'un semi-groupe analytique uniformément borné (théorème 3.8.3) vérifiant, comme A_λ est inversible, $0 \in \rho(-A_\lambda)$.

$\mathbf{G}(t, \mathbf{C}) = \mathbf{F}(t, \mathbf{C}) + \lambda \mathbf{C}$, est bien défini de $\mathbb{R}^+ \times \mathbf{H}_\alpha$ dans $\mathbf{H}$ et en utilisant les propositions 3.8.4 et 3.8.5 on a pour tout $t, s \geq 0$ et tout $\mathbf{C}, \hat{\mathbf{C}} \in \mathbf{H}_\alpha$,

$$\|\mathbf{G}(t, \mathbf{C})\| \leq \hat{M}_\alpha \|\mathbf{C}\|_\alpha \quad (3.11)$$

et,

$$\|\mathbf{G}(t, \mathbf{C}) - \mathbf{G}(s, \hat{\mathbf{C}})\| \leq \hat{L}_\alpha(|t - s| + \|\mathbf{C} - \hat{\mathbf{C}}\|_\alpha) \quad (3.12)$$

On peut utiliser le théorème 6.3.1 de Pazy [91] pour obtenir une unique solution locale,

$$\mathbf{C} \in C^0([0, t_0[, \mathbf{H}) \cap C^1([0, t_0[, \mathbf{H}) \cap C^0([0, t_0[, D(A))$$

où $t_0 = t_0(\mathbf{C}_0)$. Cette solution est donnée par,

$$\mathbf{C}(t) = T_{A_\lambda}(t)\mathbf{C}_0 + \int_0^t T_{A_\lambda}(t-s)\mathbf{G}(s, \mathbf{C}(s))ds$$

On peut répéter le procédé de construction de la solution et la continuer tant que $\|\mathbf{C}(t)\|_\alpha$ reste borné. Ainsi, pour avoir une solution globale, il suffit de montrer que si $\mathbf{C}(t)$ existe sur $[0, T[$ alors $\|\mathbf{C}(t)\|_\alpha$ reste borné quand $t \rightarrow T^-$. Ce résultat s'obtient en utilisant le fait que 3.11 est vérifié et le théorème 6.3.3 de Pazy [91]. $\square$

Commentaires

Remarque sur la régularité de la solution. Arrivé à ce point nous avons obtenu une solution au problème (3.8.2) vérifiant pour tout $T > 0$,

$$\mathbf{C} \in C([0, T[, \mathbf{H}) \cap C([0, T[, D(A)) \cap C^1([0, T[, \mathbf{H}) \quad (3.13)$$

La proposition suivante résume les propriétés de régularité de la solution obtenue et exprime le fait que la discontinuité du second membre interdit toute possibilité d'obtenir une solution régulière au sens C^1 en temps et C^2 en espace.

Proposition 3.8.6 *Soit $\mathbf{C}(t)$ la solution (3.13) du modèle biologique. On a,*

- (i) *La fonction $(t, x) \rightarrow \mathbf{C}(t, x)$ est continue sur $]0, T[\times [0, L]$*
- (ii) *La fonction $(t, x) \rightarrow \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t}(t, x)$ est continue sur $]0, T[\times [0, L]$*

- (iii) La fonction $x \rightarrow \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial x}(\cdot, x)$ est continue sur $[0, L]$
- (iv) La fonction $x \rightarrow \frac{\partial^2 \mathbf{C}}{\partial x^2}(\cdot, x)$ est discontinue au point $x = l$

Preuve: les points (i) et (iii) se déduisent du fait que,

$$D(A) = \mathbf{H}^2 \cap \{\mathbf{C} \in \mathbf{H}^1, \quad \frac{\partial C_i}{\partial x}(0) = \frac{\partial C_i}{\partial x}(L) = 0, \quad i = 1, \dots, 4\}$$

et,

$$\mathbf{H}^2 \subset C^1([0, L], \mathbb{R}^4)$$

d'après le théorème d'injection de Sobolev en dimension 1, et,

$$\mathbf{C} \in C([0, T[, D(A))$$

Le corollaire 6.3.2 de Pazy [91] indique que l'application,

$$t \rightarrow \frac{d\mathbf{C}}{dt} \in \mathbf{H}_\alpha$$

est continue pour $t > 0$, et comme $\mathbf{H}_\alpha \subset \mathbf{H}_1 \subset \mathbf{C}^0([0, L])$ le point (ii) est démontré.

Enfin, d'après (ii) et comme $x \rightarrow \mathbf{f}(\cdot, x, \mathbf{C}(x))$ est discontinue au point $x = l$, $x \rightarrow A(x, \frac{\partial}{\partial x})\mathbf{C}(\cdot, x)$ ou $x \rightarrow \frac{\partial^2 \mathbf{C}}{\partial x^2}(\cdot, x)$ ne peut être continu en $x = l$. $\square$

Remarque sur le cas où la diffusion dépend du temps. Comme nous l'avons précisé au début de ce chapitre, le cas non homogène est techniquement plus compliqué que le cas homogène. De manière simplifiée, on peut voir les choses de la façon suivante.

Nous avons traité le cas dans lequel le modèle biologique se ramène au problème de Cauchy abstrait,

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{C}(t)}{dt} + A_\lambda \mathbf{C}(t) = \mathbf{G}(t, \mathbf{C}(t)), & t > 0 \\ \mathbf{C}(0) = \mathbf{C}_0 \end{cases}$$

La solution est donnée par la "formule de variation de la constante",

$$\mathbf{C}(t) = T_{A_\lambda}(t)\mathbf{C}_0 + \int_0^t T_{A_\lambda}(t-s)\mathbf{G}(s, \mathbf{C}(s))ds$$

où $T_{A_\lambda}(t)$ est un semi-groupe analytique sur $\mathbf{H}$.

Dans le cas du problème non homogène, on a à résoudre,

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{C}(t)}{dt} + A_\lambda(t)\mathbf{C}(t) = \mathbf{G}(t, \mathbf{C}(t)), & t > 0 \\ \mathbf{C}(0) = \mathbf{C}_0 \end{cases}$$

La solution est donnée par,

$$\mathbf{C}(t) = U(t, 0)\mathbf{C}_0 + \int_0^t U(t, s)\mathbf{G}(s, \mathbf{C}(s))ds$$

où la famille, à deux paramètres $t, s \geq 0$, d'opérateurs $U(t, s)$ sur $\mathbf{H}$ est appelé système d'évolution.

Le sujet est abordé dans Pazy [91] et Ahmed [1]. On trouvera également des développements dans Tanabe [105]. Pour le cas qui nous concerne l'article de Kielhöfer [58] est particulièrement intéressant. Cependant, traiter le cas non-homogène n'apportant pas vraiment un éclairage nouveau au problème nous allons nous contenter de donner quelques clés.

Concernant le second membre non-linéaire tout le travail a déjà été fait dans les sections précédentes et ces résultats sont réutilisables tels quels. Pour pouvoir utiliser les résultats de H. Kielhöfer (théorème 1.1 de Kielhöfer [58]) il faut que la famille d'opérateurs $A(t), t \geq 0$ vérifie certaines hypothèses:

On fait les hypothèses suivantes sur d :

$$d(t, \cdot) \in C^1([0, L], \mathbb{R})$$

Il existe des constantes $c_1 > 0$, $c_2 > 0$ et $\frac{1}{4} \leq \beta \leq 1$ telles que pour tout $t, s \geq 0$ et pour tout $x \in [0, L]$,

$$\begin{aligned} |d(t, x) - d(s, x)| &\leq c_1 |t - s|^\beta \\ \left| \frac{\partial d}{\partial x}(t, x) - \frac{\partial d}{\partial x}(s, x) \right| &\leq c_2 |t - s|^\beta \end{aligned}$$

Enfin on suppose encore que,

$$d(t, x) \geq d_0 > 0, \quad \forall x \in [0, L], \quad \forall t \geq 0$$

Comme dans la section 3.8.1, pour chaque $t \geq 0$, on peut définir un opérateur $A(t)$: $D(A(t)) \subset \mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H}$ par,

$$\begin{cases} D(A(t)) = \mathbf{H}^2 \cap \{ \mathbf{C} \in \mathbf{H}^1, \quad \frac{\partial C_i}{\partial x}(0) = \frac{\partial C_i}{\partial x}(L) = 0, \quad i = 1, \dots, 4 \} \\ A(t)\mathbf{C} = A(t, x, \frac{\partial}{\partial x})\mathbf{C} \quad \text{pour} \quad \mathbf{C} \in D(A(t)) \end{cases}$$

Nous avons alors le,

Lemme 3.8.1 *La famille d'opérateurs $A(t), t \geq 0$ vérifie,*

(A1) *Pour chaque $t \geq 0$, $A(t)$ est un opérateur linéaire fermé. Son domaine $D(A(t))$, dense dans $\mathbf{H}$ est indépendant de t . On le note encore $D(A)$.*

(A2) *$(A(t)\mathbf{C}, \mathbf{C}) \geq d_0(\|\mathbf{C}\|_1 - \|\mathbf{C}\|)$ pour tout $t \geq 0$, $\mathbf{C} \in D(A)$.*

(A3) *$(A(t)\mathbf{C}, \hat{\mathbf{C}}) \leq \|d\|_\infty \|\mathbf{C}\|_1 \|\hat{\mathbf{C}}\|_1$ pour tout $t \geq 0$, $\mathbf{C} \in D(A)$ et tout $\hat{\mathbf{C}} \in \mathbf{H}^1$.*

(A4) *$\rho(A(t)) \cap \{z \in \mathbb{C}, \operatorname{Re}(z) < 0\} \neq \emptyset$ pour tout $t \geq 0$.*

(A5) *$D(A^*(t)) = D(A)$ pour tout $t \geq 0$ ($A^*(t)$ est l'opérateur adjoint de $A(t)$).*

(A6) *$\|A(t)\mathbf{C} - A(s)\mathbf{C}\| \leq M(\|A(\tau)\mathbf{C}\| + \|\mathbf{C}\|)|t - s|^\beta$ pour tout $t, s, \tau \geq 0$, tout $\mathbf{C} \in D(A)$ et $M > 0$.*

Preuve et commentaires: (A1) et (A5) résultent de la définition de $D(A(t))$, de la proposition 3.8.2 et, par exemple, de Brézis [13], proposition VII.1. Il est important de remarquer qu'ici on fait le choix de ne pas traiter le terme de convection des détritux (D) avec l'opérateur $A(t)$ ce qui permet d'avoir un opérateur auto-adjoint. Dans le cas homogène on aurait pu ne pas faire ce choix.

(A2) et (A3) se montrent simplement.

(A4) résulte de la proposition 3.8.1 et de l'argument de régularité utilisé dans la preuve de la proposition 3.8.2.

(A6) résulte d'un résultat d'estimation a priori classique pour les problèmes aux limites elliptiques et réguliers au sens de Lions et Magenes [72]. Le théorème 2.5.1 de Lions et Magenes [72] donne,

$$\|\mathbf{C}\|_{\mathbf{H}^2} \leq cte(\|A(t)\mathbf{C}\| + \|\mathbf{C}\|_1), \quad \forall \mathbf{C} \in D(A), \quad t \geq 0$$

Le théorème 1.16.3 de Lions et Magenes [72] donne,

$$\|\mathbf{C}\|_1 \leq \|\mathbf{C}\|_{\mathbf{H}^2} + cte\|\mathbf{C}\|, \quad \forall \mathbf{C} \in \mathbf{H}^2$$

Ainsi on a,

$$\|\mathbf{C}\|_{\mathbf{H}^2} \leq cte(\|A(t)\mathbf{C}\| + \|\mathbf{C}\|), \quad \forall \mathbf{C} \in D(A), \quad t \geq 0$$

Soit $\mathbf{C} \in D(A)$, on a,

$$\begin{aligned} \|A(t)\mathbf{C} - A(s)\mathbf{C}\|^2 &= \sum_{i=1}^4 \int_0^L ((-d(t, x) + d(s, x)) \frac{\partial^2 \mathbf{C}}{\partial x^2} + (-\frac{\partial d}{\partial x}(t, x) + \frac{\partial d}{\partial x}(s, x)) \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial x})^2 \\ \|A(t)\mathbf{C} - A(s)\mathbf{C}\| &\leq cte|t - s|^\beta \|\mathbf{C}\|_{\mathbf{H}^2} \end{aligned}$$

d'où,

$$\|A(t)\mathbf{C} - A(s)\mathbf{C}\| \leq cte|t - s|^\beta (\|A(\tau)\mathbf{C}\| + \|\mathbf{C}\|)$$

L'opérateur $-A(t)$ est pour chaque $t \geq 0$ le générateur infinitésimal d'un semi-groupe analytique. Ceci résulte de la section 3.8.1 ou simplement de (A1), (A2), (A3) et (A4). Dans le cas où d ne dépend pas du temps ceci suffit pour obtenir un résultat d'existence-unicité pour le modèle biologique. Si d dépend du temps, il faut rajouter (A5) et (A6). (A5) nous oblige à ne pas traiter le terme $-v_d \frac{\partial D}{\partial x}$, dans l'équation des détritus, avec l'opérateur $A(t)$. (A6) oblige à demander un certain degré de régularité en temps à d . $\square$

Remarque sur le modèle considéré. Cette étude a été menée sur un modèle simple relativement à la complexité de certains autres modèles biologiques. Cependant la même méthodologie pourrait être appliquée à des modèles plus compliqués (notamment le modèle NNPZD-DOM). On peut facilement envisager utiliser plus de variables et des fonctions paramétrisant les échanges entre compartiments (termes de grazing, G_p et G_d par exemple) biologiques différentes. Le tout étant toujours de pouvoir montrer que le second membre peut être considéré comme une application non-linéaire bien définie d'un espace $\mathbf{H}_\alpha$ dans $\mathbf{H}$ et que cette application est localement Lipschitzienne. A ce titre, il est intéressant de remarquer que même si l'on avait considéré le second membre sans le terme d'advection des détritus alors l'application $\mathbf{F}(t, \mathbf{C})$ aurait bien été définie de $\mathbf{H}$ dans $\mathbf{H}$ mais n'aurait pas été Lipschitzienne (même localement) sur $\mathbf{H}$. Pour garantir ceci il faut impérativement partir d'un espace plus "petit" ($\mathbf{H}_\alpha$ ici), et donc utiliser le fait que l'opérateur différentiel génère un semi-groupe analytique et non pas seulement un C^0 semi-groupe.

3.8.3 Dépendance de la solution par rapport aux paramètres

Le modèle NPZD, comme tout modèle biologique, contient de nombreux paramètres. Ceux-ci sont des constantes scalaires listées dans le tableau (2.1).

Dans la suite de ce document, on s'intéresse à l'estimation de ces paramètres connaissant les mesures de certaines concentrations, et dans ce cadre il est intéressant de s'assurer de la continuité de l'application,

$$k \rightarrow \mathbf{C}(t, x; k)$$

où $k \in \mathbb{R}^p$ est le vecteur des p paramètres du modèle et $\mathbf{C}$ est la solution du modèle NPZD.

Nous avons montré dans la partie précédente que les concentrations sont positives pour tout $t \geq 0$. les paramètres k sont également tous positifs et la valeur de chacun d'entre eux est comprise entre deux valeurs biologiquement admissibles,

$$0 < k_{min}^i < k < k_{max}^i, i = 1, \dots, p.$$

On peut alors énoncer le résultat suivant,

Proposition 3.8.7 *Pour $k \in \Lambda =]k_{min}^1, k_{max}^1[\times \dots \times]k_{min}^p, k_{max}^p[$*

et $\mathbf{C}_0 \in U = \{\mathbf{C} \in \mathbf{H}_\alpha, \mathbf{C} > 0\}$,

soit $\mathbf{C}(t) = \mathbf{C}(t; k, \mathbf{C}_0)$ la solution de,

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{C}(t)}{dt} + A\mathbf{C}(t) = \mathbf{F}(t, \mathbf{C}(t)), & t > 0 \\ \mathbf{C}(0) = \mathbf{C}_0 \end{cases}$$

L'application $(k, \mathbf{C}_0) \rightarrow \mathbf{C}(t; k, \mathbf{C}_0)$ est continuellement différentiable de $\Lambda \times \mathbf{H}_\alpha$ dans $\mathbf{H}_\alpha$ pour tout $t \geq 0$.

De plus, les dérivées $\mathbf{C}_k(t) = D_k \mathbf{C}(t)$ et $\mathbf{C}_{\mathbf{C}_0}(t) = D_{\mathbf{C}_0} \mathbf{C}(t)$ sont les solutions des problèmes de Cauchy,

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{C}_k(t)}{dt} + A\mathbf{C}_k(t) = D_{\mathbf{C}} \mathbf{F}(t, \mathbf{C}(t), k) \mathbf{C}_k(t) + D_k \mathbf{F}(t, \mathbf{C}(t), k), & t > 0 \\ \mathbf{C}_k(0) = 0 \end{cases}$$

et,

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{C}_{\mathbf{C}_0}(t)}{dt} + A\mathbf{C}_{\mathbf{C}_0}(t) = D_{\mathbf{C}} \mathbf{F}(t, \mathbf{C}(t), k) \mathbf{C}_{\mathbf{C}_0}(t), & t > 0 \\ \mathbf{C}_{\mathbf{C}_0}(0) = \mathbf{1} \end{cases}$$

Preuve: ce résultat est une conséquence du théorème 3.4.4 de Henry [52]. Vérifions-en les hypothèses.

A est un opérateur sectoriel car $-A$ est le générateur infinitésimal d'un semi-groupe analytique sur $\mathbf{H}$ (Henry [52], page 22).

$\mathbf{F}(t, \mathbf{C}, k)$ est continue sur $]0, +\infty[\times U \times \Lambda$ et vérifie la propriété de Lipschitz de la proposition (3.8.5).

Les seuls points à montrer sont que $D_{\mathbf{C}}\mathbf{F}$ et $D_k\mathbf{F}$ existent, sont continues sur $]0, +\infty[\times U \times \Lambda$ et que les applications $(t, \mathbf{C}) \rightarrow D_{\mathbf{C}}\mathbf{F}$, $D_k\mathbf{F}$ sont Lipschitziennes sur $]0, +\infty[\times U$. Les parties linéaires de $\mathbf{F}$ ne posent pas problème, et l'on étudie que les termes non-linéaires.

Soit, $f(k, x) = \frac{x}{k+x}$ une fonction de $]k_{min}, k_{max}[\times]0, +\infty[\rightarrow \mathbb{R}$.

f est C^∞ et $\forall k, \hat{k} \in]k_{min}, k_{max}[$, $\forall x, \hat{x} \in]0, +\infty[$ on a,

$$\frac{\partial f}{\partial x}(k, x) = \frac{k}{(k+x)^2} \text{ et } \frac{\partial f}{\partial k}(k, x) = \frac{-x}{(k+x)^2},$$

$$\begin{aligned} |f(k, \hat{x}) - f(k, x) - \frac{\partial f}{\partial x}(k, x)(\hat{x} - x)| &\leq \frac{2k_{max}}{k_{min}^3} |\hat{x} - x|^2 \\ |f(\hat{k}, x) - f(k, x) - \frac{\partial f}{\partial k}(k, x)(\hat{k} - k)| &\leq \frac{2x}{k_{min}^3} |\hat{k} - k|^2 \end{aligned}$$

Si on considère maintenant f comme une application de

$$]k_{min}, k_{max}[\times \{C \in H^1(0, L), C > 0\} \rightarrow L^2(0, L)$$

et si on pose $D_k f(k, C) = \frac{-C}{(k+C)^2}$ et $D_C f(k, C) = \frac{k}{(k+C)^2}$. On a alors,

$$\begin{aligned} \|f(k, \hat{C}) - f(k, C) - D_C f(k, C)(\hat{C} - C)\|_{L^2(0, L)}^2 &\leq \left(\frac{2k_{max}}{k_{min}^3}\right)^2 \|\hat{C} - C\|_\infty^4 \\ &\leq M \|\hat{C} - C\|_{H^1(0, L)}^4 \\ \|f(k, \hat{C}) - f(k, C) - D_C f(k, C)(\hat{C} - C)\|_{L^2(0, L)} &= o(\|\hat{C} - C\|_{H^1(0, L)}) \end{aligned}$$

de même on obtient,

$$\|f(\hat{k}, C) - f(k, C) - D_k f(k, C)(\hat{k} - k)\|_{L^2(0, L)} = o(|\hat{k} - k|)$$

et l'application f est bien différentiable (on remarquera ici qu'il est primordial de voir f comme une application de $]k_{min}, k_{max}[\times \{C \in H^1(0, L), C > 0\} \rightarrow L^2(0, L)$. f vue comme une application de $]k_{min}, k_{max}[\times \{C \in L^2(0, L), C > 0\} \rightarrow L^2(0, L)$ est bien définie mais n'est pas différentiable).

Enfin on a,

$$\begin{aligned} \|D_C f(k, C_1)C - D_C f(k, C_2)C\|_{L^2(0,L)}^2 &\leq \left(\frac{2k_{max}}{k_{min}^3}\right)^2 \|C\|_{H^1(0,L)}^2 \|C_1 - C_2\|_{H^1}^2 \\ \|D_k f(k, C_1)\hat{k} - D_k f(k, C_2)\hat{k}\|_{L^2(0,L)}^2 &\leq \left(\frac{1}{k_{min}^4}\right) |\hat{k}|^2 \|C_1 - C_2\|_{H^1}^2 \end{aligned}$$

Ainsi, $C \rightarrow D_k f(k, C)$ et $C \rightarrow D_C f(k, C)$ sont lipschitziennes.

Un travail similaire donne des résultats analogues pour la fonction $g(k, x) = \frac{x^2}{k + x^2}$.

Le résultat final s'obtient sachant que $\mathbf{F}(t, \mathbf{C}, k)$ est somme et produit d'applications dérivables à dérivées localement lipschitziennes. $\square$

Chapitre 4

Etude numérique du modèle NPZD simplifié

4.1 Introduction

L'étude qualitative (théorème d'existence et d'unicité, positivité de la solution et dépendance par rapport aux paramètres) caractérise le chapitre précédent. Ce premier travail se heurte rapidement à la complexité des équations ici décrites. Il est alors nécessaire d'avoir recours au calcul numérique afin de pouvoir observer une trajectoire pour elle-même, pendant une durée envisageable par l'expérience. Dans ce chapitre, on s'intéresse à la discrétisation en temps et en espace du modèle biologique. Après avoir rappelé des généralités sur les schémas d'intégration aux différences finies, on montre la convergence du schéma le plus simple dans lequel les termes de réaction non-linéaires sont discrétisés de façon complètement explicite. On propose ensuite une modification simple et numériquement peu coûteuse permettant d'obtenir un schéma semi-implicite dans lequel on s'affranchit de contraintes sur le pas de temps nécessaires à l'obtention de concentrations toujours positives lors des calculs.

4.2 Généralités sur la discrétisation

Ce paragraphe s'inspire largement des notions développées dans l'ouvrage de Thomas [108] qui traite complètement le sujet “facile”, ou tout du moins classique, des différences finies de manière claire, efficace et rigoureuse.

4.2.1 Le cadre

Il est question de développer ici une méthode simple pour obtenir une approximation numérique de la solution du problème parabolique, supposé bien posé, suivant:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial v}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(d \frac{\partial v}{\partial x} \right) = g & t \in]0, T], x \in]0, L[\\ \frac{\partial v}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial v}{\partial x}(L, t) = 0 & t \in]0, T] \\ v(x, 0) = v_0(x) & x \in]0, L[\end{array} \right. \quad (4.1)$$

L'intervalle $[0, L]$ est discrétisé en une grille régulière de N intervalles de longueur Δx . Δt est le pas de temps constant et v_k^n désigne une approximation, au point (x_k, t_n) de la grille espace-temps, de la fonction $v(x, t)$. Après discrétisation en espace et en supposant que l'on utilise un schéma à deux niveaux en temps, le schéma aux différences finies pour le problème (4.1) peut s'écrire sous forme matricielle:

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{Q}\mathbf{u}^n + \Delta t \mathbf{G}^n \quad (4.2)$$

où l'on a noté,

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^n &= (u_1^n, \dots, u_N^n)^T \\ \mathbf{G}^n &= (g_1^n, \dots, g_N^n)^T \end{aligned} \quad (4.3)$$

et $\mathbf{Q}$ est une matrice $N \times N$.

On note $v(x, t)$ la solution du problème (4.1) et

$$\mathbf{v}^n = (v(x_1, t_n), \dots, v(x_N, t_n))^T \quad (4.4)$$

Introduisons la norme $l_{2, \Delta x}$ sur $\mathbb{R}^N$ définie pour $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^N$ par,

$$||\mathbf{u}||^2 = \sum_{k=1}^N |u_k|^2 \Delta x \quad (4.5)$$

et la norme d'opérateur induite,

$$\|\mathbf{Q}\| = \sup_{\|\mathbf{u}\| \leq 1} \|\mathbf{Q}\mathbf{u}\| \quad (4.6)$$

4.2.2 Définitions : convergence, consistance et stabilité

Tout ceci étant posé, nous sommes en mesure de donner les différentes définitions qui suivent.

Définition 4.2.1 (convergence) *Le schéma aux différences finies (4.2) est convergent au temps t en norme $l_{2,\Delta x}$ si*

$$\|\mathbf{u}^n - \mathbf{v}^n\| \rightarrow 0,$$

pour toute suite de subdivisions de $[0, L]$ de pas Δx telle que $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta t \rightarrow 0$ et $(n+1)\Delta t \rightarrow t$.

Définition 4.2.2 (consistance) *Le schéma aux différences finies (4.2) est consistant, en norme $l_{2,\Delta x}$ avec le problème continu (4.1), si la solution v vérifie,*

$$\mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{Q}\mathbf{v}^n + \Delta t \mathbf{G}^n + \Delta t \mathbf{e}^n$$

avec $\|\mathbf{e}^n\| \rightarrow 0$ quand $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$.

$\mathbf{e}^n$ est l'erreur de troncature. On dit que le schéma (4.2) est précis d'ordre (p, q) si

$$\|\mathbf{e}^n\| = \mathcal{O}(\Delta x^p) + \mathcal{O}(\Delta t^q).$$

Définition 4.2.3 (stabilité) *Le schéma aux différences finies (4.2) est stable, en norme $l_{2,\Delta x}$, s'il existe des constantes positives Δx_0 , Δt_0 , K et β telles que*

$$\|\mathbf{u}^{n+1}\| \leq K e^{\beta t} \|\mathbf{u}^0\|,$$

pour $0 \leq t = (n+1)\Delta t$, $0 < \Delta x \leq \Delta x_0$ et $0 < \Delta t \leq \Delta t_0$

4.2.3 Théorème d'équivalence de Lax

Les notions de consistance, stabilité et convergence sont étroitement liées par le

Théorème 4.2.1 (Théorème d'équivalence de Lax) *Supposons le problème continu (4.1) bien posé et le schéma aux différences finies (4.1) consistant en norme $\|\cdot\|$ et précis d'ordre (p, q) , alors ce schéma est convergent d'ordre (p, q) en norme $\|\cdot\|$ si et seulement si il est stable pour cette même norme.*

4.2.4 Condition de stabilité

L'analyse de la stabilité d'un schéma aux différences finies passe par l'évaluation des valeurs propres de la matrice $\mathbf{Q}$. Commençons par rappeler que le rayon spectral d'une matrice $\mathbf{Q}$ est la quantité

$$\sigma(\mathbf{Q}) = \max(|\lambda|, \lambda \text{ valeur propre de } \mathbf{Q})$$

On a toujours,

$$\sigma(\mathbf{Q}) \leq \|\mathbf{Q}\|$$

et dans le cas particulier où $\mathbf{Q}$ est une matrice symétrique on a

$$\sigma(\mathbf{Q}) = \|\mathbf{Q}\|.$$

Proposition 4.2.1 *Une condition nécessaire pour que le schéma (4.2) soit stable en norme $l_{2,\Delta x}$ est que $\sigma(\mathbf{Q}) \leq 1 + C\Delta t$, C constante positive.*

Si $\mathbf{Q}$ est symétrique, alors cette condition est une condition nécessaire et suffisante pour que le schéma (4.2) soit stable en norme $l_{2,\Delta x}$.

Pour terminer ce paragraphe nous donnons un lemme simple qui se révèle être d'une bonne utilité lors de l'évaluation de valeurs propres.

Lemme 4.2.1 (Le théorème du cercle de Gerschgorin) *Soit une matrice $N \times N$, $M = (m_{ij})_{i,j=1,\dots,N}$. Posons $r_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N |m_{ij}|$. Si λ est une valeur propre de M alors il existe i tel que $|\lambda - m_{ii}| \leq r_i$.*

Preuve: soit λ une valeur propre de M et $u = (u_1, \dots, u_N)^T$ un vecteur propre associé. Soit u_k la plus grande coordonnée en valeur absolue de u . Comme $Mu = \lambda u$, il vient en divisant la ligne k de égalité par u_k ,

$$\lambda = m_{k1} \frac{u_1}{u_k} + \dots + m_{kk} + \dots + m_{kN} \frac{u_N}{u_k}$$

Ainsi, en soustrayant m_{kk} à cette égalité, puis en prenant la valeur absolue et en utilisant l'inégalité triangulaire, le résultat est obtenu. $\square$

4.3 Un premier schéma pour le modèle NPZD

4.3.1 Discrétisation

Commençons par rappeler les équations du modèle biologique.

Zooplankton:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial Z}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(d \frac{\partial Z}{\partial x} \right) = \\ (a_p G_p + a_d G_d - m_z Z - \mu_z Z) \mathbb{1}_{]0, l[} + (-\tau Z) \mathbb{1}_{]l, L[} \quad t \in]0, T], x \in]0, L[\\ \frac{\partial Z}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial Z}{\partial x}(L, t) = 0 \quad t \in]0, T] \\ Z(x, 0) = Z_0(x) \quad x \in]0, L[\end{array} \right. \quad (4.7)$$

Phytoplankton:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial P}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(d \frac{\partial P}{\partial x} \right) = \\ (\mu_p L_I L_N P - G_p - m_p P) \mathbb{1}_{]0, l[} + (-\tau P) \mathbb{1}_{]l, L[} \quad t \in]0, T], x \in]0, L[\\ \frac{\partial P}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial P}{\partial x}(L, t) = 0 \quad t \in]0, T] \\ P(x, 0) = P_0(x) \quad x \in]0, L[\end{array} \right. \quad (4.8)$$

Nutriments:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial N}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(d \frac{\partial N}{\partial x} \right) = \\ (-\mu_p L_I L_N P + \mu_z Z + \mu_d D) \mathbb{1}_{]0, l[} + (\tau(P + Z + D)) \mathbb{1}_{]l, L[} \quad t \in]0, T], x \in]0, L[\\ \frac{\partial N}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial N}{\partial x}(L, t) = 0 \quad t \in]0, T] \\ N(x, 0) = N_0(x) \quad x \in]0, L[\end{array} \right. \quad (4.9)$$

Détritus:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial D}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(d \frac{\partial D}{\partial x} \right) = \\ \left((1 - a_p)G_p - a_d G_d + m_p P + m_z Z - \mu_d D - v_d \frac{\partial D}{\partial x} \right) \mathbb{I}_{]0, l[} \\ + (-\tau D - v_d \frac{\partial D}{\partial x}) \mathbb{I}_{]l, L[} \\ \frac{\partial D}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial D}{\partial x}(L, t) = 0 \\ D(x, 0) = D_0(x) \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} t \in]0, T], x \in]0, L[\\ t \in]0, T] \\ x \in]0, L[\end{array} \quad (4.10)$$

Avec, $L_N = \frac{N}{k_n + N}$, $G_p = \frac{g_z P^2 Z}{k_z + P^2}$ et $G_d = \frac{g_z D^2 Z}{k_z + D^2}$.

Le choix de discrétisation de ces équations est le suivant. En raison de la présence de conditions aux limites de Neumann, la discrétisation spatiale s'effectue sur une grille centrée,

$$x_k = \Delta x / 2 + (k - 1)\Delta x, \quad k = 1, \dots, N$$

On suppose que le coefficient de diffusion d est donné à chaque pas de temps et en chaque point $x_{k-1/2}$, $k = 1, \dots, N$ et on le note $d_{k-1/2}^n$. Enfin on pose $r = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$.

Les termes de diffusion sont discrétisés de manière implicite et les termes de réaction de manière explicite. Ainsi, pour les points intérieurs x_k , $k = 2, \dots, N - 1$, et pour l'une quelconque des concentrations, C , on a:

$$C_k^{n+1} = C_k^n + r(d_{k-1/2}^{n+1} C_{k-1}^{n+1} - (d_{k-1/2}^{n+1} + d_{k+1/2}^{n+1}) C_k^{n+1} + d_{k+1/2}^{n+1} C_{k+1}^{n+1}) + \Delta t F_{C,k}^n \quad (4.11)$$

où $F_{C,k}^n$ désigne la discrétisation des termes de réactions.

Les conditions aux limites sont discrétisées de manière implicite en rajoutant les points fantômes x_0 et x_{N+1} ,

$$\frac{C_1^{n+1} - C_0^{n+1}}{\Delta x} = 0 = \frac{C_{N+1}^{n+1} - C_N^{n+1}}{\Delta x} \quad (4.12)$$

On s'affranchit de C_0^{n+1} et C_{N+1}^{n+1} en injectant (4.12) dans (4.11) pour $k = 1$ et $k = N$.

Finalement les problèmes (4.7), (4.8), (4.9) et (4.10) discrétisés s'écrivent:

Zooplankton:

$$\mathbf{Q}_1 \mathbf{Z}^{n+1} = (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{F}_Z^n) \mathbf{Z}^n \quad (4.13)$$

La matrice tridiagonale symétrique $\mathbf{Q}_1$ s'écrit:

$$\mathbf{Q}_1 = \begin{pmatrix} 1 + rd_{1+1/2}^{n+1} & -rd_{1+1/2}^{n+1} & 0 & \dots & 0 \\ -rd_{1+1/2}^{n+1} & 1 + r(d_{1+1/2}^{n+1} + d_{2+1/2}^{n+1}) & -rd_{2+1/2}^{n+1} & & \vdots \\ 0 & \vdots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -rd_{N-1/2}^{n+1} & 1 + rd_{N-1/2}^{n+1} \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

$\mathbf{F}_Z^n$ est la matrice diagonale des termes de réaction,

$$(\mathbf{F}_Z^n)_{k,k} = (a_p \frac{g_z P_k^{n2}}{k_z + P_k^{n2}} + a_d \frac{g_z D_k^{n2}}{k_z + D_k^{n2}} - m_z - \mu_z) \mathbb{I}_{]0,l]}(x_k) + (-\tau) \mathbb{I}_{]l,L]}(x_k) \quad (4.15)$$

Phytoplancton:

$$\mathbf{Q}_1 \mathbf{P}^{n+1} = (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{F}_P^n) \mathbf{P}^n \quad (4.16)$$

avec de la même façon,

$$(\mathbf{F}_P^n)_{k,k} = (\mu_p L_{I,k}^n \frac{N_k^n}{k_n + N_k^n} - \frac{g_z P_k^n Z_k^n}{k_z + P_k^{n2}} - m_p) \mathbb{I}_{]0,l]}(x_k) + (-\tau) \mathbb{I}_{]l,L]}(x_k) \quad (4.17)$$

Nutriments:

$$\mathbf{Q}_1 \mathbf{N}^{n+1} = (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{F}_N^n) \mathbf{N}^n + \Delta t \mathbf{G}_N^n \quad (4.18)$$

avec,

$$(\mathbf{F}_N^n)_{k,k} = (-\mu_p L_{I,k}^n \frac{1}{k_n + N_k^n} P_k^n) \mathbb{I}_{]0,l]}(x_k) \quad (4.19)$$

$\mathbf{G}_N^n$ est un vecteur correspondant aux termes de réaction non-homogènes, c'est-à-dire ceux dans lesquels la variable N n'intervient pas,

$$\mathbf{G}_N^n = (\mu_z Z_k^n + \mu_d D_k^n) \mathbb{I}_{]0,l]}(x_k) + (\tau (P_k^n + Z_k^n + D_k^n)) \mathbb{I}_{]l,L]}(x_k) \quad (4.20)$$

Détritus:

$$\mathbf{Q}_1 \mathbf{D}^{n+1} = (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{F}_D^n - \frac{v_d \Delta t}{\Delta x} \mathbf{A}) \mathbf{D}^n + \Delta t \mathbf{G}_D^n \quad (4.21)$$

où,

$$(\mathbf{F}_{\mathbf{D}^n})_{k,k} = (-a_d \frac{g_z D_k^n Z_k^n}{k_z + D_k^{n2}} - \mu_d) \mathbb{I}_{]0,l]}(x_k) + (-\tau) \mathbb{I}_{]l,L]}(x_k) \quad (4.22)$$

et,

$$\mathbf{G}_{\mathbf{D}^n} = ((1 - a_p) \frac{g_z P_k^{n2} Z_k^n}{k_z + P_k^{n2}} + m_p P_k^n + m_z Z_k^n) \mathbb{I}_{]0,l]}(x_k) \quad (4.23)$$

et enfin, $\mathbf{A}$ est la matrice correspondant à la discrétisation du terme d'advection par un schéma upstream, c'est-à-dire en utilisant l'approximation $\frac{\partial D}{\partial x} \approx \frac{D_k^n - D_{k-1}^n}{\Delta x}$.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 1 & 0 & \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots \\ & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & \dots & & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.24)$$

4.3.2 Convergence du schéma

Dans ce paragraphe, on montre que le schéma aux différences finies défini précédemment est convergent. Comme pour le problème continu, on commence par traiter le cas du problème avec valeur absolue. Ainsi, dans tout ce qui suit et ce, jusqu'à indication contraire le terme L_N est pris avec valeur absolue au dénominateur.

Consistance

Proposition 4.3.1 (consistance) *Les schémas aux différences finies définis par les équations (4.13), (4.16), (4.18) et (4.21) sont consistants, en norme $l_{2,\Delta x}$, avec les problèmes continus (4.7), (4.8), (4.9) et (4.10) respectivement. Ils sont précis d'ordre $(1, 1)$.*

Preuve: soient $Z(x, t)$, $P(x, t)$, $N(x, t)$ et $D(x, t)$ les solutions du problème continu.

Un calcul classique par développement en série de Taylor, au point (x_k, t_{n+1}) , de chaque ligne de l'expression matricielle du schéma (4.13, Zooplancton) donne:

$$\left\{ \begin{array}{l} k = 1 : \\ \frac{Z(x_1, t_{n+1}) - Z(x_1, t_n)}{\Delta t} \\ - \frac{1}{\Delta x^2} (-d_{1+1/2}^{n+1} Z(x_1, t_{n+1}) + d_{1+1/2}^{n+1} Z(x_2, t_{n+1})) \\ - ((a_p \frac{g_z P(x_1, t_n)^2}{k_z + P(x_1, t_n)^2} + a_d \frac{g_z D(x_1, t_n)^2}{k_z + D(x_1, t_n)^2} - m_z - \mu_z) \mathbb{I}_{[0,l]}(x_1) + (-\tau) \mathbb{I}_{[l,L]}(x_1)) \\ = r_1^n = O(\Delta t) + O(\Delta x) \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} k = 2, \dots, N-1 : \\ \frac{Z(x_k, t_{n+1}) - Z(x_k, t_n)}{\Delta t} \\ - \frac{1}{\Delta x^2} (d_{k-1/2}^{n+1} Z(x_{k-1}, t_{n+1}) - (d_{k-1/2}^{n+1} + d_{k+1/2}^{n+1}) Z(x_k, t_{n+1}) + d_{k+1/2}^{n+1} Z(x_{k+1}, t_{n+1})) \\ - ((a_p \frac{g_z P(x_k, t_n)^2}{k_z + P(x_k, t_n)^2} + a_d \frac{g_z D(x_k, t_n)^2}{k_z + D(x_k, t_n)^2} - m_z - \mu_z) \mathbb{I}_{[0,l]}(x_k) + (-\tau) \mathbb{I}_{[l,L]}(x_k)) \\ = r_k^n = O(\Delta t) + O(\Delta x^2) \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} k = N : \\ \frac{Z(x_N, t_{n+1}) - Z(x_N, t_n)}{\Delta t} \\ - \frac{1}{\Delta x^2} (d_{N-1/2}^{n+1} Z(x_{N-1}, t_{n+1}) - d_{N-1/2}^{n+1} Z(x_N, t_{n+1})) \\ - ((a_p \frac{g_z P(x_N, t_n)^2}{k_z + P(x_N, t_n)^2} + a_d \frac{g_z D(x_N, t_n)^2}{k_z + D(x_N, t_n)^2} - m_z - \mu_z) \mathbb{I}_{[0,l]}(x_N) + (-\tau) \mathbb{I}_{[l,L]}(x_N)) \\ = r_N^n = O(\Delta t) + O(\Delta x) \end{array} \right.$$

$\mathbf{r}^n$ est l'erreur résiduelle et l'on a,

$$\mathbf{Q}_1 \mathbf{Z}^{n+1} = (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{F}_Z^n) \mathbf{Z}^n + \Delta t \mathbf{r}^n$$

Pour se ramener à la définition de la consistance (4.2.2) il faut que $\mathbf{Q}_1$ soit inversible et que $\|\mathbf{Q}_1^{-1}\|$ soit uniformément borné lorsque Δx et Δt tendent vers 0. La consistance du schéma est alors déterminée par $\mathbf{r}^n$,

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}^{n+1} &= \mathbf{Q}_1^{-1} (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{F}_Z^n) \mathbf{Z}^n + \Delta t \mathbf{Q}_1^{-1} \mathbf{r}^n \\ \|\mathbf{e}^n\| &= \|\mathbf{Q}_1^{-1} \mathbf{r}^n\| \leq \|\mathbf{Q}_1^{-1}\| \|\mathbf{r}^n\| \end{aligned}$$

et l'on a $\|\mathbf{e}^n\| = O(\Delta t) + O(\Delta x)$. Un ordre de précision en Δx est perdu en raison de la discrétisation des conditions aux limites.

On vérifie que les hypothèses sur $\mathbf{Q}_1$ sont vraies grâce au lemme (4.2.1). $\mathbf{Q}_1$ est symétrique réelle et ses valeurs propres vérifient $\lambda \geq 1$. Ainsi,

$$\|\mathbf{Q}_1^{-1}\| = \sigma(\mathbf{Q}_1^{-1}) = \frac{1}{\lambda_{\min}} \leq 1.$$

Pour P , N et D la preuve se calque facilement. Remarquons que si le traitement des conditions aux limites pour les quatre variables fait que l'on a un schéma d'ordre 1 en Δx , il en de même pour le traitement du terme de convection pour les détritus qui est également d'ordre 1. $\square$

stabilité

Proposition 4.3.2 (stabilité) *Les schémas aux différences finies définis par les équations (4.13), (4.16), et (4.18) sont stables, en norme $l_{2,\Delta x}$.*

$\frac{v_d \Delta t}{\Delta x} \leq 1$ est une condition nécessaire pour que le schéma (4.21) soit stable.

Preuve: la preuve de la stabilité utilise à nouveau le fait que la matrice $\mathbf{Q}_1$ est symétrique et que $\|\mathbf{Q}_1^{-1}\| = \sigma(\mathbf{Q}_1^{-1}) = \frac{1}{\lambda_{\min}} \leq 1$.

Comme pour la consistance, traitons tout d'abord le cas du zooplancton Z . Le schéma s'écrit,

$$\mathbf{Z}^{n+1} = \mathbf{Q}\mathbf{Z}^n$$

avec,

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_1^{-1}(\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{F}\mathbf{Z}^n).$$

$\mathbf{Q}$ est symétrique. De plus,

$$\left| \frac{g_z P^2}{k_z + P^2} \right| \leq g_z, \quad \forall P \in \mathbb{R}$$

Ainsi les valeurs propres μ_k de $\mathbf{Q}$ vérifient,

$$\begin{aligned} |\mu_k| &= \left| \frac{1}{\lambda_k} \left(1 + \Delta t \left(a_p \frac{g_z P_k^{n2}}{k_z + P_k^{n2}} + a_d \frac{g_z D_k^{n2}}{k_z + D_k^{n2}} - m_z - \mu_z \right) \mathbb{I}_{[0,l]}(x_k) + (-\tau) \mathbb{I}_{[l,L]}(x_k) \right) \right| \\ &\leq 1 + (g_z(a_p + a_d) + m_z + \mu_z + \tau) \Delta t \end{aligned}$$

i.e

$$\sigma(\mathbf{Q}) \leq 1 + (g_z(a_p + a_d) + m_z + \mu_z + \tau)\Delta t$$

et donc la proposition (4.2.1) permet d'affirmer que le schéma (4.13, Zooplancton) est stable.

Ceci étant fait, on montre que le schéma (4.16, Phytoplancton) est stable. Les arguments sont les mêmes et, sachant que,

$$\begin{aligned} |L_{I,k}^n| &\leq 1, \quad \forall k, n \\ \left| \frac{g_z P}{k_z + P^2} \right| &\leq \frac{g_z}{2\sqrt{k_z}}, \quad \forall P \in \mathbb{R} \\ \left| \frac{N}{k_n + |N|} \right| &\leq 1, \quad \forall N \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

on obtient,

$$\sigma(\mathbf{Q}) \leq 1 + (\mu_p + \frac{g_z}{2\sqrt{k_z}} Z_{max} + m_z + m_p + \tau)\Delta t$$

où l'on a posé, le schéma (4.13, Zooplancton) étant stable, $Z_{max} = \max_{k,n} |Z_k^n|$.

La stabilité du schéma (4.18, Nutriments) s'obtient par des arguments en tous points identiques.

$$\sigma(\mathbf{Q}) \leq 1 + (\mu_p \frac{1}{k_n} P_{max})\Delta t$$

Pour le schéma (4.21, Detritus) la matrice,

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_1^{-1}(\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{F}_D^n - \frac{v_d \Delta t}{\Delta x} \mathbf{A})$$

n'est plus symétrique et la condition,

$$\sigma(\mathbf{Q}) \leq 1 + (a_d + \frac{g_z}{2\sqrt{k_z}} Z_{max} + \mu_d + \tau)\Delta t$$

que l'on obtient facilement en supposant $\frac{v_d \Delta t}{\Delta x} \leq 1$ et sachant que les valeurs propres de $\mathbf{A}$ sont 0 et 1, n'est plus qu'une condition nécessaire de stabilité. $\square$

conclusion

A ce point, le schéma, avec valeur absolue, étant consistant et stable, nous sommes assurés de sa convergence par le théorème de Lax.

Si de plus Z_k^0, P_k^0, N_k^0 et D_k^0 sont positifs pour tout k , alors, pour Δt et Δx assez petits, Z_k^n, P_k^n, N_k^n et D_k^n sont positifs pour tout k et tout n car la solution du problème continu est positive. Ainsi le schéma numérique sans valeur absolue est lui aussi convergent.

4.4 Un second schéma

4.4.1 Motivation

Le schéma étudié précédemment est implicite-explicite. En effet, il est bien connu que le fait d'intégrer le terme de diffusion de manière implicite permet d'éviter d'obtenir une condition de stabilité du type $\frac{d\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$. Avec une telle restriction, toute simulation utilisant une petite discrétisation spatiale deviendrait très coûteuse. Typiquement, pour un pas d'espace $\Delta x = 5m$ et un coefficient de diffusion de l'ordre de $d \approx 10^{-1} m^2.s^{-1}$, le schéma est stable pour $\Delta t \leq 125 s$. Dans le schéma que nous avons présenté, reste seulement la condition $\frac{v_d \Delta t}{\Delta x} \leq 1$, soit encore avec $\Delta x = 5 m$ et sachant que v_d , la vitesse de sédimentation, est comprise entre 1 et 10 $m.jour^{-1}$, donne comme contrainte dans le cas le moins favorable $\Delta t \leq 1/2 jour$. Cette condition n'est pas du tout contraignante en pratique.

Les termes de réaction non-linéaires sont quant à eux intégrés de manière complètement explicite. Si cela ne pose pas de problème pour établir théoriquement la stabilité du schéma, certaines contraintes, potentiellement sévères, sur le pas de temps, peuvent surgir afin de garantir la positivité des concentrations calculées. Ce problème se comprend bien sur un exemple simple. Supposons que l'on veuille intégrer numériquement l'équation différentielle ordinaire,

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dt} &= \alpha y, \quad t > 0 \\ y(0) &= y_0 \end{aligned}$$

La solution de cette équation est bien évidemment, $y(t) = y_0 e^{\alpha t}$ et si $y_0 \geq 0$ alors $y(t) \geq 0$. Si $\alpha \geq 0$, la trajectoire est dite expansive, tandis que si $\alpha \leq 0$ elle est dite contractante.

La méthode d'Euler explicite s'écrit,

$$y_{n+1} = (1 + \alpha \Delta t) y_n$$

Supposons $y_n > 0$.

Si $\alpha > 0$ alors on a toujours $y_{n+1} > 0$.

Si $\alpha < 0$ alors $y_{n+1} > 0$ pour $\Delta t \leq \frac{1}{-\alpha}$.

La méthode d'Euler implicite s'écrit,

$$y_{n+1} = \frac{1}{(1 - \alpha\Delta t)} y_n$$

Supposons $y_n > 0$.

Si $\alpha > 0$ alors $y_{n+1} > 0$ si $\Delta t \leq \frac{1}{\alpha}$.

Si $\alpha < 0$ alors $y_{n+1} > 0$ est toujours vrai.

Ainsi il apparaît que pour garantir la positivité de la solution numérique, sans condition sur le pas de temps, les flots contractants doivent être intégrés implicitement alors que les flots expansifs doivent être intégrés explicitement. Cette idée est exploitée dans la suite pour formuler un nouveau schéma numérique.

4.4.2 Nouvelle discrétisation

Les termes de réaction étant non-linéaires, le α du paragraphe précédent dépend du temps, et une discrétisation complètement implicite des termes contractants imposerait la résolution de systèmes non-linéaires, ce qui n'est numériquement pas judicieux. Nous proposons donc ici une discrétisation semi-implicite de ces termes. L'algorithme est le même et seule la matrice $\mathbf{Q}_1$ des quatre systèmes linéaires à résoudre est modifiée.

Les nouveaux problèmes discrétisés s'écrivent:

Zooplankton:

$$(\mathbf{Q}_1 + \Delta t \mathbf{F}_{\mathbf{Zi}}) \mathbf{Z}^{n+1} = (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{F}_{\mathbf{Ze}^n}) \mathbf{Z}^n \quad (4.25)$$

$\mathbf{F}_{\mathbf{Ze}^n}$ est la matrice diagonale des termes de réaction explicites,

$$(\mathbf{F}_{\mathbf{Ze}^n})_{k,k} = (a_p \frac{g_z P_k^{n2}}{k_z + P_k^{n2}} + a_d \frac{g_z D_k^{n2}}{k_z + D_k^{n2}}) \mathbb{I}_{[0,l]}(x_k) \quad (4.26)$$

$\mathbf{F}_{\mathbf{Zi}^n}$ est la matrice diagonale des termes de réaction implicites,

$$(\mathbf{F}_{\mathbf{Zi}^n})_{k,k} = (m_z + \mu_z) \mathbb{I}_{[0,l]}(x_k) + (\tau) \mathbb{I}_{l,L]}(x_k) \quad (4.27)$$

Phytoplancton:

$$(\mathbf{Q}_1 + \Delta t \mathbf{F}_{\mathbf{Pi}}) \mathbf{P}^{n+1} = (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{F}_{\mathbf{Pe}}^n) \mathbf{P}^n \quad (4.28)$$

avec de la même façon,

$$(\mathbf{F}_{\mathbf{Pe}}^n)_{k,k} = (\mu_p L_{I,k}^n \frac{N_k^n}{k_n + N_k^n}) \mathbb{I}_{]0,l]}(x_k) \quad (4.29)$$

et,

$$(\mathbf{F}_{\mathbf{Pi}}^n)_{k,k} = (\frac{g_z P_k^n Z_k^n}{k_z + P_k^{n2}} + m_p) \mathbb{I}_{]0,l]}(x_k) + (\tau) \mathbb{I}_{]l,L]}(x_k) \quad (4.30)$$

Nutriments:

$$(\mathbf{Q}_1 + \Delta t \mathbf{F}_{\mathbf{Ni}}) \mathbf{N}^{n+1} = \mathbf{N}^n + \Delta t \mathbf{G}_{\mathbf{N}}^n \quad (4.31)$$

avec,

$$(\mathbf{F}_{\mathbf{Ni}}^n)_{k,k} = (\mu_p L_{I,k}^n \frac{1}{k_n + N_k^n} P_k^n) \mathbb{I}_{]0,l]}(x_k) \quad (4.32)$$

et,

$$\mathbf{G}_{\mathbf{N}}^n = (\mu_z Z_k^n + \mu_d D_k^n) \mathbb{I}_{]0,l]}(x_k) + (\tau (P_k^n + Z_k^n + D_k^n)) \mathbb{I}_{]l,L]}(x_k) \quad (4.33)$$

Détritus:

$$(\mathbf{Q}_1 + \Delta t \mathbf{F}_{\mathbf{Di}}) \mathbf{D}^{n+1} = (\mathbf{I} - \frac{v_d \Delta t}{\Delta x} \mathbf{A}) \mathbf{D}^n + \Delta t \mathbf{G}_{\mathbf{D}}^n \quad (4.34)$$

où,

$$(\mathbf{F}_{\mathbf{Di}}^n)_{k,k} = (a_d \frac{g_z D_k^n Z_k^n}{k_z + D_k^{n2}} + \mu_d) \mathbb{I}_{]0,l]}(x_k) + (\tau) \mathbb{I}_{]l,L]}(x_k), \quad (4.35)$$

$$\mathbf{G}_{\mathbf{D}}^n = ((1 - a_p) \frac{g_z P_k^{n2} Z_k^n}{k_z + P_k^{n2}} + m_p P_k^n + m_z Z_k^n) \mathbb{I}_{]0,l]}(x_k) \quad (4.36)$$

et, $\mathbf{A}$ est la même matrice que précédemment.

L'étude de la convergence de ce schéma s'effectue exactement de la même façon que pour le premier schéma et nous ne la reprenons pas ici.

4.4.3 Commentaires

Le deuxième schéma ici proposé présente l'avantage d'assurer le calcul de concentrations positives à chaque pas de temps. Il n'est pas plus coûteux numériquement que le premier schéma car dans les deux cas on n'a qu'à résoudre quatre systèmes linéaires à chaque itération. Ces résolutions se font par décomposition LU dont l'existence et l'unicité sont assurées par le fait que les matrices Q sont ici symétriques définies positives.

Chapitre 5

Cadre de travail, outils et méthodologie pour le problème inverse

Ce chapitre et le suivant concernent la mise en place et l'utilisation de la méthode variationnelle d'assimilation de données dans le modèle NNPZD-DOM. Ce chapitre débute par la description du cadre travail, à savoir la simulation de référence et les données utilisées. Ces données sont de deux types, les données physiques et les données biologiques. Seules les données biologiques sont assimilées. On développe ensuite les points clefs que sont la construction d'outils informatiques tels que les codes tangent et adjoint. Les résultats numériques des différentes expériences d'assimilation sont donnés dans le chapitre suivant.

5.1 Cadre de travail

5.1.1 Validation de la simulation physique de référence

La simulation physique de référence permet de calculer le coefficient de diffusion turbulente, K_T , intervenant dans le modèle biologique. Aucune procédure d'assimilation de données n'est utilisée sur le modèle physique. Les données physiques qui sont brièvement

présentées dans la suite servent uniquement dans le calcul des conditions aux limites en surface pour les variables physiques, vitesse $\mathbf{v}$, température T , salinité S et énergie cinétique turbulente e (équations (2.10) du chapitre 2) et pour une validation qualitative du modèle physique.

Comme il a été indiqué dans l'introduction, la station DYFAMED possède un certain nombre d'atouts comme la relative simplicité de la circulation océanique locale et l'existence de données qui incitent à l'utiliser comme cadre de travail. La simulation de référence dont nous partons est tout à fait similaire à celle décrite et qualitativement validée dans Mémery ([85]). La différence principale est le modèle biologique utilisé. Nous utilisons ici le modèle NNPZD-DOM décrit au chapitre 2 qui est une version légèrement simplifiée de celui utilisé dans Mémery ([85]).

Nous travaillons sur les années 1995-96-97 et plus particulièrement sur la dernière car c'est celle pour laquelle on dispose de plus de données biologiques pouvant être assimilées. Une montée en puissance (ou spin-up) du modèle est réalisée en simulant deux fois de suite l'année 95. La simulation totale est donc constituée des 5 années 95-95-95-96-97. L'état du système au premier janvier de la troisième année 1995 constitue la condition initiale pour la simulation de référence 95-96-97. Le pas de temps Δt est de 1 heure et le pas d'espace Δz de 5 m.

Les données physiques dont on dispose et qui sont utilisées pour forcer le modèle physique en surface sont les suivantes:

- salinité et température de surface (SSS, SST ou Sea Surface Salinity et Sea Surface Temperature) tous les mois.
- tension du vent toutes les 6 heures (données ECMWF, ou European Center for Medium-Range Weather Forecasts)
- flux de chaleur toutes les 6 heures (données ECMWF)

La simulation physique est validée en comparant les résultats numériques aux données mensuelles de profils de température (figure 5.1) et de profils de salinité (figure 5.2) pour l'année 1997 par exemple.

La figure (5.3) donne les variations en temps et en espace du coefficient de diffusion K_T , c'est-à-dire de l'entrée physique dans le modèle biologique.

Le modèle physique permet de représenter, dans une certaine mesure, le mélange profond hivernal suivi de la restratification de la colonne d'eau. Ce mécanisme permet de faire remonter l'azote vers la surface pour alimenter les cycles biologiques. A chaque cycle biologique, du nitrate est consommé et la couche de surface de la colonne d'eau s'appauvrit en NO_3 . L'azote est ensuite expulsé hors de la couche de surface par le biais des détritits (variable D) qui coulent à la vitesse v_d (terme $-v_d \frac{\partial D}{\partial z}$ dans les équations (2.39) et (2.39) du chapitre 2) et par la mortalité du zooplancton (terme en $-m_z Z^2$ dans l'équation (2.20) du chapitre 2), c'est l'export. Ainsi sans modèle physique réaliste sous-jacent le modèle biologique s'amortit vers un état stationnaire où la plupart de l'azote se trouve sous forme de nitrate au fond de la colonne d'eau.

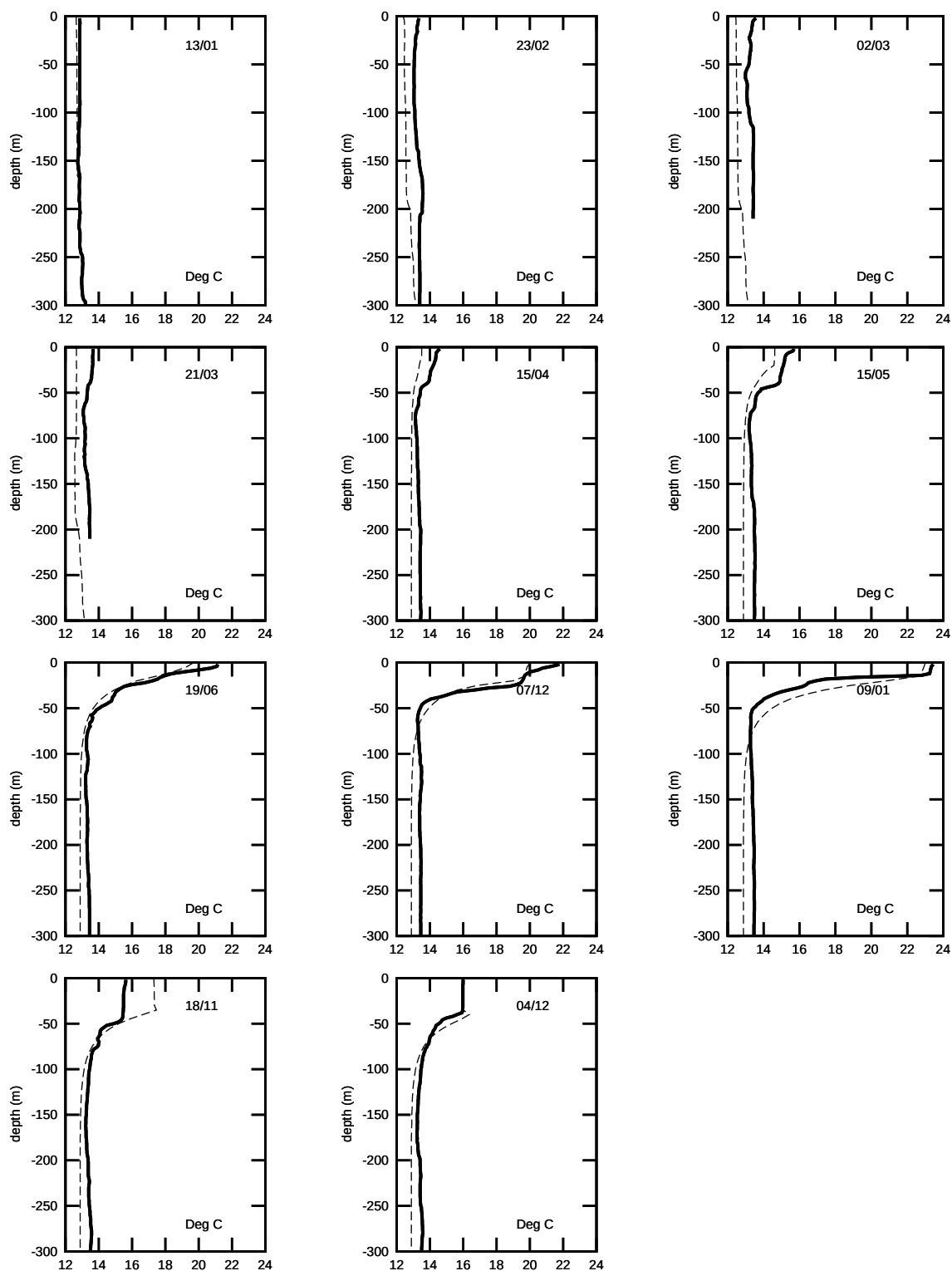


FIG. 5.1 – *Profils de température pour l'année 1997. Données, trait plein. Modèle, trait pointillé*

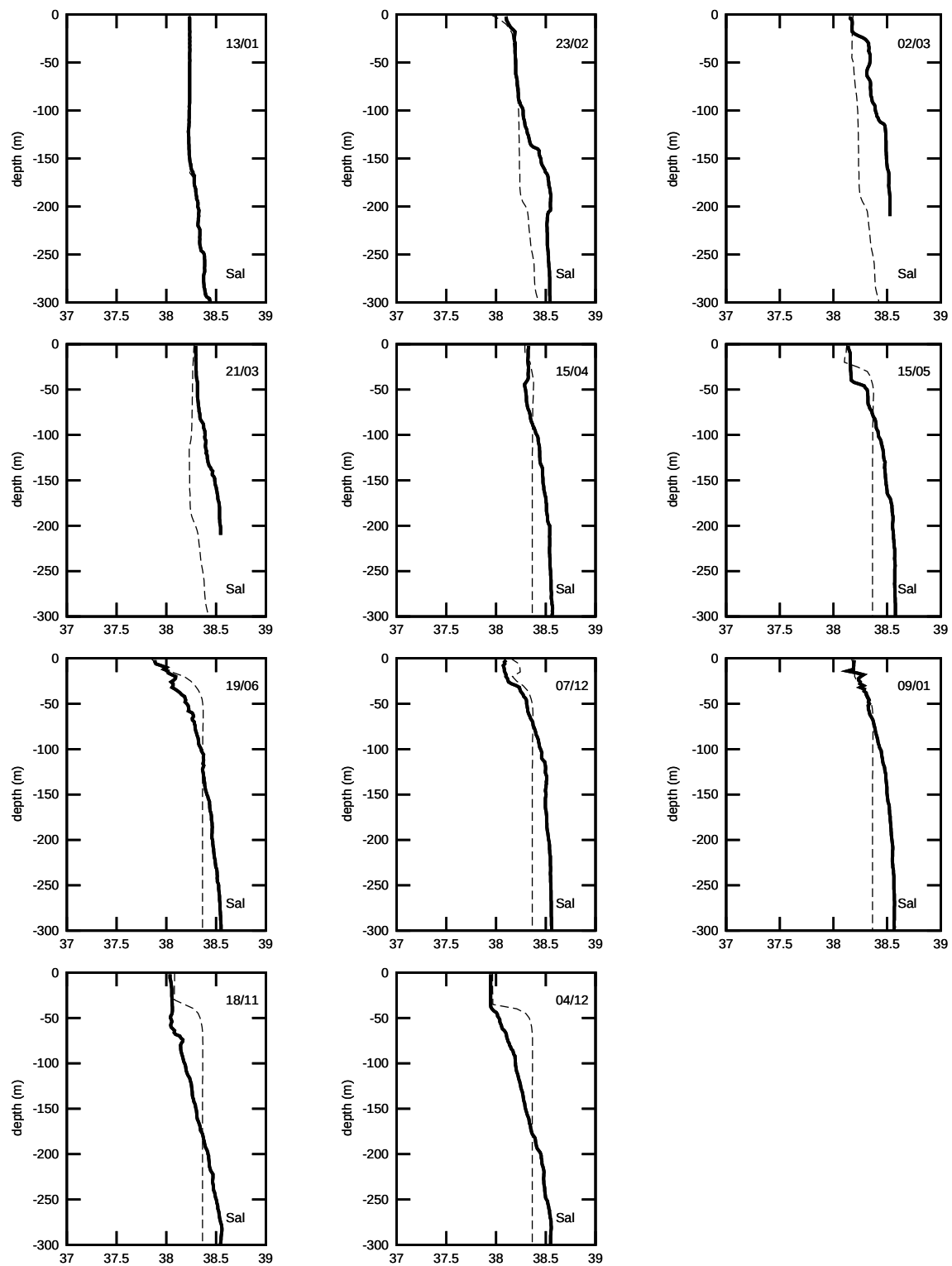


FIG. 5.2 – Profils de salinité pour l'année 1997. Données, trait plein. Modèle, trait pointillé

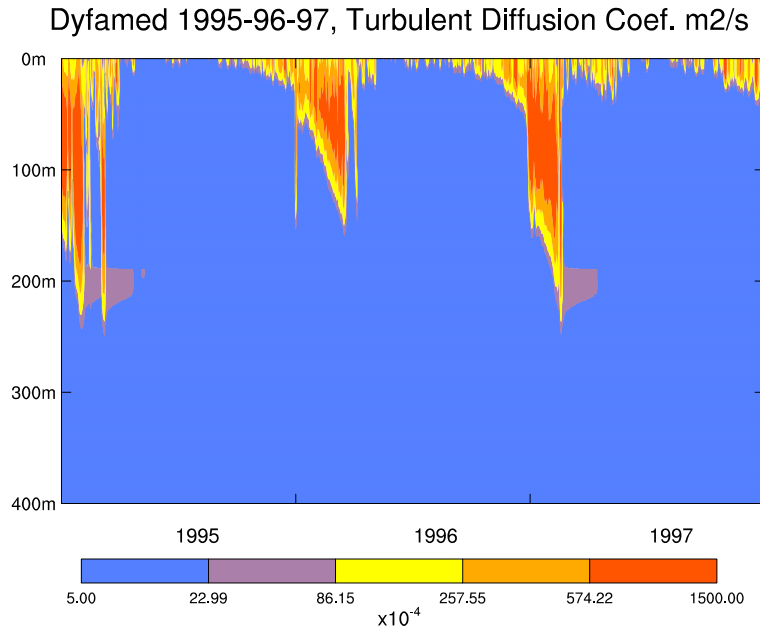


FIG. 5.3 – Coefficient de diffusion K_T

5.1.2 Paramétrisation hivernale

On ne dispose pas ici de données d'évaporation-précipitation et les flux atmosphériques utilisés dans cette étude ne permettent pas de suffisamment bien simuler le mélange profond hivernal. Ainsi en hiver, les profils de température et de salinité sont forcés vers les observations en rajoutant un terme de nudging aux équations pour T et S pendant 30 jours au mois de février. Ceci permet de sortir de l'hiver avec un mélange vertical bien représenté.

Comme pour la température et la salinité, les traceurs passifs dissous, comme NO_3 et DOM , sont rappelés en hiver vers des profils homogènes sur toute la colonne d'eau. Par exemple, le terme de réaction pour NO_3 , F_{NO_3} devient $F_{NO_3} + \alpha(N^r - NO_3)$. $N^r = 6 \text{ mmolN.m}^{-3}$ est la valeur du rappel. Elle a été choisie expérimentalement et correspond à la valeur moyenne de NO_3 en-dessous de 200 m d'après les données DYFAMED. Pour le DOM cette valeur de rappel vaut 0 mmolN.m^{-3} . La constante de temps α vaut $1/7 \text{ jour}^{-1}$ pendant 30 jours en hiver et est nulle sinon.

Nous verrons au chapitre suivant que ce profil de rappel, N^r , joue un rôle important

dans l'assimilation de données car il conditionne la quantité de nitrate présente dans le modèle. Il sera, alors, particulièrement intéressant de l'inclure dans le vecteur de contrôle comme un paramètre distribué à identifier.

5.1.3 Observations DYFAMED et sorties du modèle

Les observations disponibles à la station DYFAMED et que nous allons assimiler dans le modèle biologique sont de 3 types:

- des profils mensuels de nitrate
- des profils mensuels de chlorophylle
- des mesures quotidiennes de chlorophylle de surface

Rappelons que le modèle NNPZD-DOM est construit en azote. Chaque compartiment est représenté en terme de $mmolN.m^{-3}$. Les mesures de profils de nitrate sont également fournies en $mmolN.m^{-3}$, et il n'y a donc aucun problème de conversion entre sorties du modèle et données. On dispose donc directement d'observations de la variable $N0_3$. Ce n'est pas le cas pour la chlorophylle.

Pour pouvoir assimiler des données de chlorophylle dans le modèle NNPZD-DOM il nous faut relier des concentrations de chlorophylle ($mgChl.m^{-3}$) au phytoplancton (variable P du modèle en $mmolN.m^{-3}$). Certains modèles (par exemple, Hurtt et Armstrong, [54]; Geider *et al.*, [48]; Spitz *et al.*, [100]) incluent la chlorophylle comme une variable explicite (indépendante du phytoplancton), ce n'est pas le cas du modèle NNPZD-DOM. Il faut alors pouvoir convertir phytoplancton en chlorophylle et inversement. Pour cela, sont utilisés les rapports carbone:chlorophylle (r_c en $mgC/mgChl$) et carbone:azote ou rapport de Redfield (r_d en mgC/mgN). On pose alors,

$$Chlorophylle \ (mgChl.m^{-3}) = Phytoplancton \ (mmolN.m^{-3}) \times \frac{12r_d}{r_c},$$

$12 \ g.mol^{-1}$ est la masse molaire du carbone. Ces rapports sont, en première approximation, considérés comme des constantes, même si certaines mesures montrent qu'ils peuvent varier au cours du cycle annuel, avec la profondeur ou encore avec l'emplacement géographique. Nous verrons, au chapitre suivant, qu'une bonne assimilation des

données de chlorophylle dans le modèle NNPZD-DOM ne peut s'envisager avec un rapport carbone:chlorophylle constant.

5.2 Assimilation variationnelle, modèles tangent et adjoint

Dans ce paragraphe, nous donnons la formulation générale d'un problème d'assimilation variationnelle de données dans lequel les variables de contrôle sont les conditions initiales et les paramètres du modèle. Le formalisme est celui de Le Dimet et Talagrand ([62]). Considérons pour simplifier le modèle biologique discrétisé en espace décrivant l'évolution de la variable d'état $C \in E_e$, l'espace des états. Ce modèle s'écrit comme un système différentiel non linéaire.

$$\begin{cases} \frac{dC}{dt} = F(C, K) \\ C(0) = U \end{cases} \quad (5.1)$$

K est le vecteur des paramètres et U la condition initiale. $(U, K) \in E_e \times E_p$, l'espace des contrôles (E_p est l'espace des paramètres). F est l'opérateur non-linéaire représentant le modèle.

Supposons maintenant que l'on intègre ce système sur l'intervalle de temps $[0, T]$ et que l'on dispose d'observations $C_{obs}(t)$ continues en temps sur cet intervalle. C_{obs} appartient à un espace E_{obs} qui n'est pas forcément le même que l'espace E_e des états (par exemple on peut n'avoir des observations que sur certains compartiments biologiques). Soit alors un opérateur linéaire $H : E_e \rightarrow E_{obs}$, permettant de passer de l'espace des états à l'espace des observations. On définit une fonction coût, J mesurant la différence entre la solution de (5.1) associée à (U, K) (qui est unique d'après les résultats du chapitre 3) et les observations.

$$J(U, K) = \frac{1}{2} \int_0^T \|HC(K, t) - C_{obs}(t)\|_{E_{obs}}^2 dt \quad (5.2)$$

Le problème de contrôle optimal que l'on veut résoudre est alors le suivant:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{trouver } (U^*, K^*) \in E_e \times E_p \text{ tel que,} \\ J(U^*, K^*) = \inf_{(U, K) \in E_e \times E_p} J(U, K) \end{array} \right. \quad (5.3)$$

Dans le cas où le modèle F est non-linéaire les conditions usuelles d'unicité d'une solution pour ce problème d'optimisation ne sont pas vérifiées. Une condition nécessaire pour que (U^*, K^*) soit une solution est donnée dans le cas où J est différentiable (ce qui est encore le cas d'après les résultats du chapitre 1) par l'équation d'Euler-Lagrange:

$$\nabla J(U^*, K^*) = 0 \quad (5.4)$$

Le gradient de J , et donc la condition d'optimalité (5.4), peuvent s'exprimer à l'aide du modèle adjoint.

Soit $(h_U, h_K) \in E_e \times E_p$, $\hat{C}$ la dérivée directionnelle (dérivée de Gâteaux) de C dans la direction (h_U, h_K) est la solution du modèle linéaire tangent:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\hat{C}}{dt} = [\frac{\partial F}{\partial C}(C, K)]\hat{C} + [\frac{\partial F}{\partial K}(C, K)]h_K \\ \hat{C}(0) = h_U \end{array} \right. \quad (5.5)$$

La dérivée directionnelle de J vérifie:

$$\begin{aligned} \hat{J}(U, K, h_U, h_K) = & \int_0^T \langle HC(K, t) - C_{obs}, H\hat{C} \rangle_{E_{obs}} dt \\ & \int_0^T \langle H^T(HC(K, t) - C_{obs}), \hat{C} \rangle_{E_e} dt \end{aligned} \quad (5.6)$$

Introduisons alors la variable P , adjointe de C . Ecrivons le produit scalaire entre P et chacun des membres du système tangent et intégrons sur l'intervalle de temps $[0, T]$:

$$\int_0^T \langle \frac{d\hat{C}}{dt}, P \rangle_{E_e} dt = \int_0^T \langle [\frac{\partial F}{\partial C}(C, K)]\hat{C}, P \rangle_{E_e} dt + \int_0^T \langle [\frac{\partial F}{\partial K}(C, K)]h_K, P \rangle_{E_e} dt \quad (5.7)$$

Après une intégration par parties, il vient:

$$\langle \hat{C}(T), P(T) \rangle_{E_e} - \langle \hat{C}(0), P(0) \rangle_{E_e} - \int_0^T \langle \frac{dP}{dt} + [\frac{\partial F}{\partial C}(C, K)]^T P, \hat{C} \rangle_{E_e} dt = \int_0^T \langle [\frac{\partial F}{\partial K}(C, K)]^T P, h_K \rangle_{E_p} dt \quad (5.8)$$

où l'indice T désigne la transposition. Ainsi, si l'on définit P comme la solution du système,

$$\begin{cases} -\frac{dP}{dt} = [\frac{\partial F}{\partial C}(C, K)]^T P + H^T(HC - C_{obs}) \\ P(T) = 0 \end{cases} \quad (5.9)$$

on a,

$$\hat{J}(U, K, h_U, h_K) = \langle \hat{C}(0), P(0) \rangle_{E_e} + \int_0^T \langle [\frac{\partial F}{\partial K}(C, K)]^T P, h_K \rangle_{E_p} dt \quad (5.10)$$

Ainsi, le gradient de J est donné par,

$$\nabla J(U, K) = \begin{pmatrix} \nabla_U J(U, K) \\ \nabla_K J(U, K) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P(0) \\ \int_0^T [\frac{\partial F}{\partial K}(C, K)]^T P dt \end{pmatrix} \quad (5.11)$$

L'équation (5.9) constitue ce qui est couramment appelé le modèle adjoint forcé par l'écart aux observations.

En pratique, le calcul du gradient de J par rapport aux paramètres, $\nabla_K J(U, K)$, s'effectue de la manière suivante. On introduit la nouvelle variable adjointe $Q \in E_p$ et on pose,

$$\begin{cases} -\frac{dQ}{dt} = [\frac{\partial F}{\partial K}(C, K)]^T P \\ Q(T) = 0 \end{cases} \quad (5.12)$$

Il vient alors,

$$\nabla J_K(U, K) = Q(0) \quad (5.13)$$

Pour résumer, le calcul du gradient nécessite une intégration du modèle direct,

$$\begin{cases} \frac{dC}{dt} = F(C, K) \\ C(0) = U \end{cases} \quad (5.14)$$

et une sauvegarde de la trajectoire, puis une intégration rétrograde du système,

$$\begin{cases} -\frac{dP}{dt} = [\frac{\partial F}{\partial C}(C, K)]^T P + H^T(HC - C_{obs}) \\ -\frac{dQ}{dt} = [\frac{\partial F}{\partial K}(C, K)]^T P \\ P(T) = 0 \\ Q(T) = 0 \end{cases} \quad (5.15)$$

Le gradient de J ,

$$\nabla J(U, K) = \begin{pmatrix} \nabla_U J(U, K) \\ \nabla_K J(U, K) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P(0) \\ Q(0) \end{pmatrix} \quad (5.16)$$

pouvant être ainsi calculé, est utilisé dans une méthode d'optimisation de type descente permettant la détermination d'un minimum de J .

A ce stade du manuscrit, le lecteur pourrait s'attendre à voir développer dans la suite les équations adjointes continues du modèle NNPZD-DOM. Néanmoins nous ne nous lancerons pas dans une telle entreprise et ceci pour deux raisons. Tout d'abord, en pratique les équations adjointes continues ne sont que de peu d'utilité. En second lieu, vu la complexité du modèle et le nombre de paramètres qui interviennent dans sa formulation, l'écriture des équations adjointes continues semble être une tâche très fastidieuse dont le résultat ne serait que peu lisible. Le modèle adjoint a donc été obtenu uniquement numériquement par différentiation automatique. Le paragraphe suivant traite de ce travail.

5.3 Différentiation automatique

La résolution numérique du problème inverse implique le calcul du gradient de la fonction coût et donc la résolution du système adjoint. L'expression analytique du gradient de la fonction coût obtenu dans la section précédente montre l'intérêt d'écrire le code adjoint du modèle. De plus ce code doit être d'une grande fiabilité numérique afin de ne pas entraver la convergence de l'algorithme de descente. L'implémentation informatique de celui-ci se doit d'être réalisée par différentiation du code informatique représentant le système direct. En effet l'algorithme de minimisation prend en compte la valeur de la fonction coût et de son gradient et il est important qu'elles soient calculées à partir du même code. Le code adjoint généré par différentiation du code direct permet d'obtenir un gradient correct au regard du processus d'optimisation. Dans ce paragraphe, sont rappelés les principes et difficultés de la construction du code adjoint à partir du code direct, ainsi que les moyens de le valider.

5.3.1 Codes Tangent et Adjoint

Soit G un opérateur non-linéaire, prenant en entrée un vecteur u de taille n et donnant en sortie un vecteur v de taille m . G peut être vu comme un programme informatique.

Pour toute perturbation δu de u , un développement de $G(u + \alpha\delta u)$ autour du point u donne l'expression du code linéaire tangent GL associé à G :

$$G(u + \alpha\delta u) = G(u) + G'(u)\alpha\delta u + o(\alpha) \quad (5.17)$$

où α est un scalaire donné et $GL = G'(u)$. Le code linéaire tangent, en un point u donné calcule, pour une perturbation δu de u l'approximation au premier ordre δv de la perturbation correspondante de v :

$$\delta v = GL\delta u \quad (5.18)$$

GL peut être vu comme la matrice jacobienne de G au point u . Le code adjoint en un point u calcule, pour tout vecteur $\delta v'$ de dimension m , le vecteur $\delta u'$ de dimension n :

$$\delta u' = GL^T \delta v' \quad (5.19)$$

où GL^t est la matrice transposée de GL

Exemple de Construction des Codes Dérivés

Soit la fonction $g : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ définie par:

$$g(x, y) = \frac{x^2 y}{1 + x^2}$$

On reconnaît ici une fonction type grazing, x représentant par exemple le phytoplancton et y le zooplancton. Les variables d'entrée ou de contrôle sont x et y . Supposons que le code informatique G évalue g de la façon suivante:

$$\begin{aligned} X_1 &:= X^2 \\ X_2 &:= \frac{X_1}{1 + X_1} \\ Z &:= X_2 Y \end{aligned}$$

X_1 et X_2 sont des variables auxiliaires. Dans la suite on suffixe par l et a les perturbations en mode linéaire tangent et adjoint sur l'état (X, Y) autour duquel G est linéarisé.

Le modèle linéaire tangent GL associé à G s'obtient en dérivant le code non linéaire par rapport aux variables de contrôle ou auxiliaires et en effectuant ensuite le produit scalaire du gradient obtenu par les perturbations de ces variables.

$$X_1 := X^2$$

$$Xl_1 := 2XXl$$

$$X_2 := \frac{X_1}{1 + X_1}$$

$$Xl_2 := \frac{1}{(1 + X_1)^2}Xl_1$$

$$Zl := X_2Yl + YXl_2$$

Un logiciel de différentiation automatique procède lui, ligne à ligne, boucle par boucle, sous-routine par sous-routine, en conservant la structure du code.

Il est pratique d'exprimer ce code sous forme matricielle, pour cela une manière commode est de voir G comme une application de $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$,

$$G(X, Y, Z) = (X, Y, \frac{X^2Y}{1 + X^2})$$

Le modèle linéaire tangent s'exprime alors avec la jacobienne de G ,

$$GL(Xl, Yl, Zl) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{2XY}{(1 + X^2)^2} & \frac{X^2}{1 + X^2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Xl \\ Yl \\ Zl \end{pmatrix}$$

Construire le code adjoint va consister en la transposition de cette matrice. Si le code linéaire tangent GL est noté comme un produit d'opérations élémentaires, on a:

$$GL = GL_n GL_{n-1} \dots GL_1$$

En pratique, chaque matrice GL_i représente soit un sous-programme du code, soit une boucle d'un sous-programme soit même une instruction élémentaire, le modèle adjoint $GA = GL^T$ est le produit des adjoints des sous problèmes GL_i

$$GA = GL_1^T \dots GL_n^T$$

Les opérations se font à rebours. Le modèle adjoint est simplement obtenu en prenant la transposée de toutes les opérations effectuées dans le modèle linéaire tangent. Chaque sous programme, chaque boucle et chaque instruction possède sa propre image adjointe. Reprenons notre exemple:

On initialise à zéro les variables d'entrée adjointe Xa et Ya et on transpose la matrice obtenue précédemment.

$$GA(Xa, Ya, Za) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{2XY}{(1+X^2)^2} \\ 0 & 1 & \frac{X^2}{1+X^2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Xa \\ Ya \\ Za \end{pmatrix}$$

Si on réécrit ceci sous la forme d'un programme on a:

0. initialisation

$$Xa = Xa_1 = Xa_2 = Ya = 0$$

1. calcul et sauvegarde des termes non lineaires

$$X_1 := X^2$$

$$X_2 := \frac{X_1}{1+X_1}$$

2. transposition de $Zl := X_2Yl + YXl_2$

$$Xa_2 := Xa_2 + YZa$$

$$Ya := Ya + X_2Za$$

$$Za := 0$$

3. transposition de $Xl_2 := \frac{1}{(1+X_1)^2}Xl_1$

$$Xa_1 := Xa_1 + \frac{1}{(1+X_1)^2}Xa_2$$

$$Xa_2 := 0$$

4. transposition de $Xl_1 := 2XXl$

$$Xa := Xa + 2XXa_1$$

$$Xa_1 := 0$$

Ainsi, Za étant donné, on déduit les valeurs de Xa et Ya .

5.3.2 Modèle biologique et différentiation automatique

Un logiciel de différentiation automatique est un outil précieux pour obtenir un code adjoint. Nous avons utilisé le logiciel *Odyssée*, développé par l'INRIA (Faure et Papegay, [43]; Griewank, [50]) pour développer les codes dérivés du modèle NNPZD-DOM. Ce logiciel prend en entrée un code écrit en Fortran77 et construit les sources des codes linéaires tangent et adjoint. Si la production automatique des instructions adjointes est un atout important pour le développement du code adjoint, le code fourni par *Odyssée* n'est en général pas très efficace en termes de temps de calcul et d'utilisation de la mémoire. Le problème principal est celui de la sauvegarde de la trajectoire d'évaluation. En effet, l'intégration à rebours des équations adjointes nécessite à chaque instant t_i de connaître les éléments non linéaires à l'instant t_{i-1} . Ne bénéficiant pas de la connaissance du code de simulation direct qu'a son concepteur, l'outil de différentiation automatique est contraint de suivre des méthodes systématiques pour fournir cette trajectoire d'évaluation. Ainsi *Odyssée* fait systématiquement intervenir un calcul et une sauvegarde locale de la trajectoire, ce qui peut engendrer quelques désagréments lors de la compilation (pour un code 3D par exemple, comme cela a été tenté et abandonné la première année de cette thèse). Néanmoins dans un cadre de travail 1D, l'outil de différentiation automatique est tout à fait adapté et permet d'obtenir les codes dérivés après quelques modifications du code direct mais sans effort démesuré.

Certaines parties du code direct ne sont pas différentiables. C'est le cas des valeurs absolues, des calculs de maximum, minimum, des prises de signes et des racines carrées. Toutes ces fonctions peuvent être sources de problèmes et il n'y a pas de règles générales pour traiter les non-différentiabilités. *Odyssée* ne sait pas traiter les fonctions max-min, et le code biologique en contient un certain nombre. Il s'agit alors de les remplacer par

des instructions *IF-THEN-ELSE* permettant ainsi la linéarisation par Odyssée. Les conditions portant sur ce type d'instruction doivent être les mêmes dans le code adjoint et le code linéaire tangent, il est donc nécessaire de les sauvegarder ou les recalculer. En pratique, aucune régularisation n'a été réalisée sur les non-différentiabilités du code biologique. Ceci peut introduire des problèmes lors de la validation du code adjoint et peut-être aussi quelques ralentissements dans la minimisation. Malgré cela, les non-différentiabilités ne semblent pas très pénalisantes dans la mesure où le test du gradient (voir plus loin) est correct.

5.3.3 Calcul du gradient

Dans ce qui suit est résumé, du point de vue informatique, le point clé qu'est le calcul du gradient de la fonction coût. Pour simplifier, on considère que la variable de contrôle est un vecteur de paramètres, $K \in \mathbb{R}^p$.

On note $Nobs$ le nombre total d'observations dont on dispose. Celles-ci sont représentées par un vecteur $d \in \mathbb{R}^{Nobs}$.

On note $\phi : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^{Nobs}$ l'opérateur direct, ou modèle direct, qui, à un vecteur de contrôle K associe l'équivalent des observations calculé par le modèle. Enfin on note W une matrice diagonale $Nobs \times Nobs$ de pondération que l'on explicitera plus en détail au chapitre suivant. La fonction coût dont on cherche le gradient s'écrit,

$$J(K) = \frac{1}{2} \langle W(\phi(K) - d), (\phi(K) - d) \rangle_{Nobs}$$

où $\langle \cdot, \cdot \rangle_{Nobs}$ désigne le produit scalaire euclidien dans $\mathbb{R}^{Nobs}$.

En terme de programme informatique, si P_1 désigne le code du modèle direct ϕ et P_2 le code de calcul du coût, $COUT$ à partir de $\phi(K)$, on a

$$K \rightarrow \boxed{\text{DIRECT } P_1} \rightarrow P_1(K)(= \phi(K)) \rightarrow \boxed{\text{COUT } P_2} \rightarrow COUT(= J(K))$$

Le code tangent en un point K calcule, pour toute perturbation Kl sur les paramètres, la perturbation résultante sur le cout, $COUTl$:

$$Kl \rightarrow \boxed{\text{TANGENT } PL_1} \rightarrow PL_1.Kl (= \phi(K)'.Kl) \rightarrow \boxed{\text{TANGENT } PL_2} \rightarrow COUTl (= J'(K).Kl)$$

que l'on peut écrire

$$J'(K)Kl = (\nabla J(K), Kl)_{\mathbb{R}^p} = PL_2 PL_1 Kl = (Kl, PL_1^T PL_2^T .1)_{\mathbb{R}^p}$$

Ainsi

$$\nabla J(K) = PL_1^T PL_2^T .1$$

ce qui schématiquement devient:

$$\nabla J(K) \leftarrow \boxed{\text{ADJOINT } PL_1^T} \leftarrow PL_2^T .1 \leftarrow \boxed{\text{ADJOINT } PL_2^T} \leftarrow COUTa = 1$$

Ainsi, en initialisant la variable adjointe $COUTa$ à 1 on obtient en sortie de code le gradient de la fonction coût au point K .

Coût du calcul

Il s'agit ici de faire le bilan de la taille des exécutables et des temps CPU nécessaires à l'intégration des codes direct, tangent et adjoint sur une période de 1 an qui sera la période d'assimilation de données dans l'étude présentée au chapitre suivant.

Code	Période	Taille	Temps CPU
direct	1 an	60 Mo	15 s
tangent	1 an	140 Mo	35 s
adjoint	1 an	700 Mo	160 s

TAB. 5.1 – Comparaison des coûts des 3 codes

Le surcoût du modèle linéaire tangent est essentiellement dû au supplément de calcul de la trajectoire de référence. Un calcul de gradient, c'est-à-dire une intégration du modèle adjoint est environ 10 fois plus coûteuse qu'une simulation directe. Ceci est en grande partie dû au calcul, à la sauvegarde et à la lecture de la trajectoire de référence.

Test de l'exactitude du gradient, comparaison avec les différences finies

Il s'agit maintenant de tester la validité du code adjoint en vérifiant son adéquation avec le code direct. Pour cela on compare le gradient $\nabla J(K)$, calculé avec le code adjoint, aux différences finies calculées avec le code direct. D'après la formule de Taylor, on doit avoir:

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{J(K + \alpha Kl) - J(K)}{\alpha \langle \nabla J(K), Kl \rangle} = 1 \quad (5.20)$$

Si l'on considère que K est un vecteur d'une vingtaine de paramètres, il est possible d'effectuer le test par rapport à chaque composante du vecteur K . Le tableau 5.2 propose un exemple de ce test permettant de valider le calcul du gradient. Le rapport (5.20) tend linéairement vers 1 lorsque α tend vers 0. Numériquement on observe que pour des valeurs trop faibles de α les erreurs d'arrondis dominent et la valeur du rapport (5.20) diverge.

α	rapport(5.20)
10^{-1}	32.2822430148109
10^{-2}	1.88707741579325
10^{-3}	1.07410794243394
10^{-4}	1.00727568101925
10^{-5}	1.00072622065474
10^{-6}	1.00007259909802
10^{-7}	1.00000695476784
10^{-8}	0.99999768349387
10^{-9}	0.99997414606685
10^{-10}	1.00045507471139
10^{-11}	0.99979246356811
10^{-12}	1.02043810646193
10^{-13}	1.09715694769523
10^{-14}	0.62044492498966

TAB. 5.2 – Test du gradient

Si par contre on considère des paramètres distribués en espace, la taille du vecteur K

augmente énormément et l'on peut difficilement effectuer le test dans toutes les directions. Il faut alors se contenter de quelques unes. L'ultime test sera basé sur l'efficacité de la minimisation de la fonction coût lors des expériences d'assimilation.

5.4 Minimisation

Pratique de l'Estimation de Paramètres

Dans la pratique, on utilise un algorithme de minimisation pour rechercher un minimum de la fonction coût. Chaque pas de la minimisation demande le calcul du gradient de la fonction coût par rapport aux paramètres. L'estimation numérique de paramètres consiste en la répétition des 3 étapes suivantes:

1. Intégrer le modèle direct sur $[0, T]$ en utilisant la valeur courante du vecteur K pour les paramètres. La condition initiale et les forcages physiques sont donnés, la solution C ne dépend que des paramètres.
2. Intégrer le modèle adjoint pour déterminer le gradient de la fonction coût $\nabla J(K)$
3. Faire un pas de l'algorithme de descente pour trouver une nouvelle valeur du vecteur K . Retourner en 1.

L'algorithme de descente utilisé est un algorithme de quasi-Newton à mémoire limitée, en double précision, *n1qn3*, programmé par J.C Gilbert et C. Lemaréchal de l'INRIA (Gilbert et Lemaréchal, [49]). Rappelons que l'algorithme de Newton pour la recherche d'un zéro d'une fonction multi-variable consiste à résoudre successivement des problèmes linéarisés au voisinage du point courant, ce qui donne l'algorithme:

Soit $G : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, et soit à résoudre $G(X) = 0$. On part d'un point $X_0 \in \mathbb{R}^n$ et on construit une suite $X_k \in \mathbb{R}^n$, qui converge vers un zéro de G sous certaines conditions. Cette suite est définie par:

$$X_{k+1} = X_k - [JacG(X_k)]^{-1}.G(X_k)$$

où $JacG(X_k)$ est le Jacobien de G calculé au point X_k . Dans un problème de minimisation, la fonction G dont on cherche le zéro est la fonction qui, à chaque point de l'espace,

associe le gradient de la fonctionnelle, J , à minimiser, calculé en ce point.

$$\begin{aligned} G : \mathbb{R}^n &\rightarrow \mathbb{R}^n \\ X &\rightarrow \nabla J(X) \end{aligned}$$

Le Jacobien de G au point X_k est dans ce cas le Hessien de la fonction coût J calculé au même point. L'algorithme de Newton pour un problème de minimisation s'écrit alors:

$$X_{k+1} = X_k - [HessJ(X_k)]^{-1} \cdot \nabla J(X_k)$$

Pour une bonne convergence, en pratique, on rajoute un paramètre de pas de descente, ρ_k :

$$X_{k+1} = X_k - \rho_k [HessJ(X_k)]^{-1} \cdot \nabla J(X_k)$$

La méthode de quasi-Newton utilise la formule BFGS (respectivement BFGS inverse) due à Broyden, Fletcher, Goldfard et Shanno, qui permet d'évaluer récursivement une approximation du Hessien (respectivement de l'inverse du Hessien) au point X_k . Cette formule n'utilise que les vecteurs gradients $G_k = \nabla J(X_k)$ et les points X_k auxquels ils sont évalués. Cette méthode est donc en réalité une méthode de type gradient car elle utilise seulement les dérivés jusqu'à l'ordre 1 de la fonctionnelle J à minimiser. Elle s'écrit de la manière suivante:

On suppose X_0 donné et $k - 1$ itérations effectuées, le point X_k est connu.

1. Calcul du gradient au point X_k

$$G_k = \nabla J(X_k)$$

2. Calcul de la direction de descente

$$d_k = -H_k G_k$$

où $H_k = B_k^{-1}$, $B_k \approx HessJ(X_k)$,

3. Calcul du pas de descente ρ_k

$$J(X_k + \rho_k d_k) = \inf_{\rho \in \mathbb{R}} J(X_k + \rho d_k)$$

c'est-à-dire on cherche le minimum de J dans la direction de descente

4. Définition du point X_{k+1}

$$X_{k+1} = X_k + \rho_k d_k$$

A chaque itération, B_k et H_k sont calculés par les formules suivantes:

– la formule BFGS

$$B_{k+1} = B_k + \frac{[y_k \otimes y_k]}{\langle y_k, s_k \rangle} - \frac{[(B_k s_k) \otimes (B_k s_k)]}{\langle s_k, B_k s_k \rangle}$$

– la formule BFGS inverse

$$H_{k+1} = H_k + \frac{[(s_k - H_k y_k) \otimes s_k] + [s_k \otimes (s_k - H_k y_k)]}{\langle y_k, s_k \rangle} - \frac{\langle s_k - H_k y_k, y_k \rangle}{\langle y_k, s_k \rangle^2} [s_k \otimes s_k]$$

où $s_k = X_{k+1} - X_k$ est la différence entre deux points, $y_k = G_{k+1} - G_k$ est la différence entre deux gradients, $\langle ., . \rangle$ est le produit scalaire choisi sur $\mathbb{R}^n$, et $[\cdot \otimes \cdot]$ est le produit tensoriel associé à ce produit scalaire, c'est-à-dire :

$$[\cdot \otimes \cdot] : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathcal{L}(\mathbb{R}^n)$$

avec,

$$[U \otimes V]X = \langle V, X \rangle U \quad \forall X \in \mathbb{R}^n$$

Dans le cas où le produit scalaire choisi est le produit scalaire Euclidien, alors la matrice, dans la base canonique, du produit tensoriel $[U \otimes V]$ s'écrit UV^T . En pratique, on ne mémorise pas tous les coefficients des matrices B_k ou H_k . Elles ne dépendent que de n_k couples de vecteurs $(y_i, s_i)_{1 \leq i \leq n_k}$. Ces vecteurs permettent de calculer la direction de descente, $d_k = -H_k G_k$, à la k^{ieme} étape de la minimisation. La méthode de quasi-Newton à mémoire limitée consiste à calculer la matrice H_k en ne faisant intervenir qu'un nombre limité de couples de vecteurs (y_i, s_i) les plus récents. C'est une méthode très efficace (relativement à la méthode QN à mémoire complète) pour un coût de stockage raisonnable.

Le critère d'arrêt utilisé est le suivant:

$$\frac{\|\nabla J(K^n)\|}{\|\nabla J(K^0)\|} \leq \epsilon$$

où l'indice n désigne le nombre d'itérations et ϵ est un seuil fixé de l'ordre de 10^{-4} . Il a été montré que ce test donne des résultats assez satisfaisants. Il faut cependant se méfier du cas où le vecteur d'initialisation K_0 est proche d'un minimum car alors la quantité $\|\nabla J(K_0)\|$ est initialement petite.

Adimensionnalisation des Paramètres

Dans le code direct, les différents paramètres ont chacun leur unité et des ordres de grandeurs très différents. Numériquement, ceci a un effet néfaste sur la minimisation. On peut le comprendre d'au moins deux facons différentes. La première est de considérer que lors d'une itération d'un algorithme de descente simple, on passe de K^n à K^{n+1} par

$$K^{n+1} = K^n + \lambda^n \nabla J(K^n)$$

où λ^n est un réel sans unité. Si u_i est l'unité de K_i alors $\nabla J(K)_i$ est exprimé en unité u_i^{-1} . Ainsi le gradient et l'efficacité de la minimisation dépendent du système d'unité utilisé. Il est en général recommandé de travailler avec des variables sans dimension.

Le second point de vue est de regarder l'effet de l'adimensionnalisation du vecteur des paramètres sur le conditionnement de la matrice hessienne de la fonction coût. Soit la matrice diagonale, $D^{-1} = \text{diag}(\frac{1}{K_1^0}, \dots, \frac{1}{K_p^0})$ où K^0 est le vecteur des paramètres de référence. On effectue le changement de base $k = D^{-1}K$, k est un vecteur sans dimension. Si H est la matrice hessienne de $J(K)$ au point K^0 , on a,

$$J''(K^0)h_K \hat{h}_K = h_K^T H \hat{h}_K = h_k^T D H D \hat{h}_k.$$

Ainsi la matrice $\bar{H} = D H D$ est la matrice hessienne de la fonction coût exprimée dans la base des paramètres sans dimension. Adimensionnaliser les paramètres c'est préconditionner H .

Dans toute la suite tous les calculs sont faits avec des paramètres sans dimension. Typiquement, nous verrons dans les résultats numériques du chapitre suivant que le conditionnement de $\bar{H}$ est de l'ordre de 10^6 alors que celui de H , c'est-à-dire sans adimensionnaliser les paramètres, est de l'ordre de 10^{20} . Les paramètres sont donc pris sans dimension, chacun d'eux a été divisé par sa valeur de référence.

5.5 Un problème inverse non-linéaire

La linéarité ou la non-linéarité d'un problème inverse dépend à la fois de la dynamique du modèle et du type de variable de contrôle. Prenons comme exemple simple de modèle, l'équation différentielle ordinaire linéaire:

$$\begin{aligned}\frac{dy}{dt} &= ay \\ y(0) &= y_0\end{aligned}$$

Supposons que l'on dispose d'une observation continue de y , $d(t)$ sur $[0, T]$. On définit la fonction coût,

$$J = \int_0^T |y_0 e^{at} - d(t)|^2 dt$$

Le modèle étant linéaire, la solution $y(t)$ est linéaire en y_0 . Si la variable de contrôle est y_0 , on est assuré de l'existence d'un unique minimum de $J(y_0)$ qui est une parabole. Par contre même pour un modèle linéaire la dépendance de y par rapport au paramètre a n'est plus linéaire et rien ne permet a priori de garantir que la fonction coût $J(a)$ est convexe.

Le problème inverse d'estimation de paramètres est toujours non linéaire et la fonction coût peut présenter une géométrie compliquée avec minima locaux et points selles. Pour cette raison certains auteurs cherchent à utiliser des méthodes de minimisation globale non linéaire comme les algorithmes génétiques (Athias [6], [5]). Notre approche est différente et consiste à dire que le minimum global de la fonction coût ne nous intéresse pas vraiment, étant donné que l'on a déjà une idée sur les valeurs a priori des paramètres et surtout que la biologie impose à ces paramètres de rester compris entre une valeur inférieure et une valeur supérieure au-delà desquelles ils ne sont plus acceptables et ne reflètent plus une réalité physique. Nous allons donc dans la suite traiter le problème localement autour des valeurs de référence des paramètres.

Dans ce cadre, afin de s'assurer que la fonction coût ne présente pas de formes trop complexes, on peut en tracer des coupes en faisant varier un paramètre dans un intervalle de valeurs admissibles et en fixant les autres à leur valeur de référence. Le tableau (5.3) donne les valeurs de référence de 19 des paramètres du modèle NNPZD-DOM ainsi que les intervalles de valeurs admissibles pour chacun d'entre eux.

La figure (5.4) donne les coupes de la fonction coût selon chacun de ces 19 paramètres. Nous sommes ici dans le cadre "expériences jumelles", c'est-à-dire dans le cadre où les

paramètre	valeur	unité	valeur sans dimension (k^0)	intervalle admis- sible sans dimension
k_n	0.01	$mmolm^{-3}$	1	[0,2]
r_{c-chl}	55	$mgC.mgChla^{-1}$	1	[0.5,3]
γ	0.05		1	[0,2]
r	0.7		1	[0.5,1.5]
g_z	8.68E-6	s^{-1}	1	[0.7,1.3]
k_z	1	$mmolN.m^{-3}$	1	[0.1,1.9]
a_p	0.3		1	[0,2]
a_d	0.5		1	[0,2]
μ_z	1.16E-6	s^{-1}	1	[0.75,1.25]
m_p	9.027E-7	s^{-1}	1	[0.6,1.6]
m_z	1.0E-7	$mmolN.m^{-3}.s^{-1}$	1	[0,2]
μ_d	1.04E-6	s^{-1}	1	[0.5,1.5]
v_d	5.8E-5	$m.s^{-1}$	1	[0,2]
μ_p	2.31E-5	s^{-1}	1	[0.5,1.5]
k_{par}	33.33	$W.m^{-2}$	1	[0.5,1.5]
τ	5.80E-5	s^1	1	[0.5,1.5]
f_n	0.8		1	[0.8,1.2]
μ_n	3.81E-7	s^{-1}	1	[0,2]
μ_{dom}	6.43E-8	s^{-1}	1	[0,2]

TAB. 5.3 – Tableau des paramètres

observations ne sont pas des données réelles mais ont été calculées par le modèle à partir des valeurs de référence des paramètres. Ainsi la fonction coût s'écrit,

$$J(k) = \frac{1}{2} < W(\phi(k) - \phi(k_0)), (\phi(k) - \phi(k_0)) >_{Nobs}$$

où k est le vecteur des paramètres sans dimension. Ces 19 paramètres ont été sélectionnés parmi tous les paramètres du modèle à partir d'une analyse de sensibilité a priori.

Cette étude de sensibilité utilise le modèle linéaire tangent. Elle est décrite dans le chapitre suivant. Son utilité est de permettre d'éliminer du vecteur de contrôle les paramètres dont les variations n'ont a priori que très peu d'influence sur les valeurs de la fonction coût et qui ne sont donc pas précisément identifiables avec les données disponibles.

Si les coupes de la fonction coût présentées ici ne sont pas des paraboles, elles ne sont en revanche pas extrêmement complexes et présentent chacune un unique minimum correspondant aux paramètres de référence. Les expériences jumelles présentées dans le chapitre suivant constituent le test final quant à la possibilité d'identifier ces paramètres par la minimisation de la fonction coût.

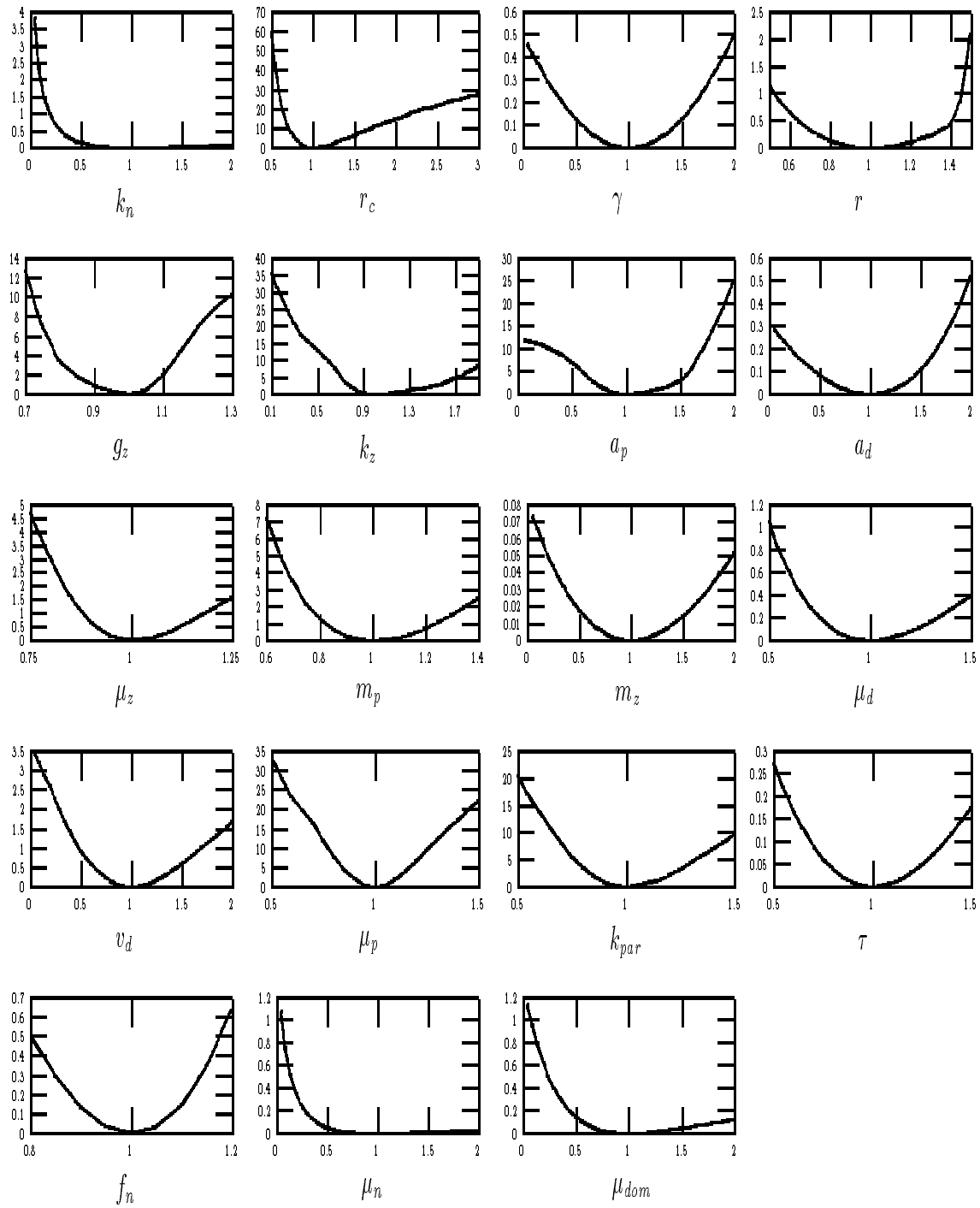


FIG. 5.4 – Coupes de la fonction coût pour chacun des 19 paramètres variant dans son intervalle de valeurs admissibles.

Chapitre 6

Assimilation des données de la station DYFAMED

Ce chapitre, rédigé en anglais, constitue un article accepté pour publication dans la revue, *Journal of Marine Systems*.

Can biogeochemical fluxes be recovered from nitrate and chlorophyll data? A case study assimilating data in the Northwestern Mediterranean Sea at the JGOFS-DYFAMED station.

**Blaise Faugeras^a, Marina Lévy^b, Laurent Mémery^b,
Jacques Verron^c, Jacques Blum^d, Isabelle Charpentier^a**

^aLaboratoire de Modélisation et Calcul, IMAG, Tour IRMA, 51 rue des Mathématiques, Domaine Universitaire, BP 53, 38041, Grenoble Cedex 09, France

^bLODYC, Université Pierre et Marie Curie, 5 Place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05, France

^cLaboratoire des Ecoulements Géophysiques et Industriels, BP53X, 38041, Grenoble, France

^dLaboratoire J.A. Dieudonné, Université de Nice-Sophia-Antipolis, 06108, Nice Cedex 02, France

Abstract

One of the principal objectives of studying biogeochemical cycles is to obtain precise estimates of the main fluxes, such as total, new and export oceanic productions. Since models can incorporate the a priori knowledge of the most important processes, they are increasingly used for this purpose. However, biogeochemical models are characterized by a large number of poorly known parameters. Moreover, the available data are rather sparse in both time and space, and represent concentrations, not fluxes. Therefore, the major challenge is to constrain the relevant fluxes using information from a limited number of observations and from models incorporating poorly known internal parameters.

The present study attempts to meet this challenge. In a 1D framework at the DYFAMED station (NW Mediterranean Sea), near-monthly nitrate and chlorophyll profiles and daily surface chlorophyll concentrations are assimilated in a coupled dynamical-biological model using the tangent linear and adjoint models. Following sensitivity analyses that show that some parameters cannot be recovered from the data set used, assimilation of observed 1997 data is performed. The first inversion considered clearly shows that, in agreement with previous studies, 1) the data impose a C:Chl ratio that varies with depth (i.e. light) and 2) the "initial" conditions (e.g. winter nitrate profile) strongly constrain the annual biogeochemical fluxes. After assimilation of the 1997 data, the agreement between the data and the model is quantitatively improved in 1995 and 1996, which can be considered a good validation of the methodology. However, the order of magnitude of the biogeochemical fluxes, and especially of the particulate export and regenerated production, are not correctly recovered. An analysis of the simulations shows that this result is associated with a strong decrease in zooplankton concentrations. An additional constraint of maintaining acceptable levels of zooplankton is therefore added. The results are improved, but remain unsatisfactory. A final inversion, which takes into account the a priori estimates of the major annual fluxes, is then performed. This shows that there is no inconsistency between the NO_3 and chlorophyll data, the order of magnitude of the fluxes and the model. The work therefore demonstrates that recovering biogeochemical fluxes from available data of concentrations and stocks is not a straightforward exercise: the coverage and type of observations, and the non-linearities of the biogeochemical model all contribute to this difficulty.

6.1 Introduction

Together with ocean dynamics, the main biogeochemical fluxes such as total, new and export productions, control the total inorganic content of the mixed layer, which in turn affects carbon dioxide exchanges between the ocean and the atmosphere. The study of biogeochemical cycles endeavours to estimate these fluxes accurately. Modeling approaches have the advantage of being able to make use of a priori knowledge, and are

increasingly used for such purposes. But the solutions of biogeochemical models depend to a large extent on the values of the biological parameters. These parameters are not only numerous, but most of them are poorly known since they often represent unmeasurable variables used in the parameterization of complex exchanges between biological compartments. Moreover, these compartments represent the averaged behavior of different biological species. Traditionally, the parameters are tuned until the best agreement between model results and data is reached. Data assimilation techniques provide a powerful means to achieve this tuning, and are becoming a mandatory step in model development. However although theoretically appealing, the practical use of data assimilation is a difficult task, and exploratory studies are needed before data assimilation can be routinely used in 3D biogeochemical models.

The available biogeochemical data are rather sparse in time and space, and often represent concentrations and not fluxes. Indeed, biogeochemical fluxes are difficult to measure on a routine basis. Primary production measurements require in-situ incubations, while export measurements are generally evaluated from the deployment of sediment traps. Moreover, the error associated with these measurements is quite high (Richardson, 1993; Buesseler et al., 1992; Buesseler et al., 2000). Nitrate and chlorophyll data, on the other hand, are more accessible, more widespread, and more precise.

The major challenge is therefore to try to constrain the biogeochemical fluxes using information from a limited number of stock observations and non-linear models associated with poorly known internal parameters. Such an attempt is presented in this study. In a 1D framework at the DYFAMED station, near-monthly nitrate and chlorophyll profiles and daily surface chlorophyll concentrations are assimilated in a coupled dynamical-biological model using the tangent linear and adjoint models.

There are several reasons why the DYFAMED station, located in the Northwestern Mediterranean Sea, is an interesting test case. First, several biogeochemical production regimes that take place in the world ocean are found here. Deep convection occurs during winter, leading to a spring bloom. Oligotrophy prevails during summer while perturbations in the meteorological forcing generate a secondary bloom in fall. Secondly, the station is far enough away from the Ligurian Current to be sufficiently protected from

lateral transport, thereby permitting a 1D study. Moreover, DYFAMED is a JGOFS time-series station which means that a data set of biogeochemical and physical parameters is available to carry out and validate simulations. A final reason for using the DYFAMED station is that it is relatively well known (Deep-Sea Res. II, special issue, 29(12), 2002, in press), and has been the subject of previous model studies (Lévy et al., 1998a, Mémery et al., 2002).

Several inverse methods have been applied to the estimation of biogeochemical parameters. These methods are all based on the minimization of a cost function that depends on the parameters to be estimated and measures the distance between the observations and the corresponding values calculated by the model. But as pointed out by Athias et al. (2000), the result of the assimilation may depend on the choice of the inverse method used to find the minima of the cost function. It is thus of primary importance to choose an adequate method and test its performance. Most previous studies have used a variational data assimilation approach, based on a linearization of the cost function around an a priori solution (Prunet et al. 1996a,b), and a gradient descent method (Fennel et al., 2001; Gunson et al., 1999; Lawson et al., 1995, 1996; Schartau et al., 2001; Spitz et al., 1998, 2001). Other studies have used non-linear optimization techniques (Evans, 1999; Fasham and Evans, 1995) or global optimization algorithms such as simulated annealing (Athias et al., 2000; Hurtt and Armstrong, 1996, 1999; Matear, 1995).

Mathematical arguments favor the choice of non-linear techniques. Indeed, the inverse parameter estimation problem is always a non-linear problem, even in the case of linear dynamics (Evensen et al., 1998). Therefore, the cost function may possess different local minima. There are, however, three reasons why, in our opinion, the optimal control method, often referred to as the adjoint method, is promising. First of all, global optimization algorithms require a large number of cost function evaluations and this does not seem possible using a full three-dimensional model, which is the final goal of ocean color data assimilation. Secondly, the adjoint method is already being used with some success in ocean global circulation models, which is a first step towards its implementation in 3D biogeochemical models. Thirdly, the a priori parameter values or “first guess” values required in the adjoint method are not completely unknown, even if they are attributed

large error bars. It therefore seems natural to treat the inverse problem locally around these a priori values. The ideas and mathematical concepts of optimal control theory were formalized about thirty years ago (Lions, 1971) and have since received a lot of attention with respect to their applications in meteorology (Le Dimet, 1986; Courtier and Talagrand, 1987; Talagrand and Courtier, 1987) and oceanography (Long and Thacker, 1989a,b; Luong et al., 1998).

For simplicity, most previous biogeochemical data assimilation studies have considered 0D model set-ups, in which biogeochemical variables correspond to mixed-layer values. This approach is suitable when most biogeochemical activity occurs within the mixed layer. This is the case in the spring phytoplankton bloom, provided that the upload of nutrients is correct. It is, however, not the case for oligotrophic regimes, where the chlorophyll maximum is below the mixed layer. The novelty of our approach is in the use of the adjoint technique in a 1D context to assimilate observed data, as well as the first use of the DYFAMED data set for data assimilation purposes.

The biogeochemical model used in this study comprises six nitrogen compartments. In a study where data from the Bermuda Atlantica Time Series (BATS) station are assimilated, Spitz et al. (2001) warn that data cannot be satisfactorily assimilated if the structure of the biogeochemical model is not adequate. We follow the procedure adopted by Spitz et al. (2001) and use the results of a first assimilation attempt to modify the model. We show that a significant improvement in model performance is obtained when the C:Chl ratio is allowed to vary in the vertical, and also when the winter nitrate upload is estimated.

The paper is organized as follows: after a presentation of the model and the method, sensitivity analyses are carried out to determine which parameters can be recovered from the data set used. Then an assimilation of observed data for the year 1997 is performed. After the assimilation, some of the fluxes (e.g. particulate export production) are shown to be very poorly estimated. An analysis of the simulation shows that zooplankton values have fallen to a very low level, which would explain this result. An additional constraint is then added: the zooplankton stock during the post bloom regime (Andersen et Prieur, 2000). Although the results are improved, they are still not satisfactory. The method is

then validated using independent data from years 1995 and 1996. A final inversion is then carried out that also takes into account the a priori estimates of the major annual fluxes (total and new productions, and particulate and dissolved exports). This inversion shows that there is no inconsistency between the nitrate and chlorophyll data, the estimates of the fluxes and the model used. The difficulty of recovering the biogeochemical fluxes from real data assimilation of concentrations and stocks (nitrate, chlorophyll, eventually zooplankton) is then discussed.

6.2 Description of the model and data

6.2.1 Model description

The biogeochemical model used in this study is a NNPZD-DOM model (Nitrate, Ammonium, Phytoplankton, Zooplankton Detritus, Dissolved Organic Matter), qualitatively calibrated for DYFAMED by Mémery et al. (2002). Compared to other more complete models (Fasham et al., 1990; Lévy et al., 1998a), its relative simplicity is a trade-off to obtain a first approximation of the basic biogeochemical fluxes with a minimum number of prognostic variables. Nitrate and ammonium allow the estimation of new and regenerated production, zooplankton mortality and detrital sedimentation feed the particle export flux, and winter mixing of accumulated semi-refractory DOM is associated with the dissolved export flux, which can be the major export flux in the Mediterranean Sea (Copin-Montégut and Avril, 1993). A schematic representation of the model is shown on Fig. 6.1, and the basic equations are presented below. More details about the modeled biogeochemical processes can be found in Mémery et al. (2002) and in Lévy et al., (1998a).

The biogeochemical model is embedded in a 1D physical model, which simulates the evolution over time of velocity, temperature, salinity and turbulent kinetic energy (TKE). As for dynamical processes, the only one taken into account is vertical diffusion. The mixing coefficient, K_T , is obtained diagnostically from TKE, with a 1.5 closure scheme in the Mellor Yamada nomenclature (Gaspar et al., 1990). The model covers the first 400 m of the water column, with a vertical discretization of 5 m.

The biogeochemical tracers are vertically mixed with the same diffusion coefficient as temperature and salinity. A specific reaction term, F_C , is added to the diffusion equation. Tracers are expressed in terms of their nitrogen contents ($mmolNm^{-3}$). For each of the state variables, NO_3 , NH_4 , P , Z , D and DOM , the prognostic equation reads as follows:

$$\frac{\partial C}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z}(K_T \frac{\partial C}{\partial z}) = F_C \quad (6.1)$$

where C is the tracer concentration.

For the surface layers (0-150m), the reaction terms read as follows:

$$F_{NO_3} = -\mu_p L_I L_{NO_3} P + \mu_n NH_4 \quad (6.2)$$

$$F_{NH_4} = -\mu_p L_I L_{NH_4} P + f_n(\gamma \mu_p L_I (L_{NO_3} + L_{NH_4}) P + \mu_z Z + \mu_d D) - \mu_n NH_4 + \mu_{dm} DOM \quad (6.3)$$

$$F_P = (1 - \gamma) \mu_p L_I (L_{NO_3} + L_{NH_4}) P - G_p - m_p P \quad (6.4)$$

$$F_Z = a_p G_p + a_d G_d - m_z Z^2 - \mu_z Z \quad (6.5)$$

$$F_D = (1 - a_p) G_p - a_d G_d + m_p P - \mu_d D - v_d \frac{\partial D}{\partial z} \quad (6.6)$$

$$F_{DOM} = (1 - f_n)(\gamma \mu_p L_I (L_{NO_3} + L_{NH_4}) P + \mu_z Z + \mu_d D) - \mu_{dm} DOM \quad (6.7)$$

The parameters are presented in Table 6.1.

The formulation of phytoplankton growth takes into account limitation by both nutrients and light. Nutrient limitation follows the Hurtt and Armstrong (1996) kinetics:

$$L_{NH_4} = \frac{NH_4}{k_n + NH_4} \quad (6.8)$$

Based on the hypothesis that the total limitation follows the same law, i.e.

$$L_{NO_3} + L_{NH_4} = \frac{NO_3 + NH_4}{(k_n + NO_3 + NH_4)} \quad (6.9)$$

we obtain,

$$L_{NO_3} = \frac{k_n NO_3}{(k_n + NH_4)(k_n + NO_3 + NH_4)} \quad (6.10)$$

Light limitation is expressed as follows:

$$L_I = 1 - \exp(-PAR/k_{par}) \quad (6.11)$$

The photosynthetic available radiation (PAR) is predicted from surface irradiance and phytoplankton pigment content according to a light absorption model. Two different wavelengths are considered and the absorption coefficients depend on the local phytoplankton concentrations:

$$PAR(z, P) = PAR_r(z, P) + PAR_g(z, P) \quad (6.12)$$

$$PAR_g(z, P) = PAR_g(z - \Delta z, P)(1 - \exp(-k_g \Delta z)) \quad (6.13)$$

$$PAR_r(z, P) = PAR_r(z - \Delta z, P)(1 - \exp(-k_r \Delta z)) \quad (6.14)$$

$$k_g = k_{go} + k_{gp} \left(\frac{12Pr_d}{r_{pg}r_c} \right)^{l_g} \quad (6.15)$$

$$k_r = k_{ro} + k_{rp} \left(\frac{12Pr_d}{r_{pg}r_c} \right)^{l_r} \quad (6.16)$$

where $k_{go} = 0.0232 \text{ m}^{-1}$ and $k_{ro} = 0.225 \text{ m}^{-1}$ are the water absorptions in green and red.

Grazing of phytoplankton and detritus is formulated following Fasham et al. (1990):

$$G_p = \frac{g_z r P^2 Z}{k_z(rP + (1-r)D) + rP^2 + (1-r)D^2}, \quad (6.17)$$

$$G_d = \frac{g_z(1-r)D^2 Z}{k_z(rP + (1-r)D) + rP^2 + (1-r)D^2}. \quad (6.18)$$

Other modeled biogeochemical interactions include phytoplankton mortality, phytoplankton exudation, zooplankton mortality (considered as large particles which are supposed to be instantaneously exported below the productive layer and remineralized in the water column), zooplankton exudation, fecal pellet production, detritus sedimentation, detritus breakdown, nitrification, and dissolved organic matter remineralization (Fig. 6.1).

Below a depth of 150 m (referred to as z_{bio} hereafter), remineralization processes are preponderant and the surface model does not apply. Instead, decay of phytoplankton, zooplankton and detritus in nutrients, and a vertical redistribution of zooplankton mortality according to Martin's profile (Martin et al., 1992) parameterize remineralization below the surface layer. This parameterization conserves total nitrogen.

$$F_{NH_4} = -\tau NH_4 \quad (6.19)$$

$$F_{NO_3} = \tau(NH_4 + P + Z + D + DOM) + \frac{\partial f}{\partial z} \quad (6.20)$$

$$F_P = -\tau P \quad (6.21)$$

$$F_Z = -\tau Z \quad (6.22)$$

$$F_D = -\tau D - v_d \frac{\partial D}{\partial z} \quad (6.23)$$

$$F_{DOM} = -\tau DOM \quad (6.24)$$

The remineralization of the export flux due to zooplankton mortality (large particles) is expressed as:

$$f(z_{bio}) = \int_0^{z_{bio}} m_z Z^2 dz, \quad (6.25)$$

$$f(z) = f(z_{bio})(z/z_{bio})^{h_r}. \quad (6.26)$$

Stating that no deposition occurs on the ocean floor, a further condition is added:

$$f(z_{bottom}) = 0. \quad (6.27)$$

6.2.2 The DYFAMED simulation set-up

The model set up is the same as in Mémery et al. (2002). The standard run consists of a spin-up period of 2 repeated years (1995), followed by two more years, 1995 and 1996. The end of year 1996 is the restart point for the working year 1997. A complete description of seasonal and interannual variability is documented in Mémery et al. (2002). The simulation is forced with ECMWF atmospheric data, which give the wind stresses and heat fluxes every 6 hours. Although the DYFAMED station can be considered, at a first approximation to behave like a 1D vertical system (Lévy et al., 1998a; Andersen and Prieur, 2000), deep convection in winter involves barotropic-baroclinic instabilities, which are three-dimensional processes (Madec et al., 1991; Lévy et al., 1998b). In winter, therefore these 3D processes must be parameterized. We use a crude parameterization consisting of restoring temperature, salinity and dissolved tracers (nitrate and DOM) towards homogeneous profiles in February when convection is at its peak and the mixed-layer is deepest. For example, the NO_3 reaction term, F_{NO_3} , becomes $F_{NO_3} + \alpha(N^r - NO_3)$. N^r is the restoring profile, and α equals $1/7 \text{ day}^{-1}$ in February and 0 otherwise. For

temperature and salinity, we use the February data as restoring profiles, since they are fairly homogeneous. For nitrate, the only available winter profile is not homogeneous. Therefore, we construct a homogeneous profile with the a priori averaged nitrate value below 200 m (6 mmol N.m^{-3}). This restoring profile can be seen as the nitrate initial condition or preconditioning, since it determines to a large extent the amount of nitrate made available to the system. For *DOM*, restoring is carried out towards zero, which implicitly assumes that all the semi-labile *DOM* is exported in winter through convection.

In this work, as well as in the previous studies carried out at DYFAMED (Lévy et al., 1998a; Mémery et al., 2002), advection is neglected. This might result in a crude approximation in summer during strong wind events. Indeed, Andersen and Prieur (2000) and Chifflet et al. (2001) suggest that Ekman pumping may be responsible for an upward advective shift of the nitracline and the deep chlorophyll maximum (DCM) of the order of 10 to 15 meters.

6.2.3 The DYFAMED data set

The data used in this study are monthly chlorophyll and nitrate profiles collected for the years 1995-1997 at the DYFAMED station, and surface fluorescence data measured by the Carioca buoy (Hood and Merlivat, 2002) moored at DYFAMED in 1997 (Fig. 6.2, 6.3, 6.4). We also make use of various annual estimates of new production, regenerated production, dissolved and particulate export (estimated from disparate measurements undertaken in the 90s), and of the zooplankton content estimated during a special cruise in May 1995 (Andersen and Prieur, 2000).

The evolution over time of the chlorophyll and nitrate profiles (Fig. 6.3, 6.4) reflects the seasonal variability at DYFAMED. Winter mixing brings nutrients to the surface, but the short residence time of algae in the euphotic layer, swept along by strong vertical motions, prevents the development of biomass. As the year progresses, the surface layer becomes more stable, thus allowing the winter nutrient enrichment to be utilized continuously. As a consequence, the algae bloom. From mid-May to November, the situation remains fairly stable with the upper layer nutrient content very low, and the system mainly oligotrophic and characterized by a deep chlorophyll maximum. It may be noticed

that the nitrate profiles show strong variability below 100m. This variability cannot be attributed to biological processes since these occur closer to the surface, and it is therefore most likely due to advection. It cannot therefore be captured by the model. During the oligotrophic period, the location of the nitracline and the DCM is fairly constant. This may be an indication of the absence of strong Ekman pumping and a crude justification for the neglect of vertical advection.

Estimates of total production (TP) vary considerably. Minas (1970), using in situ measurements, estimated the Northwestern Mediterranean TP to be about $78 \text{ gCm}^{-2}\text{y}^{-1}$, whereas Antoine et al. (1995) obtained a value of $157.5 \text{ gCm}^{-2}\text{y}^{-1}$ from satellite data and Marty and Chiaverini (2002) an average value of $156 \text{ gCm}^{-2}\text{y}^{-1}$ over the 1990s from C14 incubations (although they warn that this value should be considered as in the upper range). Estimates of new production (NP) range from $20 \text{ gCm}^{-2}\text{y}^{-1}$ (Bethoux, 1989) to $42 \text{ gCm}^{-2}\text{y}^{-1}$ (Marty and Chiaverini, 2002). This latter value is based on nitrate uptake (NU) and does not therefore correct for nitrification, which explains the difference with the Bethoux (1989) estimate. With regard to export fluxes, the *DOC* export flux has been estimated by Copin-Montegut and Avril (1993), based on 1991 DOC data, to be around $14.8 \text{ gCm}^{-2}\text{y}^{-1}$, while sediment trap data from 1987 (Miquel et al., 1993) predict a particulate export at 200m of $4 \text{ gCm}^{-2}\text{y}^{-1}$.

The data assimilation period is restricted to 1997, when all three types of synoptic data are available. For coherence with the model set-up strategy, the non-homogeneous February nitrate profile is not accounted for in the assimilation. Data from years 1995 and 1996 are kept for validation.

In order to compare model results and data, calculated phytoplankton concentrations are converted to mgChlam^{-3} using a constant (in time, space and during parameter optimization) Redfield ratio C:N of $r_d = 6.625$, and a C:Chl ratio (r_c in Table 6.1) that will be optimized. A linear relationship is assumed between fluorescence and chlorophyll concentrations. The proportionality coefficient was chosen so that surface fluorescence data and monthly chlorophyll profiles were coherent with one another.

6.2.4 An initial simulation

A first run is carried out using the a priori parameter set and without any data assimilation (Figs. 3, 4, 5). The seasonal variability is well reproduced, but the spring bloom appears to be too strong and the transition towards oligotrophy poorly represented. On the other hand, and because the parameters have been tuned for this purpose (Lévy et al., 1998a), this “first guess” run predicts reasonably good fluxes: $110.6 \text{ gCm}^{-2}\text{y}^{-1}$ for TP, $22.5 \text{ gCm}^{-2}\text{y}^{-1}$ for NP, $13.2 \text{ gCm}^{-2}\text{y}^{-1}$ for DOC export and $5.2 \text{ gCm}^{-2}\text{y}^{-1}$ for particulate export.

6.3 Method

6.3.1 Control variables and cost function

The variational data assimilation method mainly consists in finding an optimal control minimizing a cost function which measures the distance, in a weighted least-squares sense, between the model’s solution and the observations. In the current literature, authors usually consider the biological parameters as being the control variables. It is therefore assumed that the discrepancy between the model and the observations can be attributed mainly to these poorly known quantities. However, implicitly assuming that the model equations are perfect except for the unknown parameters may be a problem (Evensen et al., 1998). Firstly, minimization may lead to an optimal parameter set attempting to correct for errors other than those related to the particular parameterizations. Secondly, the tuning of the parameters may not be sufficient to fit real observations and it may be necessary to introduce more degrees of freedom in the model equations.

In our case, the winter restoring terms present in the equations are clearly crude parameterizations made to take into account 3D processes which are not explicitly resolved. The restoring value of 6 mmolN.m^{-3} for NO_3 was chosen empirically on the basis of the DYFAMED data. The NO_3 restoring term is particularly important in the biological dynamics (Mémery et al., 2002). It can be regarded as an initial condition from which we want to start at the end of winter. It can also be regarded as a particular form of a

model error term, and we may need to control it.

The 1D formulation of the model as well as a first real data assimilation experiment (Case 1, section 6.4.4) also lead us to consider a C:Chl ratio r_c that varies with depth. We have therefore considered different cases in this study. Case 1 is classical: the cost function depends on the biological parameters, which are undistributed, or constant in time and space. In Case 2, the cost function depends on all the previous parameters but r_c can vary with depth. It also depends on the NO_3 restoring profile, N^r , which is also space-distributed.

As shown in Table 6.1, the biological parameters have very different orders of magnitude. To avoid any numerical difficulties which might arise from this during the minimization, we adimensionalize the parameter vector K , dividing each parameter K_i by its first guess value K_i^0 , $k_i = K_i/K_i^0$. In the same way, we consider the dimensionless NO_3 restoring profile, $n^r = (n_i^r)_{i=1,\dots,nz} = N^r/6$, where nz is the number of space discretization points. Such a non-dimensionalization procedure can be regarded as a preconditioning for minimization.

To sum up, in Case 1, the control variable is $x = k$ of size p , where p is the number of parameters, and k is dimensionless. In Case 2, the control variable is $x = (\hat{k}, r_c, n^r)$ of size $(p - 1) + nz + nz$, where $\hat{k}$ represents the parameter vector without r_c and n^r . In both cases, the first guess value for x is $x^0 = (1, \dots, 1)$.

The model-data misfit part, J_0 , of the cost function can be written as the sum of three terms:

$$J_0(x) = J_{sc}(x) + J_{pc}(x) + J_{pn}(x).$$

J_{sc} is related to the *ncs* surface chlorophyll observations, dcs .

$$J_{sc}(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{ncs} w_{cs}(\phi_{cs}(x)_i - dcs_i)^2.$$

J_{pc} is related to the *nep* chlorophyll profile observations, dcp (*mcp* measurement points on the vertical).

$$J_{pc}(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{nep} \sum_{l=1}^{mcp} w_{cp}(\phi_{cp}(x)_{i,l} - dcp_{i,l})^2.$$

J_{pn} is related to the nnp NO_3 profile observations, dnp (mnp measurement points on the vertical).

$$J_{pn}(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{nnp} \sum_{l=1}^{mnp} w_{np} (\phi_{np}(x)_{i,l} - dnp_{i,l})^2.$$

More simply we have,

$$J_0(x) = \frac{1}{2} \langle W(\phi(x) - d), (\phi(x) - d) \rangle_{Nobs}.$$

$\langle \cdot, \cdot \rangle_{Nobs}$ denotes the euclidian scalar product in $\mathbb{R}^{Nobs}$, with $Nobs = ncs + ncp \times mcp + nnp \times mnp$. ϕ is the direct operator which, to an admissible control variable x , associates the model equivalents to the data. d is the data. W is a weighting diagonal matrix. The weights w_{cs} , w_{cp} and w_{np} are composed of the square of the assumed a priori observation errors and of a scaling factor accounting for the number of each type of observation. Therefore, we have $w_{cs} = \frac{1}{ncs \cdot \sigma_{cs}^2}$, $w_{cp} = \frac{1}{(ncp \cdot mcp) \sigma_{cp}^2}$, and $w_{np} = \frac{1}{(nnp \cdot mnp) \sigma_{np}^2}$.

We also add penalty terms to J_0 . The first term,

$$J_p(k) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^p w_i (k_i - k_i^0)^2,$$

accounts for the a priori parameter values and their standard deviations, $\sigma_i = \frac{1}{\sqrt{w_i}}$, given in Table 6.2. This term enables the minimization to avoid biologically absurd optimal parameter values.

The second term, which only applies in Case 2, is a Tikhonov regularization term (Tikhonov and Arsenin, 1977).

$$J_r(n^r) = \frac{1}{2} w \sum_{i=1}^{nz} \left(\frac{\partial^2 n^r}{\partial z^2} \right)_i^2$$

This is added to avoid instability phenomena inherent in such inverse problems. Its role is to smooth the space-distributed control n^r . The choice of the weight w is not straightforward, as a compromise has to be found between numerical stability and the quality of the minimization of J_0 . In practice, w was chosen so that the data misfit part of the cost and its regularization part are balanced. The same regularization term is added for the distributed parameter r_c .

6.3.2 Automatic differentiation

To minimize the cost function J , we applied the quasi-Newton algorithm implemented in the *n1qn3* Fortran subroutine of Gilbert and Lemaréchal (1989). The computation of the gradient of J with respect to control variables is required at each step of the minimization. This gradient results in one integration of the adjoint model. The tangent and adjoint codes were obtained using the automatic differentiation program *Odyssée* (Faure, 1997; Griewank, 2000), which is an efficient tool for obtaining adjoint codes since it enables the automatic production of adjoint instructions. However, codes produced by automatic differentiation do not usually use computer memory in a very efficient way. Saving the direct model trajectory is the major problem. A differentiation program has to follow systematic methods to provide the evaluation trajectory. Thus *Odyssée* systematically uses a local calculation and storage technique for the trajectory. Automatically differentiating a 3D model and using the adjoint code directly seems impossible. This problem partially disappears using a 1D model, so that the work to be done on the automatically produced adjoint routines is more reasonable. In this study, we used an integration period of one year, the choice being made to cover a whole annual cycle of biological activity when all three types of data were available. Moreover, it involves affordable computer memory resources and acceptable calculation times. An adjoint run is about 10 times more expensive than a direct run in terms of memory requirements and CPU time.

6.3.3 Sensitivity analysis method

As was highlighted in Fennel et al. (2001), a sensitivity analysis should be an integral part of any attempt to optimize the parameters of a biological model. Fennel et al. identified different inconsistencies in the formulation of their inverse problem such as parameters which could not be determined independently.

The a priori approach consists in using a sensitivity analysis based on twin experiments, that is in the case where the global minimum of the cost function is known, to help determine the most sensitive and consequently the most important parameters to

optimize in order to solve a numerically well-posed inverse problem.

Let us consider that the cost function only depends on parameters k and that no penalty term is added:

$$J(k) = \frac{1}{2} < W(\phi(k) - d), (\phi(k) - d) >_{Nobs} . \quad (6.28)$$

A small perturbation h on parameter set k induces a perturbation on ϕ ,

$$\phi(k + h) - \phi(k) \approx \phi'(k)h.$$

$\phi'(k)$ is the sensitivity matrix, of size $Nobs \times p$. It can easily be calculated by p integrations of the tangent linear model, perturbing the parameters one after another. The i^{th} integration leads to the i^{th} column of matrix $\phi'(k)$ that represents the influence of parameter k_i on the model's output used to calculate the cost function. Then, if we expand J in its Taylor series about the optimal solution k^0 and ignore terms of a higher order than two, we obtain the following, as the first derivative vanishes:

$$\begin{aligned} J(k^0 + h) &\approx J(k^0) + \frac{1}{2} < \phi'(k^0)^T W \phi'(k^0) h, h >_p \\ &+ \frac{1}{2} < W \phi''(k^0)(h, h), (\phi(k^0) - d) >_{Nobs} . \end{aligned}$$

In the context of twin experiments, where data are generated by a model run using k^0 as the parameter set, the formula reduces to

$$\begin{aligned} J(k^0 + h) &\approx \frac{1}{2} < \phi'(k^0)^T W \phi'(k^0) h, h >_p \\ &\approx \frac{1}{2} h^T H h, \end{aligned}$$

where $H = \phi'(k^0)^T W \phi'(k^0)$ is the Hessian of the cost function in this particular case. H is easily calculated once $\phi'(k^0)$ has been obtained. It may be noted that H does not depend on the quality of the data but only on the intrinsic properties of the model structure, or in other words on the way in which the parameters are mutually related in the conceptual representation of the biological phenomena. The Hessian matrix provides a good approximation of the covariance matrix for the model parameters (Thacker, 1989). Its diagonal element h_{ii} gives the sensitivity of the cost function to change in parameter k_i , whereas its off-diagonal elements indicate the degree to which pairs of model parameters

are correlated. In fact, all the needed information is contained in the eigen values and vectors of H . The condition number, $\frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}}$ gives an indication of the degree of singularity in the problem. Small eigen values correspond to large uncertainties in the identification of the parameters that make a significant contribution in the related eigen vectors. Such an analysis provides a systematic method for determining parameters which may be difficult to identify.

6.4 Results

6.4.1 Description of the experiments

This short subsection briefly presents all the different numerical experiments which follow in the text. Let us first remember that in Case 1 the cost function is assumed to depend on constant parameters, whereas in Case 2 it is assumed to depend on constant parameters and on two parameters (n^r and r_c) allowing vertical variability. We first conduct a sensitivity analysis based on a twin experiment identical to Case 1 (section 6.4.2). A synthetic data set is created with the model, by running the reference 1997 simulation with the parameter set k^0 . These synthetic data have the same spatio-temporal distribution as the real 1997 data. We then conduct twin experiments for both Case 1 (section 6.4.3) and Case 2 (section 6.4.3). Once these validation steps have been successfully completed, we come to the assimilation of real (i.e. observed) data. Section 6.4.4 deals with Case 1 optimization. Case 2 is divided into Case 2a in section 6.4.4 and Case 2b in section 6.4.4. As explained in the introduction, in Case 2b zooplankton data is added to the cost function, and in Case 2c annual flux estimates are also assimilated.

6.4.2 Twin experiment sensitivity analysis

We apply the sensitivity analysis methodology described in section 6.3.3 to the twin experiments to ensure that we are not trying to solve an ill-posed inverse problem. Within this framework, the cost function is defined without any penalty term (Eq. 6.28). The Hessian, H , is calculated at the optimal point k^0 , and then its eigen values and vectors.

If the cost function is assumed to depend on the 25 parameters in Table 6.1, the condition number of its Hessian is 1.149×10^{17} , indicating that the inverse problem is extremely ill-conditioned. The 3 smallest eigen values, $\lambda_{25} = 8.804 \times 10^{-15}$, $\lambda_{24} = 5.405 \times 10^{-5}$ and $\lambda_{23} = 2.061 \times 10^{-4}$ and their corresponding eigen vectors, v_{25} , v_{24} and v_{23} are plotted in Fig. 6.5. v_{25} has contributions mainly for k_{rp} , k_{gp} and r_{pg} . As the associated eigen value is almost 0, these parameters cannot be determined with the data under consideration. All of them belong to the optical model formulation (Eqs. 6.12, 6.13, 6.14, 6.15, 6.16). Eigen value $\lambda_{24} = 5.405 \times 10^{-5}$ is still quite small, and the important contributions in v_{24} again correspond to the optical parameters. These parameters enter the model only in the combinations $k_{gp}(\frac{12r_d}{r_{pg}r_c})^{l_g}$ and $k_{rp}(\frac{12r_d}{r_{pg}r_c})^{l_r}$ (Eqs. 6.15 and 6.16). It is therefore not surprising that these parameters appear to be dependent on one another. As a considerable improvement is needed in the condition number of H , we will not try to estimate the 5 optical parameters in all of the following experiments. Their values are kept fixed at the initial guesses. Only the C:Chl ratio r_c will therefore play a role in the calculation of light limitation L_I during the optimization procedure.

Under this new assumption, the condition number of the Hessian matrix falls to 7.489×10^6 which is much more acceptable and comparable to the condition number values presented in Fennel et al. (2001). The worse resolutions are observed for h_r , γ and m_z . The coefficient for Martin's remineralization profile, h_r , only concerns the remineralization model (below 150 m), and is kept constant in the following sections.

Finally, the chosen formulation includes 19 parameters. The condition number of the Hessian is 9.108×10^5 . Eliminating 2 or 3 additionnal parameters, such as γ , m_z or k_n , which are the least sensitive (Fig. 6.6), does not considerably improve the conditioning of the problem and may, on the contrary, deprive the model of useful degrees of freedom.

6.4.3 Twin experiment data assimilation

Case 1

The second and final validation step before assimilation of observed data is to conduct twin experiments. Synthetic data are produced by the model using the first guess param-

ter vector k^0 containing the 19 selected parameters. In order to fully test the possibility of recovering these parameters from the synthetic data, no penalty term is added. The variances assumed are as follows: $\sigma_{cs} = 0.3 \text{ } mgChla.m^{-3}$, $\sigma_{cp} = 0.1 \text{ } mgChla.m^{-3}$, and $\sigma_{np} = 0.4 \text{ } mmolN.m^{-3}$. This provides a good balance between the three terms of J_0 . Different first guesses for the parameter vector were obtained by perturbing k^0 within the a priori error deviation ranges given in Table 6.2. All the corresponding optimizations converged to the minimum of the cost function, $J(k^0) = 0$.

The results of this experiment are shown in Fig. 6.7. Table 6.2 presents the first guess parameter set $k^0 + \delta k$. The convergence criterion ($\|\nabla J\| \leq \epsilon$, where ϵ is a small value) is satisfied after 129 iterations. A cost function value of 7.35e-11 is obtained, indicating that it has reached its global minimum. All the 19 parameters have been recovered. In the first 20 iterations, the cost function decreases rapidly then enters a long period of more gradual decline. This corresponds to the rapid recovery of the most sensitive parameters, followed by a difficult search for the optimal values of the less sensitive parameters (k_n , γ , and m_z).

Case 2

We are now concerned with the optimization of 18 space- and time-constant parameters and 2 space-dependent parameters, r_c (the C:Chl ratio) and n^r (the NO_3 winter preconditioning). This greatly increases the number of control variables from 19 to 178. However, the problem still remains over-determined as the control dimension does not exceed the number of data. Nevertheless, this does not mean that it is possible to recover the model controls given the set of data we have for year 1997 at the DYFAMED station. Some controls may not have a real influence everywhere on the simulation results. Moreover, the method has to be able to distinguish between wrong biological parameter values, wrong C:Chl ratios and wrong NO_3 preconditioning to explain the discrepancy between model and data. To check this, a twin experiment is conducted in which no penalty term is added to the cost function relating to the constant parameters. A Tikhonov regularization term is used for the two distributed controls r_c and n^r .

$$J(x) = J_0(x) + J_r(n^r) + J_r(r_c)$$

Exact equivalents of year 1997 DYFAMED data were created using the reference a priori k^0 vector for the 18 parameters, the distributed r_c ratio and the distributed n^r profile plotted on Fig. 6.8. First guess control variables consist of a profile n^r homogeneous on the vertical with value $n^r = 1$ and the parameter set $k^0 + \delta k$ of Table 6.2, except for r_c which is also chosen to be homogeneous in the vertical. The first guess for r_c is 1. Below 200 meters, this value is the same as that used to generate the data. This choice was made because below 200 meters r_c can take any value without influencing the simulation or, therefore, the cost function value. The twin experiment proved to be successful, with all biological parameters, as well as r_c , completely recovered and the restoring profile, n^r , also very well reproduced. The r_c and n^r used to generate the data, first guess and recovered values, are plotted on Fig. 6.8. It takes 543 iterations for the optimization to converge. This increase in the number of iterations required compared with Case 1 is due to the increase in the size of the control vector.

6.4.4 Assimilation experiments using real (observed) data

Estimation of constant parameters - Case 1

A real data assimilation experiment is performed using nitrate and chlorophyll data from the DYFAMED station. The first guess is chosen as k^0 , which corresponds to the parameter values commonly used in this area (Lévy et al., 1998a, Mémerly et al., 2002), and the data used are those described in section 2.2. A penalty term is added to the cost function of the twin experiments:

$$J(k) = J_0(k) + J_p(k) \quad (6.29)$$

This regularizes the inverse problem and the optimization converges in 33 iterations. The optimal parameter set, k^{opt} , is given in Table 6.3, and the overall quality of the optimization is quantified by the normalized cost related to each type of data in Table 6.4.

Correlation coefficients have also been computed to measure the shift between the

model and the data. For surface chlorophyll, a time correlation coefficient is defined by:

$$r_t = \frac{\sum_{i=1}^{ncs} (\phi_{cs}(k^{opt})_i - \overline{\phi_{cs}^{opt}})(dcs_i - \overline{dcs})}{(\sum_{i=1}^{ncs} (\phi_{cs}(k^{opt})_i - \overline{\phi_{cs}^{opt}})^2 \sum_{i=1}^{ncs} (dcs_i - \overline{dcs})^2)^{1/2}} \quad (6.30)$$

where $\overline{\phi_{cs}^{opt}}$ and $\overline{dcs}$ denote the mean values. In the same way, space correlation coefficients are computed for each profile.

The largest change in the parameter set is obtained for r_c , the C:Chl ratio, which is used to convert phytoplankton into chlorophyll units. While the first guess for r_c is $55 \text{ mgC.mgChl}^{-1}$, the optimal value is $135 \text{ mgC.mgChl}^{-1}$. Other important changes concern parameters related to detritus, and thus with the export. Detritus breakdown rate, μ_d , decreases from $1.04\text{e-}6 \text{ s}^{-1}$ to $4.524\text{e-}7 \text{ s}^{-1}$, while detritus sedimentation speed, v_d , increases from 5 m.s^{-1} to 8.7 m.s^{-1} . These changes in parameters have the effect of decreasing the chlorophyll concentrations and of increasing the export.

Globally, the assimilation resulted in a considerable improvement in the model/data match, compared to the first guess experiment (Table 6.4). Bloom intensity is divided by a factor of three, in agreement with the observations (Fig. 6.2), and the time correlation coefficient increases from 0.87 to 0.92, indicating that the starting date and bloom duration are simulated more accurately. Chlorophyll profiles during the bloom (dates 02/23, 03/02 and 03/21 on Fig. 6.3) also show a better fit with the data. These improvements are mainly associated with the change in the C:Chl ratio. As with chlorophyll, nitrate is also better simulated and this is particularly apparent above the nitracline (Fig. 6.4). Nitrate concentrations at the surface were overestimated, and are now reduced. The reduction in nitrate concentrations is essentially achieved through the change in parameters μ_d and v_d , and the associated increase in export. It may be noticed that the cost with respect to nitrate is globally higher than that relative to chlorophyll (Table 6.4). This is due to the poor fit between simulated and observed nitrate concentrations below the nitracline, where advective events seem to be important.

Despite the improvements noted above, however, certain problems remain. First, there is no improvement in summer, during the oligotrophic regime. The model has difficulties in reproducing the subsurface chlorophyll maximum. On 09/01, the space correlation coefficient falls from 0.865 to 0.061, indicating a substantial shift between observations

and model results in terms of subsurface maximum depth. Second, the exported flux is too large by almost one order of magnitude (Table 6.5).

To address these shortcomings, the model is modified as follows. In order to better represent the chlorophyll subsurface maxima, the C:Chl ratio is allowed to vary on the vertical. Indeed, this ratio is known to be highly dependent on the photosynthetic available radiation (PAR) (Geider, 1997). In the Mediterranean Sea, it can vary from 30 $mgC/mgChl$ to 200 $mgC/mgChl$. Moreover, earlier optimization studies have already emphasized the need for a variable C:Chl ratio (Hurtt and Armstrong, 1996, 1999; Schartau et al., 2001; Spitz et al., 2001). The amount of NO_3 present in the model is very dependent on the winter preconditioning profile (Mémery et al., 2002). In order to improve the match between observed and simulated NO_3 profiles without excessively increasing the export, a space-distributed NO_3 winter preconditioning profile is introduced in the control vector.

Estimation of parameters allowing vertical variability - Case 2a

Using the space-dependent r_c and n^r described above as control variables improves all three parts of the cost J_0 (Table 6.4). Compared to Case 1, the summer chlorophyll profiles are better represented and improvements are also noted during other periods of the year (Fig. 6.3). Nitrate profiles are also in better agreement with the observations (Fig. 6.4).

Figure 6.9 shows the retrieved r_c and n^r profiles. The r_c ratio is high (up to 143 $mgC/mgChl$) near the surface, and rapidly decreases with depth (45 $mgC/mgChl$ at about 40m). Due to the regularization term, $J_r(r_c)$ in the cost function, r_c remains close to its first guess value (55 $mgC/mgChl$) below 50m. This decrease in r_c with depth is realistic and physically related to the interdependence of r_c and PAR . Obviously, allowing r_c to vary only with depth is an oversimplification, since it does not account for the seasonal variations of PAR . However, this experiment clearly shows that the approximation already greatly improves the results in relation to the constant r_c case.

As for the optimal nitrate preconditioning profile, this is approximately homogeneous in the first 200 meters of the water column (Fig. 6.9), consistent with the fact that the

winter mixed layer is almost homogeneous down to this depth. It contains less nitrate than the first guess (4.9 compared to 6 $mmolN/m^3$), which again indicates that there was too much nitrate in the first guess experiment.

The optimal parameters are given in Table 6.3. They do not differ greatly from those of Case 1, but it should be noted that the parameters which were thought to vary because of the presence of too much NO_3 at the surface (μ_d , v_d) have optimal values closer to their first guess value than was the case in Case 1. In other words, the optimal values of these parameters do not suffer any more from the excess of nitrate, and we may expect them to be more representative of reality.

Regarding the fluxes, DOC export and NP are barely modified by the assimilation, and keep their acceptable first guess value. However, the detritus flux is still too high, and TP too low (Table 6.5). TP has fallen to 59.6 $gCm^{-2}y^{-1}$, which is well below the data range. The detritus flux is more than three times too high (12.6 $gCm^{-2}y^{-1}$) and consists only of the sedimentation of slow sinking particles. Export through sedimentation of fast sinking particles (ZF), which is parametrized through the zooplankton mortality term, has almost vanished, whereas it represented one third of total particulate export in the first guess experiment.

The question arises as to why the model chooses to favor sedimentation of slow sinking particles over zooplankton mortality fluxes. Globally, in Cases 1 and 2a, zooplankton concentrations, which are not constrained by any data, are much weaker than in our first guess run (Table 6.6). This explains the fall in ZF, which behaves like Z^2 . Sensitivity studies show that the measurements which cause the zooplankton concentrations to decrease are the surface values of the chlorophyll profiles corresponding to the dates 03/21 and 04/15 (the two squares corresponding to days 80 and 105 in Fig. 6.2). These values impose a slow decrease in surface chlorophyll after the bloom maximum. This decrease is much more rapid in the first guess run. The data assimilation forces the model to simulate relatively high surface chlorophyll values until the month of April. This is achieved through a strong decrease in grazing, mainly resulting from the decrease in zooplankton concentrations. In Case 1, the model runs right between the two above-mentioned post-bloom data (Fig. 6.2) and $ZF \approx 10^{-3} gC.m^{-2}.y^{-1}$, whereas in Case 2a the model runs

below these measurements and $ZF \approx 10^{-2} gC.m^{-2}.y^{-1}$. Given the strong influence of these two post-bloom measurements on the assimilation results, it may intuitively be thought that the sampling frequency at this period must play an important role. However, this cannot be easily tested and generalized in a rigorous manner. Twin experiments could be performed but this was decided against as one of the objectives of the study was to use the available DYFAMED data set.

Adding zooplankton information- Case 2b

The above observations all point to the need to constrain zooplankton concentrations in some way. Although no synoptic zooplankton data is available, the zooplankton content was estimated to be $20 mmolN.m^{-2}$ in May 1995 (Andersen and Prieur, 2000). Simulated zooplankton concentrations in May in the first guess experiment are consistent with this value, but they are too low in Case 1 and Case 2a (Table 6.6). We therefore added this zooplankton data to the cost function and conducted a Case 2 type optimization, referred to below as Case 2b.

As expected, zooplankton concentrations in May ($17.9 mmolN.m^{-2}$) are now more acceptable. The fit between observed and simulated chlorophyll and nitrate data is not altered much, except during the post-bloom period (day 04/15, Fig. 6.3). Indeed, as discussed above, the increase in zooplankton results in an increase in the grazing pressure on phytoplankton, particularly during the post-bloom. However, the results are still much better than in Case 1 (Tab. 6.4).

The estimated C:Chl ratio, r_c , and NO_3 restoring profile, n^r , are very similar to those of Case 2a (Fig. 6.9). Observation of the other parameters shown in Table 6.3 also reveals that modifications are only slight compared with Case 2a. The most significant changes concern the detritus sedimentation speed, which decreases from 7.8 to $5.8 md^{-1}$, the assimilated fraction of phytoplankton, which increases from 63% to 72%, and the nominal preference for phytoplankton, which decreases from 0.67 to 0.63. Zooplankton grazing rate increases by only 2%, while the zooplankton loss rates decrease by less than 1%. This behavior emphasizes the strong non-linearities in the zooplankton equation.

Improvement in the zooplankton content benefits the main fluxes (Table 6.5). The

sedimentation of slow sinking particles (SF) decreases in response to the decrease in v_d compared to Cases 1 and 2a. This leads to a more realistic value for total particulate export (EF), which now includes a weak contribution from fast sinking particles (ZF). TP has increased to an intermediate value between that of Case 2a and the first guess experiment.

6.5 Discussion

6.5.1 Validation against independent data

To validate the methodology, the model is run for years 1995 and 1996 with the optimal parameter set and the C:Chl profile obtained after assimilation of year 1997 data (Case 2b).

The inter-annual variability in winter conditions is taken into account by not using the NO_3 preconditioning profile estimated for 1997, to simulate years 1995 and 1996. Instead, for each of the years 1995 and 1996 we set the parameters to their values observed in Case 2b and only estimate the NO_3 preconditioning profile. This results in a significant improvement of the model fit to chlorophyll profiles for years 1995 and 1996 (Table 6.7, Figs. 6.10 and 6.11). Surface and subsurface maxima in spring and summer are globally better simulated, although several profiles in summer - fall 1995 (09/14/95, 10/05/95, 11/15/95) are not really improved. NO_3 profiles are also closer to the data (Table 6.7, Figs. 6.12 and 6.13). Compared to year 1997 (Table 6.4), the agreement between data and model is globally better in 1996, but not as good in 1995. This might be linked to the ocean dynamics. Atmospheric forcing is characterized by much lower high frequency variability in 1996 than in the other years, which means that the evolution of the tracers over time is smoother (Mémery et al., 2002): vertical movements due to Ekman pumping or other dynamical processes, which are not considered in these simulations, could be weaker in 1996. The quantitative improvement of the simulation results in 1995 and 1996 after assimilation of the year 1997 can be considered a validation of the methodology.

6.5.2 Stock data and flux values - Case 2c

The series of numerical experiments conducted in this work shows that the principal biogeochemical fluxes can be significantly modified by the assimilation of stock data. In addition, the experiments illustrate the impossibility of recovering correct fluxes from the assimilation of NO_3 and chlorophyll data alone (Case 2a). When a single zooplankton measurement is added (Case 2b), flux prediction is improved. However, this improvement is not sufficient, and leads to a slight deterioration of the fit to chlorophyll data.

One possible reason for the lack of success in retrieving the fluxes could be that the model structure prohibits solutions consistent with both the stock data and the order of magnitude of the fluxes. To test this hypothesis, a final experiment was conducted in which all types of data were assimilated: stock measurements as well as the data on the four fluxes presented in Table 6.5, taken from Marty and Chiaverini (2002). This experiment, referred to as Case 2c, proved to be successful. Surface chlorophyll, chlorophyll and NO_3 profile optimization results are comparable to those obtained earlier (Table 6.4), while the zooplankton content in May is $22.7 \text{ mmolN.m}^{-2}$, which is the best we obtain with the data (Table 6.6). More importantly, the predicted fluxes are now correct (Table 6.5). The hypothesis concerning the role of the model structure in the lack of success in retrieving the fluxes can therefore be rejected.

The estimated C:Chl ratio and NO_3 preconditioning profile are very similar to those found in Case 2a and Case 2b. With regard to the other parameters, presented in Table 6.3, the most striking changes compared with the previous cases appear for k_n , γ , μ_d and v_d . The half-saturation constant, k_n , and the exudation fraction, γ , were found to be among the less sensitive parameters in section 6.4.2 and, not surprisingly, were not greatly modified by the data assimilation in Case 1, Case 2a and Case 2b. This was no longer true in Case 2c where production flux data seem to constrain these parameters. Sedimentation speed, v_d , for which the optimal value was always found to be higher than the first guess value, is now lower, an observation that can be related to the decrease in the export flux imposed by the data. Furthermore, detritus feeds the NH_4 and DOM compartments at a higher rate μ_d .

Unlike for chlorophyll data, the relative cost of the NO_3 profiles is higher in Case 2c

than in Case 2b (Table 6.4). Unlike in the first guess, the flux that had to be modified in Case 2c was particle export production (Table 6.5). To achieve this new balance, the inversion degraded the fit of the NO_3 profiles. Although a bias due to dynamical processes cannot be entirely discounted, this finding could result from an underestimation of particle export production, obtained from shallow sediment traps (Buesseler, 1991).

6.6 Conclusions

The present study has demonstrated the feasibility of using the adjoint data assimilation method to constrain the biological part of a one-dimensional coupled physical-biogeochemical model with observed data from the DYFAMED station in the Northwestern Mediterranean Sea.

A preliminary sensitivity analysis showed that not all parameters can be estimated and enabled the inverse problem to be correctly formulated. The correctness of the formulation was demonstrated using identical twin experiments.

Real surface chlorophyll data as well as chlorophyll and NO_3 profile measurements were assimilated for the year 1997. The assimilation method required choosing a judicious first guess. Different assimilation exercises then led to a number of conclusions.

As with earlier modeling studies (Geider, 1997), it was quantitatively shown that it is impossible to simulate correct surface chlorophyll bloom intensity together with a correct summer subsurface chlorophyll maximum in an oligotrophic regime using a constant C:Chl ratio. We used a C:Chl ratio allowing vertical variability to improve data assimilation results.

It was also quantitatively demonstrated that in our 1D DYFAMED context, the optimization of winter NO_3 conditions is of prime importance to data assimilation efficiency. The winter restoring profile governs the quantity of nitrate present in the model and needs to be controlled. Some estimated parameter values appeared to be dependent on this quantity. Moreover, NO_3 concentrations below the surface layer are largely imposed by this restoring profile.

Finally, a good improvement in the chlorophyll model-data fit was obtained. As for

NO_3 data, the improvement was less significant below a depth of 100 meters where data are affected by 3D physics not taken into account in the model. The method was then validated using an independent data set for years 1995 and 1996, and a new simulation conducted. This calculated acceptable fluxes and also predicted chlorophyll and NO_3 profiles more correctly than the first guess simulation.

The last but perhaps most important point concerns the simulation of production and export fluxes. It was shown that, using a simple NNPZD-DOM model, it is not possible to recover correct fluxes simply through the assimilation of NO_3 and chlorophyll stock data alone, although the model was able to simulate correct stocks together with correct fluxes. This failure was due to the collapse of zooplankton in the model. Non-linearities, particularly in the zooplankton conservation equation, are certainly responsible for this behavior: minor changes in the parameters can considerably modify system evolution. Nevertheless, the addition of zooplankton data to the cost function did not prove to be entirely successful or enable the correct fluxes to be recovered. As stocks result from a balance between input and output fluxes, it may be that information associated with stocks alone cannot constrain the different fluxes independently. This conclusion implies that it may be impossible to estimate the biogeochemical fluxes accurately if a first guess of these fluxes is not taken into account and assimilated. Further studies, using other models and different data coverage, are needed to determine whether this statement can be generalized.

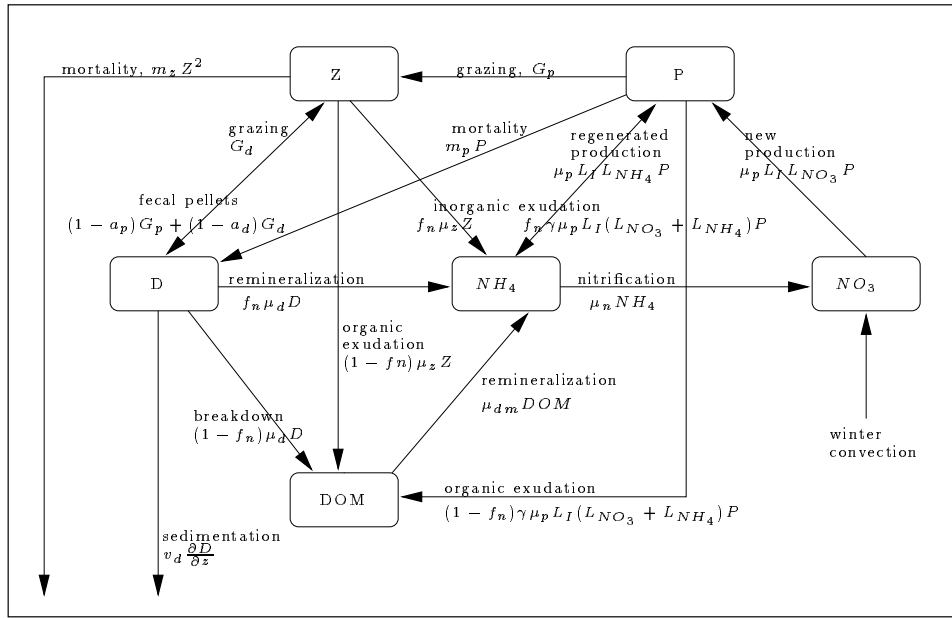


FIG. 6.1 – Schematic representation of the compartments and processes of the NNPZD-DOM surface layer model.

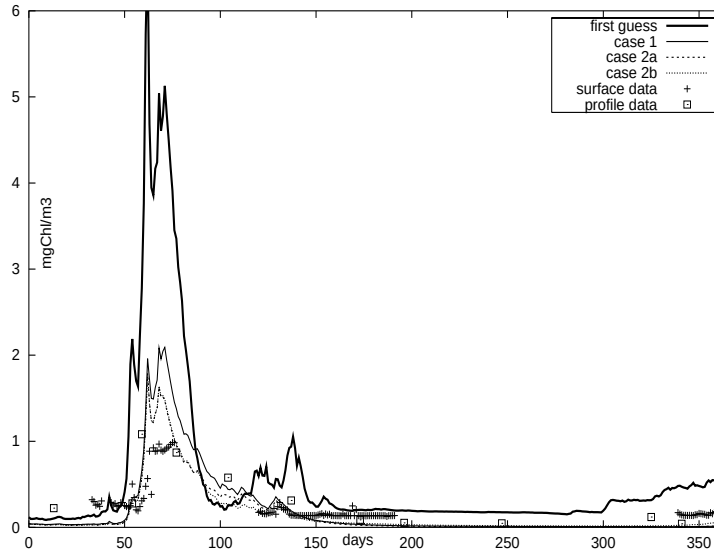


FIG. 6.2 – Surface chlorophyll (mgChl m^{-3}) for year 1997. Crosses are the surface observations. Squares are the surface measurements taken from the chlorophyll profile set (Fig. 6.3). The first guess, Case 1, Case 2a and Case 2b runs are represented according to the legend above.

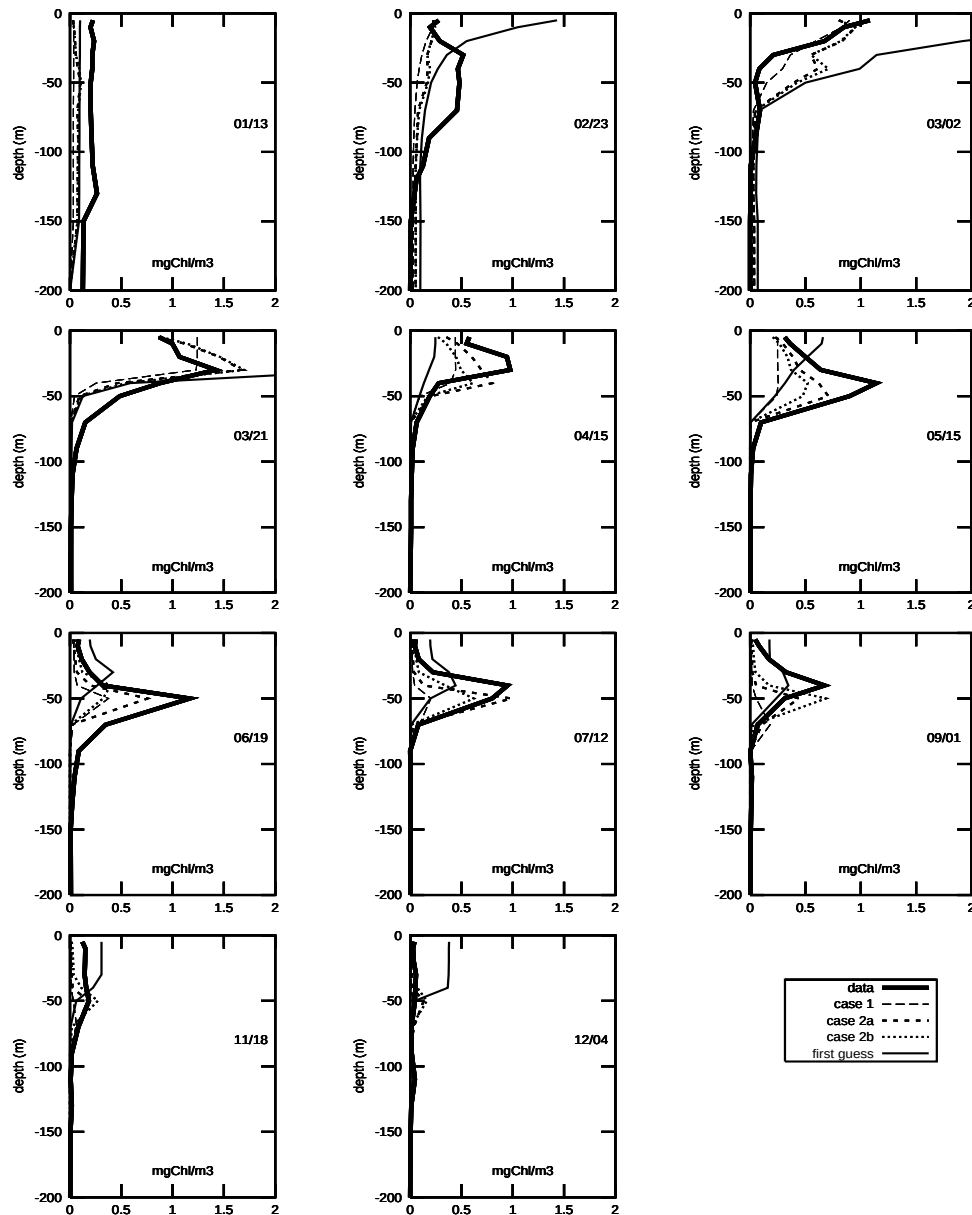


FIG. 6.3 – Chlorophyll profiles (mgChl m^{-3}) for year 1997. Depth in meters. The observed profiles as well as the first guess, Case 1, Case 2a and Case 2b profiles are represented according to the legend above.

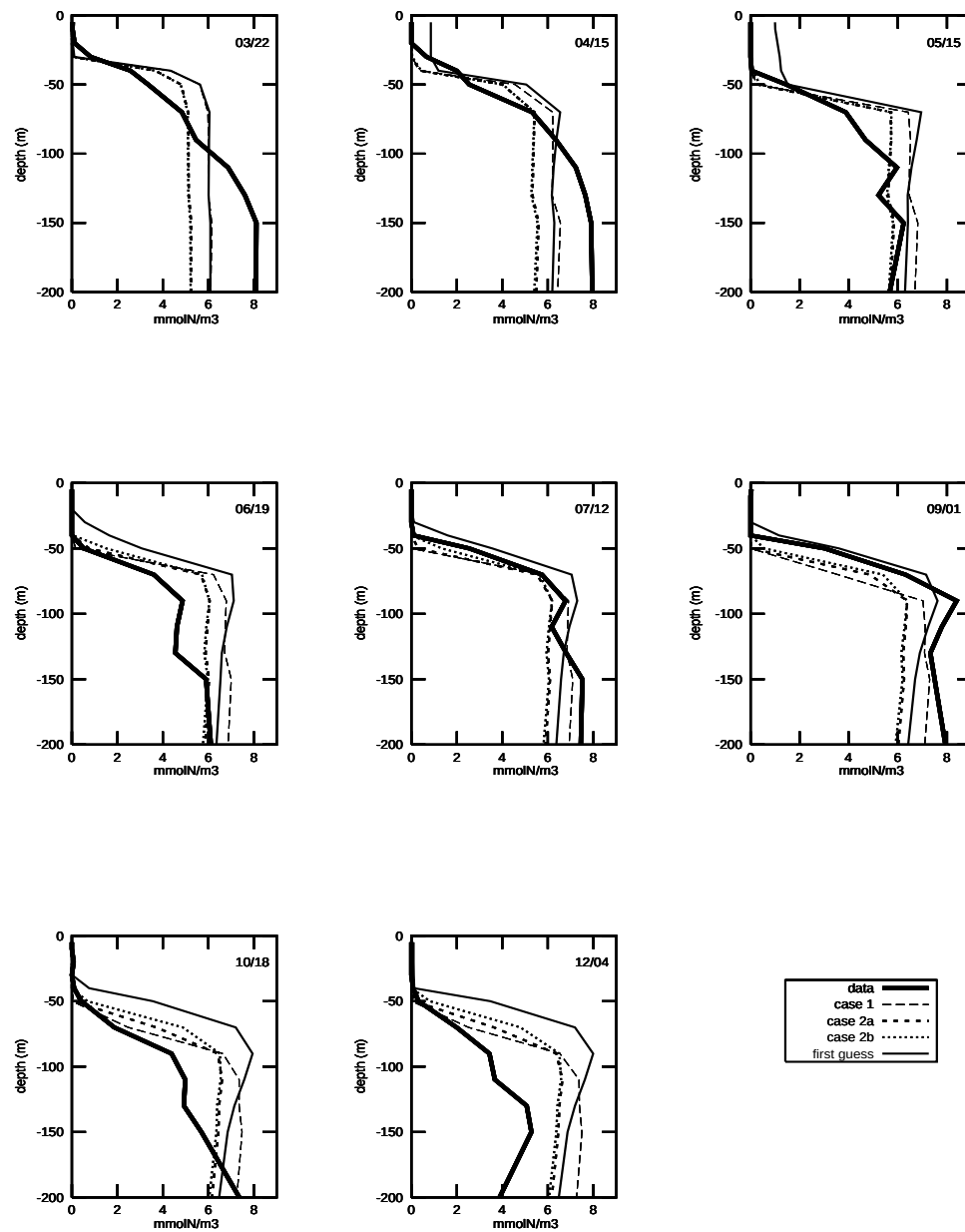


FIG. 6.4 – NO_3 profiles (mmolNm^{-3}) for year 1997. Depth in meters. The observed profiles as well as the first guess, Case 1, Case 2a and Case 2b profiles are represented according to the legend above.

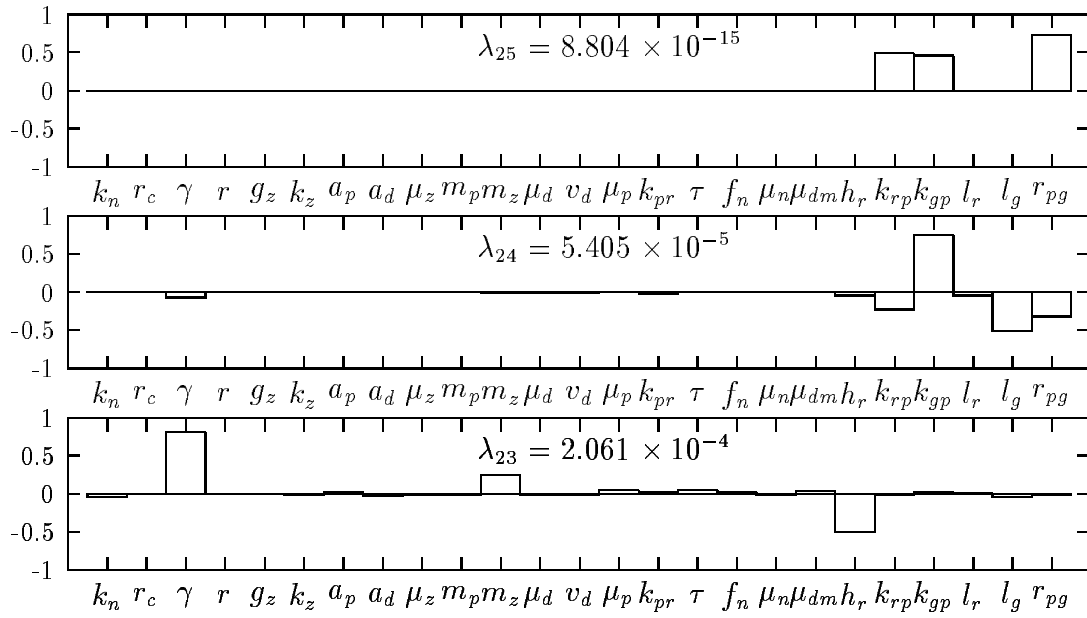


FIG. 6.5 – Three smallest eigen values and corresponding eigen vectors of the Hessian for the 25-parameter optimization case

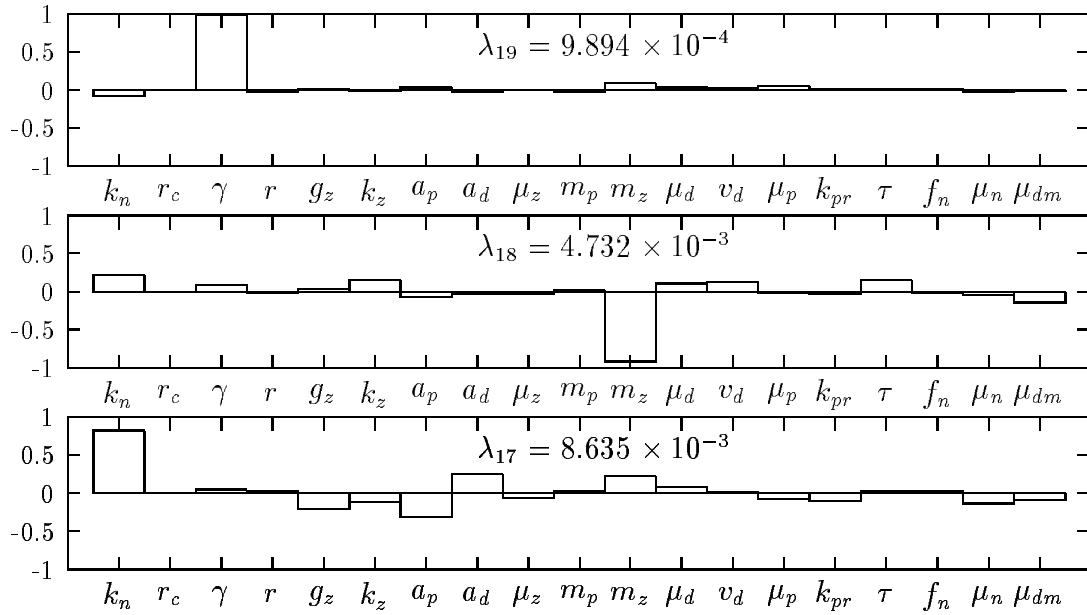


FIG. 6.6 – Three smallest eigen values and corresponding eigen vectors of the Hessian for the 19-parameter optimization case

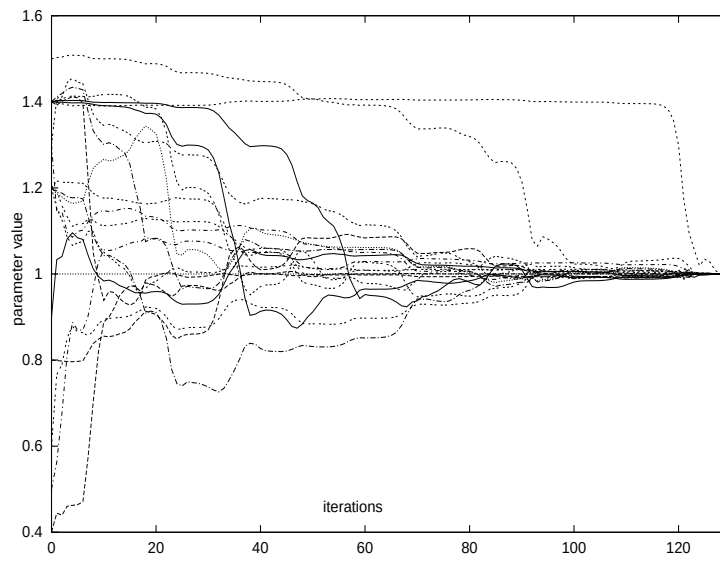


FIG. 6.7 – *Convergence of the 19 parameter set from $k^0 + \delta k$ to k^0 .*

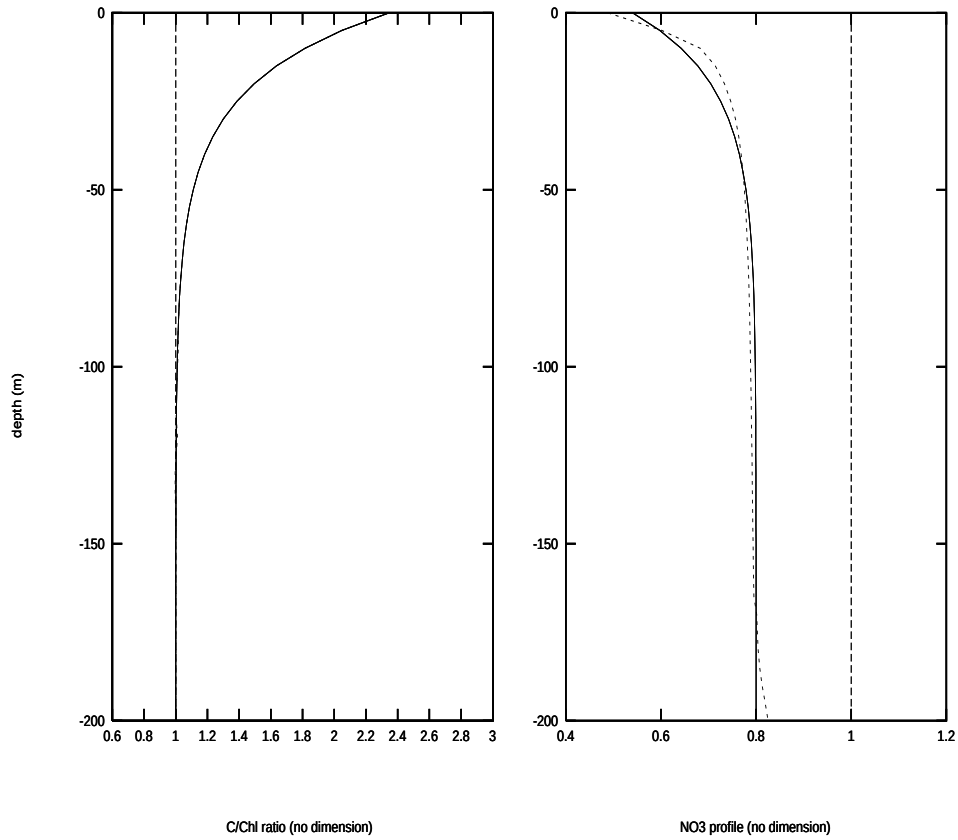


FIG. 6.8 – Left: r_c , first guess (long dashes), reference (continuous line) and optimal (short dashes superimposed on the reference). Right: n^r , first guess (long dashes), reference (continuous line) and optimal (short dashes). The reference values, $R_c = 55 \text{ mgC.mgChla}^{-1}$ and $N^r = 6 \text{ mmolN.m}^{-3}$, are used for adimensionalization.

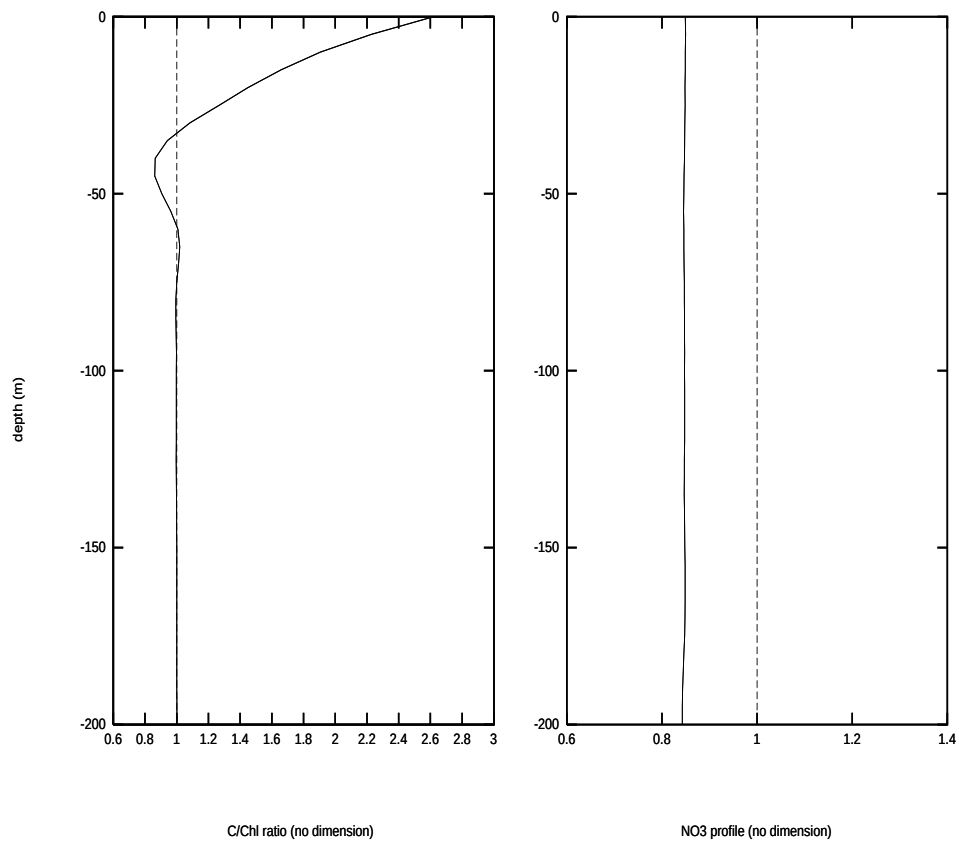


FIG. 6.9 – Left: first guess (dashed line) and optimal (continuous line) r_c . Right: first guess (dashed line) and optimal (continuous line) n^r . The reference values, $R_c = 55 \text{ mgC.mgChla}^{-1}$ and $N^r = 6 \text{ mmolN.m}^{-3}$, are used for adimensionalization.

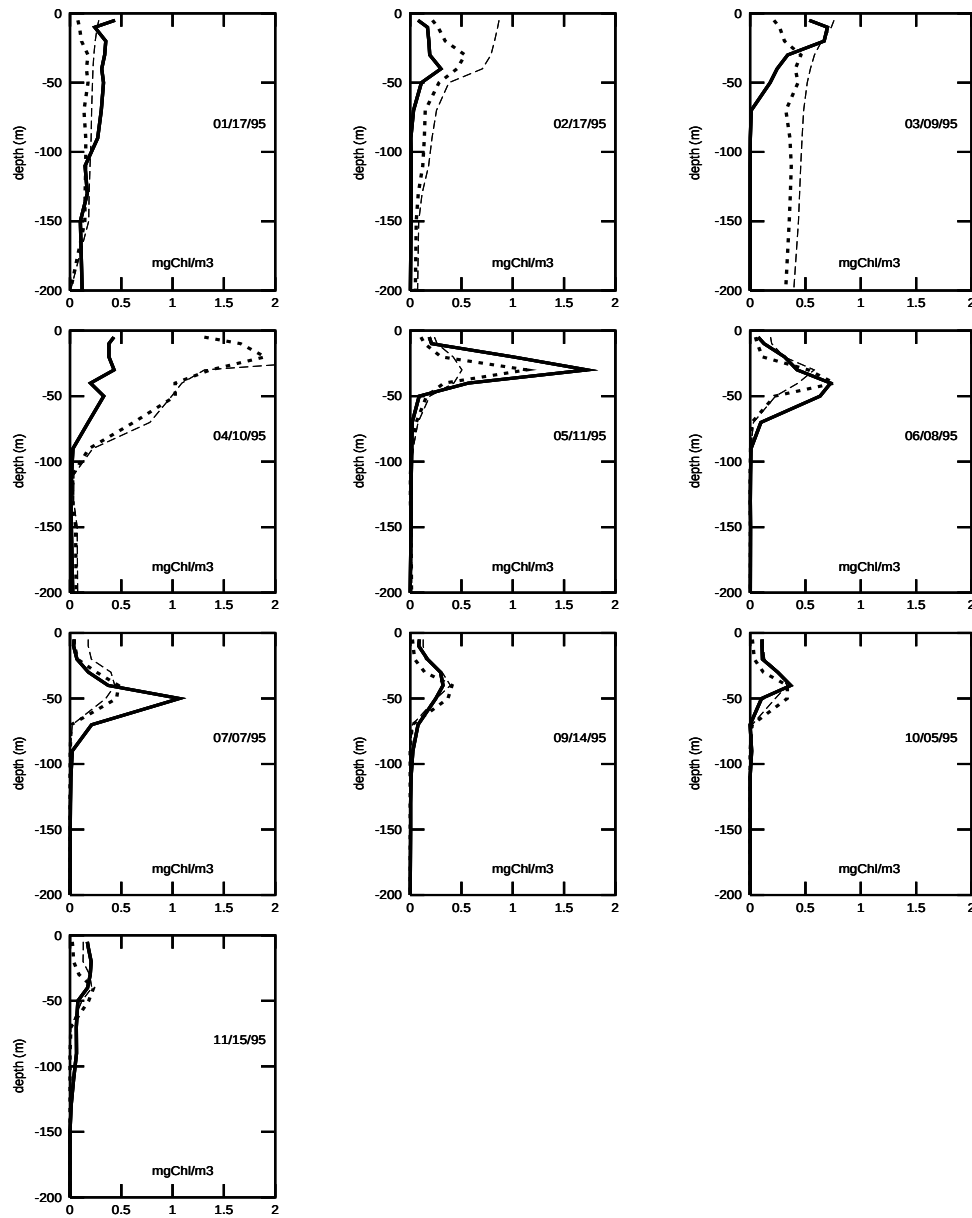


FIG. 6.10 – Chlorophyll profiles (mgChl m^{-3}) for year 1995. Depth in meters. The continuous line is the observation, the thin dashed line is the first guess run and the bold dashed line is the Case 2b optimal parameter set run.

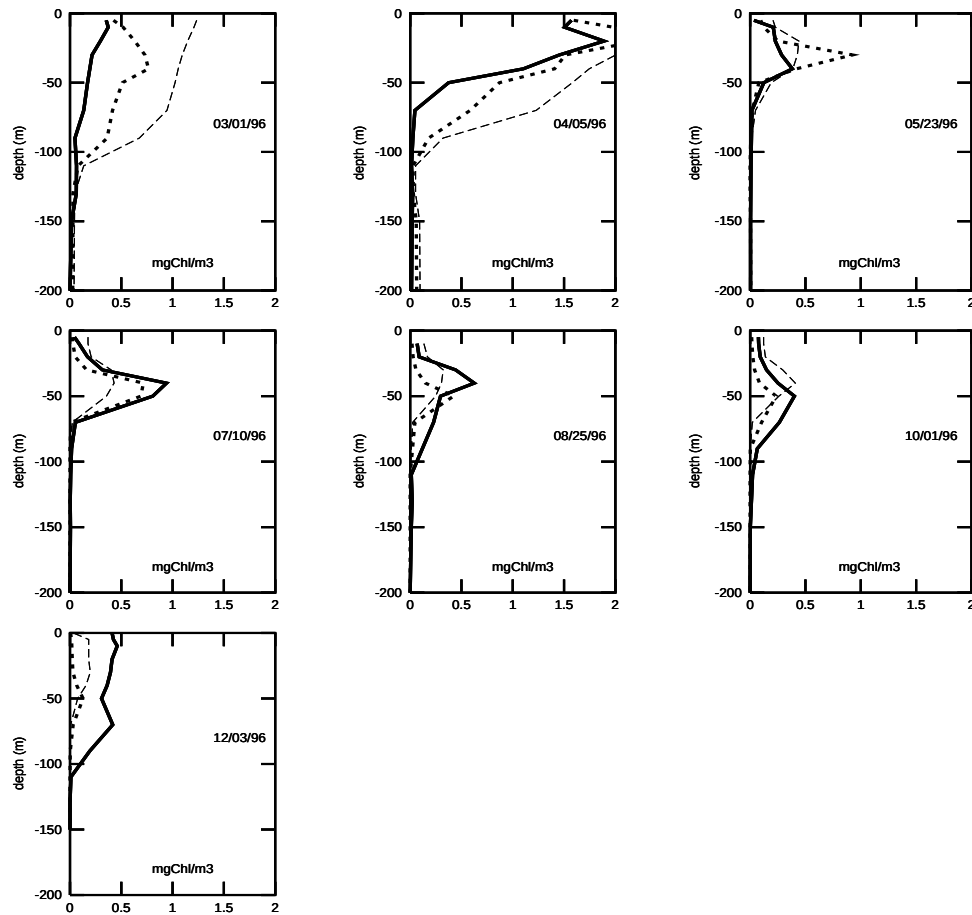


FIG. 6.11 – Chlorophyll profiles (mgChl m^{-3}) for year 1996. Depth in meters. The continuous line is the observation, the thin dashed line is the first guess run and the bold dashed line is the Case 2b optimal parameter set run.

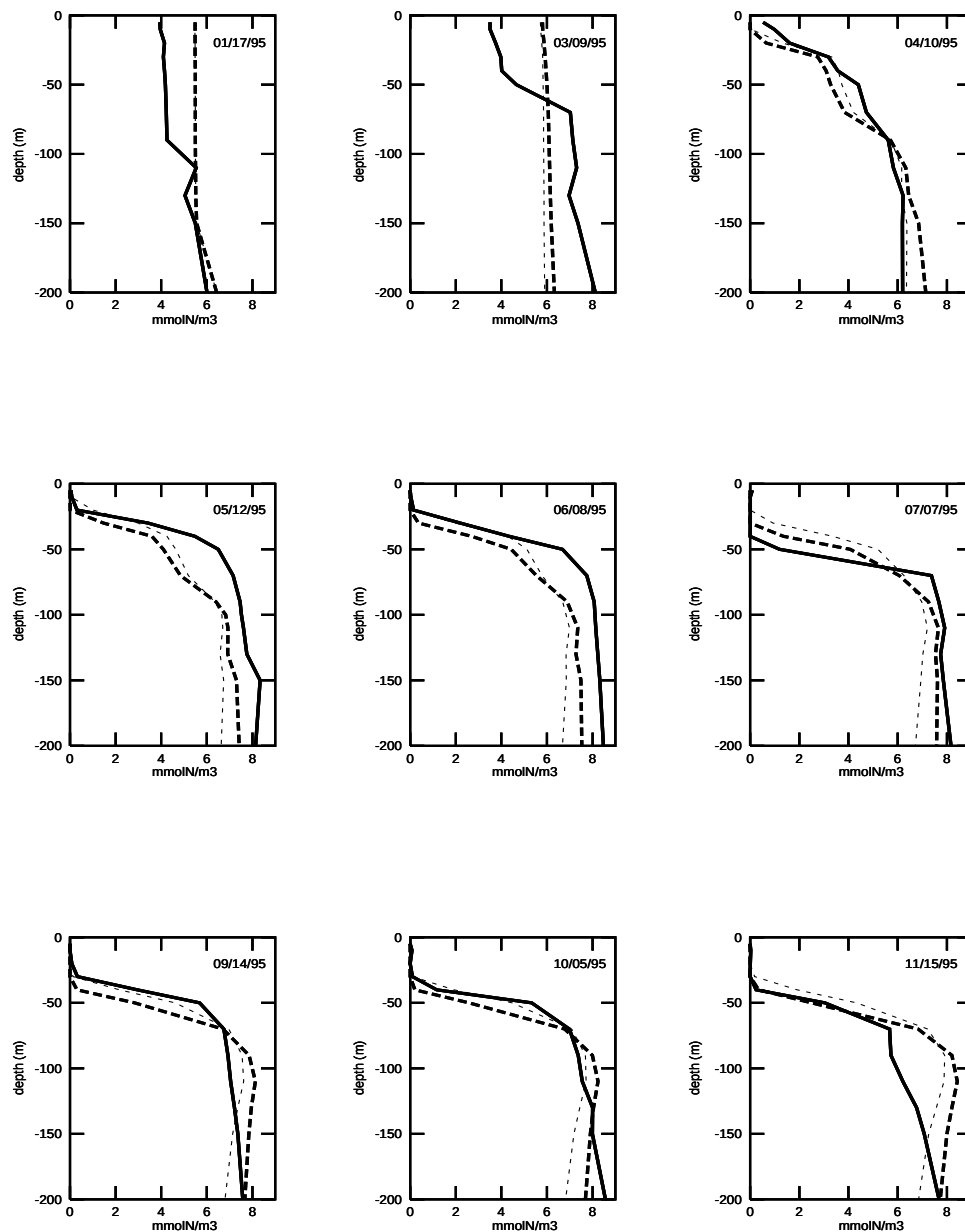


FIG. 6.12 – NO_3 profiles (mmolNm^{-3}) for year 1995. Depth in meters. The continuous line is the observation, the thin dashed line is the first guess run and the bold dashed line is the Case 2b optimal parameter set run.

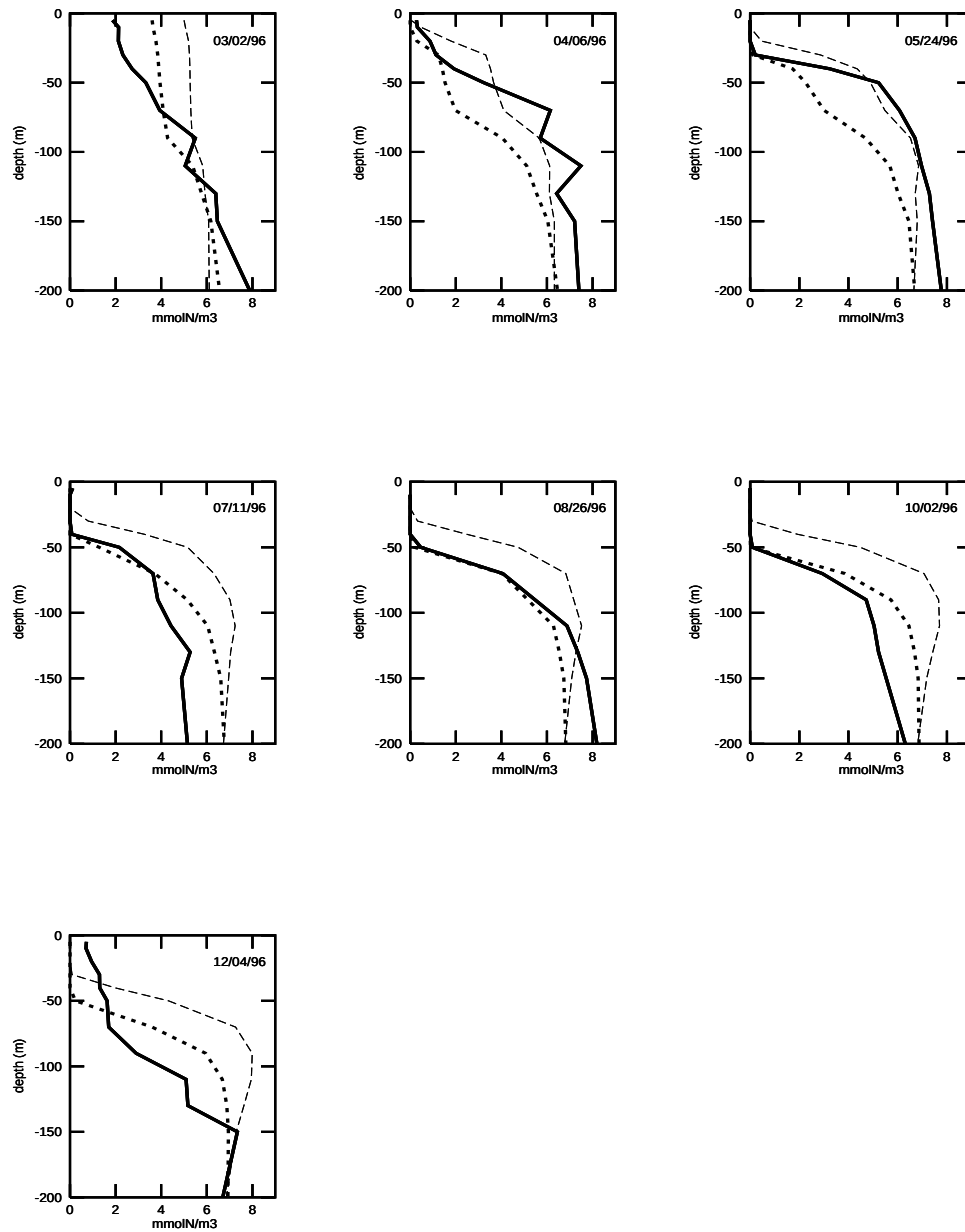


FIG. 6.13 – NO_3 profiles (mmolNm^{-3}) for year 1996. Depth in meters. The continuous line is the observation, the thin dashed line is the first guess run and the bold dashed line is the Case 2b optimal parameter set run.

parameter	name	value	unit
half-saturation const. for nutrients	k_n	0.01	$mmol\,m^{-3}$
carbon:chlorophyll ratio	r_c	55	$mgC.mgChla^{-1}$
phyto. exudation fraction	γ	0.05	
zoo. nominal preference for phyto food	r	0.7	
max. specific zoo. grazing rate	g_z	8.68E-6	s^{-1}
half-saturation const. for grazing	k_z	1	$mmol\,N.m^{-3}$
non-assimilated phyto. by zoo.	a_p	0.3	
non-assimilated detritus by zoo.	a_d	0.5	
zoo. specific exudation rate	μ_z	1.16E-6	s^{-1}
phyto. mortality rate	m_p	9.027E-7	s^{-1}
zoo. mortality rate	m_z	1.0E-7	$mmol\,N.m^{-3}.s^{-1}$
detritus breakdown rate	μ_d	1.04E-6	s^{-1}
detritus sedimentation speed	v_d	5.8E-5	$m.s^{-1}$
max. phyto. growth rate	μ_p	2.31E-5	s^{-1}
light half-saturation const.	k_{pr}	33.33	$W.m^{-2}$
decay rate below the euphotic layer	τ	5.80E-5	s^{-1}
ratio of inorganic exudation	f_n	0.8	
nitrification rate	μ_n	3.81E-7	s^{-1}
slow remineral. rate of DOM to NH_4	μ_{dm}	6.43E-8	s^{-1}
coeff. for Martin's remineralization profile	h_r	-0.858	
pigment absorption in red	k_{rp}	0.037	$m^{-1}.(mgChl.m^{-3})^{-l_r}$
pigment absorption in green	k_{gp}	0.074	$m^{-1}.(mgChl.m^{-3})^{-l_g}$
Power law for absorption in red	l_r	0.629	
Power law for absorption in green	l_g	0.674	
contribution of Chl to absorbing pigments	r_{pg}	0.7	

TAB. 6.1 – *Parameter values*

parameter	apriori error σ	k^0	first guess error δk
k_n	1	1	0.4
r_c	2	1	0.4
γ	1	1	0.4
r	0.5	1	0.2
g_z	0.3	1	0.3
k_z	0.9	1	-0.4
a_p	1	1	0.3
a_d	1	1	0.4
μ_z	0.25	1	-0.1
m_p	0.4	1	-0.6
m_z	1	1	0.5
μ_d	0.5	1	0.2
v_d	1	1	0.4
μ_p	0.5	1	-0.5
k_{pr}	0.5	1	0.2
τ	0.5	1	0.2
f_n	0.2	1	0.2
μ_n	1	1	0.4
μ_{dm}	1	1	-0.2

TAB. 6.2 – *A priori parameter errors σ , reference parameter set k^0 (adimensionalized with Table 6.1 values) and perturbed parameter set $k^0 + \delta k$*

parameter	first guess k^0	optimal set k^{opt} Case 1	optimal set k^{opt} Case 2a	optimal set k^{opt} Case 2b	optimal set k^{opt} Case 2c
k_n	1	0.964	0.992	0.992	0.746
r_c	1	2.452			
γ	1	1.086	1.073	1.065	1.299
r	1	0.950	0.962	0.896	0.897
g_z	1	0.920	0.944	0.965	0.937
k_z	1	1.285	1.245	1.172	1.291
a_p	1	1.209	1.235	0.915	1.110
a_d	1	1.029	1.022	1.015	1.117
μ_z	1	1.039	1.028	1.001	1.049
m_p	1	1.010	1.113	1.080	1.092
m_z	1	1.001	0.993	0.992	1.058
μ_d	1	0.435	0.597	0.557	1.149
v_d	1	1.732	1.556	1.160	0.709
μ_p	1	0.727	0.806	0.795	0.880
k_{pr}	1	1.081	1.050	1.040	1.009
τ	1	0.900	1.035	1.036	0.961
f_n	1	0.951	0.971	0.970	0.936
μ_n	1	0.880	0.967	0.960	0.793
μ_{dm}	1	0.895	0.893	0.860	0.757

TAB. 6.3 – First guess and optimal adimensionalized parameters in Case 1, 2a, 2b and 2c optimizations

data type	first guess cost	optimal cost Case 1	optimal cost Case 2a	optimal cost Case 2b	optimal cost Case 2c
surface chloro- phyll	1	0.059	0.029	0.027	0.027
chlorophyll profile	1	0.170	0.100	0.134	0.126
NO_3 profile	1	0.626	0.525	0.554	0.717

TAB. 6.4 – *Optimization results. Costs are normalized.*

flux	data	first guess	Case 1	Case 2a	Case 2b	Case 2c
NU	42 ± 15	43.8	42.1	39.5	36.7	43.9
NP		22.5	31.6	26.8	23.1	24.2
TP	156 ± 30	110.6	59.5	59.6	68.4	115.4
SF		3.6	17.8	12.6	8.3	1.6
ZF		1.6	10^{-3}	10^{-2}	0.3	0.3
PF	2 ± 0.8	5.2	17.8	12.6	8.6	1.9
DOMF	15 ± 5	13.2	13.1	13.1	13.2	13.7

TAB. 6.5 – *Flux data (from Marty and Chiaverini, 2002) and calculated fluxes at 200m. Values are given in $gC.m^{-2}.y^{-1}$. NU stands for NO_3 uptake, NP for new production (NU corrected from nitrification), TP for total production, PF for total particulate export flux (SF, the sedimentation flux + ZF, the zooplankton mortality flux) and DOMF for DOM export flux.*

data	first guess	Case 1	Case 2a	Case 2b	Case 2c
20 ± 10	33.7	1.9	3.1	17.9	22.7

TAB. 6.6 – Zooplankton content data and calculated values at 200m, for May 1997, in $mmolNm^{-2}$.

data type	year	first guess cost	validation run cost
chlorophyll profile	1995	1	0.278
chlorophyll profile	1996	1	0.092
NO_3 profile	1995	1	0.646
NO_3 profile	1996	1	0.320

TAB. 6.7 – Comparison of the first guess run and the validation run with independent chlorophyll and NO_3 profile data for year 1995 and 1996. Costs are normalized.

Chapitre 7

Conclusion générale et perspectives

Les travaux rapportés dans cette thèse s'inscrivent dans un cadre de recherche plus large, celui de l'étude du cycle océanique du carbone. L'axe suivi est celui de l'utilisation d'un modèle numérique et de l'assimilation variationnelle de données. Le travail s'est entièrement appuyé sur deux modèles couplés océan-biogéochimie développés au LODYC (Laboratoire d'Océanographie DYnamique et de Climatologie) et modélisant les processus biogéochimiques de la couche océanique de surface intervenant dans ce cycle. On peut distinguer trois parties différentes et complémentaires dans ce mémoire.

Dans la première, une étude mathématique de la partie biologique des modèles a été effectuée. Aussi complexes soient-elles (nombre de variables d'état, non-linéarités, discontinuités en la variable d'espace), les équations constituant ces modèles rentrent dans le cadre très général des équations paraboliques semi-linéaires. Nous avons montré, par deux méthodes différentes (par une méthode de point fixe et par l'utilisation de la théorie des semi-groupes) comment il était possible de s'assurer de l'existence et de l'unicité des solutions de tels modèles. Nous avons également pu montrer que ces solutions sont forcément positives, ce qui, d'un point de vue biologique, était attendu.

La deuxième partie du travail est purement numérique. On a tout d'abord mis en oeuvre une modification du schéma d'intégration aux différences finies, permettant de supprimer les contraintes imposées sur le pas de temps pour assurer la positivité numérique des solutions. Cette modification consiste en une discrétisation explicite-implicite des termes de réactions. Néanmoins le travail numérique le plus important a été l'écriture

des codes dérivés tangent et adjoint du modèle NNPZD-DOM. Pour ce faire, le logiciel de différentiation automatique ODYSSEÉ, développé à l'INRIA, a été utilisé. Dans notre cadre de travail, 1D, cet outil s'est avéré relativement efficace, même si les codes fournis restent très lourds, et demandent encore une quantité certaine de travail pour pouvoir être utilisés.

Ces outils informatiques étant validés, nous avons abordé la partie assimilation de données. Nous avons défini une fonction coût mesurant l'écart quadratique entre les variables mesurées à la station DYFAMED et les prévisions de ces variables en fonction des paramètres du modèle qui constituent les variables de contrôle. Une étude préliminaire de sensibilité nous a permis de réduire le nombre de paramètres à estimer afin d'obtenir un problème numériquement bien posé. Nous avons ainsi montré qu'avec les observations dont on dispose à la station DYFAMED certains paramètres ne peuvent pas être estimés. L'algorithme d'assimilation de données a alors été validé par des expériences jumelles dans lesquelles les observations étaient artificielles et non bruitées. Le problème de l'assimilation de données réelles est significativement différent de celui de l'assimilation de données synthétiques. En raison des erreurs de collecte, des erreurs de mesures et des erreurs du modèle, il est impossible de trouver un vecteur de paramètres qui explique exactement les données. Néanmoins, cet exercice s'est avéré être riche d'enseignements aussi bien au niveau du modèle utilisé qu'au niveau du type de données utilisées. Nous avons montré numériquement que l'utilisation d'un rapport carbone chlorophylle variable était nécessaire pour pouvoir représenter à la fois le bloom de chlorophylle en surface et le maximum de subsurface en régime oligotrophe. Nous avons utilisé un rapport carbone chlorophylle variant avec la profondeur. Il semble important, pour des études ultérieures, d'utiliser une paramétrisation de ce rapport tenant compte de sa dépendance aux variations en temps et en espace de l'intensité lumineuse (Geider [48]). Nous avons également montré combien les conditions hivernales en nitrate sont importantes et peuvent influencer les résultats de l'assimilation de données. Enfin, une conclusion importante du dernier chapitre est que l'assimilation de données de type stocks dans le modèle NNPZD-DOM ne permet pas directement d'obtenir une bonne représentation des flux de production et d'export. Les valeurs des concentrations calculées par le modèle peuvent être proches des

données alors que les valeurs des flux ne le sont pas. Il est alors légitime de se demander si la seule assimilation de données type couleur de l'océan (c'est-à-dire la chlorophylle en surface) permettra dans l'avenir de contraindre de manière satisfaisante les modèles couplés océan-biogéochimie 3D. Ce n'est absolument pas certain et nous avons montré dans notre cas l'importance de disposer de données en zooplancton.

Si la Méditerranée et la station DYFAMED, qui nous ont servi de cadre de travail, partagent avec d'autres régions tempérées certaines caractéristiques (couches de mélange profondes, succession de différents régimes de production) il semble néanmoins nécessaire, afin de tester plus largement la validité d'un modèle comme celui que nous avons utilisé et peut être de le faire évoluer, d'utiliser d'autres jeux de données comme par exemple ceux des stations BATS (Bermuda Atlantic Time-series Study) ou KERFIX (Océan Austral). Cela permettrait également d'en savoir davantage sur la variabilité géographique de certains paramètres. Cette étape est certainement importante et pourrait permettre d'aborder des études 3D plus sereinement. A ce titre, les modèles dérivés 1D qui ont été développés dans ce travail peuvent servir de base à la mise en place de leurs homologues 3D. Ce type de travail est déjà bien avancé et V. Echevin (communication personnelle, LODYC, 2002) a entamé un travail d'assimilation de données par estimation de paramètres dans un cadre 3D académique. Mentionnons également que le code 1D qui a été obtenu dans ce travail est modulaire et l'on peut tout à fait envisager la différenciation locale d'une nouvelle sous-routine correspondant par exemple à une nouvelle paramétrisation biologique que l'on voudrait tester.

Enfin, si la complexité des équations rend toute étude analytique difficile, il semble néanmoins intéressant d'essayer d'en savoir un peu plus sur les différents comportements que peuvent adopter ces systèmes dynamiques biologiques en fonction des valeurs de différents paramètres, ou de l'utilisation de telle ou telle paramétrisation. Sur ce sujet on peut noter les travaux de Edwards [35] dans lesquels sont étudiés, entre autres, les valeurs et la stabilité de points d'équilibres ou de cycles limites pour un modèle, NPZ, 0D. Ce type d'étude pourrait par exemple permettre de comprendre plus précisément quels sont les facteurs qui font, comme dans le dernier chapitre, que la quantité de zooplancton présente dans le modèle a tendance à être sous-estimée si des données de types flux ne

sont pas assimilées.

Bibliographie

- [1] N.U. Ahmed. *Semi-group theory with application to system and control*. Pitman research notes in mathematics series, 1991.
- [2] V. Andersen and L. Prieur. One-month study in the open NW Mediterranean Sea (DYNAPROC experiment, May 1995): overview of the hydrobiologeochemical structures and effects of wind events. *Deep-Sea Research I*, 47:397–422, 2000.
- [3] D. Antoine, A. Morel, and J.-M. André. Algal pigment distribution and primary production in the eastern mediterranean sea as derived from coastal zone color scanner observations. *Journal of Geophysical Research*, 100:16193–16209, 1995.
- [4] R.A. Armstrong, J.L. Sarmiento, and R.D. Slater. Monitoring ocean productivity by assimilating satellite chlorophyll into ecosystem models. In T.M. Powell and J.H. Steele, editors, *Ecological time series*, chapter 16, pages 371–390. Chapman and Hall, 1995.
- [5] V. Athias. *Une méthode d’estimation paramétrique non-linéaire pour modéliser les flux de matière organique dans la colonne d’eau océanique*. PhD thesis, Université de Toulouse III, 2001.
- [6] V. Athias, P. Mazzega, and C. Jeandel. Selecting a global optimization method to estimate the oceanic particle cycling rate constants. *J. Mar. Res.*, 58:675–707, 2000.
- [7] J.P. Aubin. Un théorème de compacité. *C. R. Acad, Sci. Paris*, 1963.
- [8] A.F. Bennett. *Inverse Method in Physical Oceanography*. Cambridge University Press, 1992.

- [9] J.-P. Bethoux. Oxygen consumption, new production, vertical advection and environmental evolution in the Mediterranean Sea. *Deep-Sea Research II*, 36:769–781, 1989.
- [10] J.-P. Bethoux, L. Prieur, and J.-H. Bong. Le courant Ligure au large de Nice. *Oceanologica Acta*, n° spécial:59–67, 1988.
- [11] R. Bleck, H.P. Hanson, D. Hu, and L.T. Smith. Salinity-driven thermocline transients in a wind- and thermohaline-forced isopycnic coordinate model of the North Atlantic. *Journal of Physical Oceanography*, 22:1486–1505, 1992.
- [12] C. Breuillin, G. Evensen, and M. Eknes. Data assimilation methods applied to marine ecosystem models. Technical Report 187, Nansen Environmental and Remote Sensing Center (NERSC), 2000.
- [13] H. Brézis. *Analyse fonctionnelle. Théorie et applications*. Masson, 1992.
- [14] K.O. Buesseler. Do upper-ocean sediment traps provide an accurate record of particle flux? *Nat.*, 353:420–423, 1991.
- [15] K.O. Buesseler, M. P. Bacon, J. K. Cochran, and H. R. Livingston. Carbon and nitrogen export during the JGOFS North Atlantic Bloom Experiment estimated from 234TH/238U disequilibria. *Deep-Sea Research*, 39:1115–1137, 1992.
- [16] K.O. Buesseler, D. K. Steinberg, A. F. Michaels, R. J. Johnson, J. E. Andrews, J. R. Valdes, and J. F. Price. A comparison of the quantity and composition of material caught in a neutrally buoyant versus surface-tethered sediment trap. *Deep-Sea Research I*, 47:277–294, 2000.
- [17] V. Calaud. *Etude analytique et numérique d'un modèle forcé atmosphère océan plancton*. PhD thesis, Université de Pau et des Pays de l'Adour, 2001.
- [18] V. Carmillet, J.-M. Brankart, P. Brasseur, H. Drange, G. Evensen, and J. Verron. A singular evolutive extended Kalman filter to assimilate ocean color data in a coupled physical-biochemical model of the North Atlantic ocean. *Ocean Modelling*, 3:167–192, 2001.
- [19] J. Carrera and S.P. Neuman. Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions: 1. Maximum likelihood method incorporating prior

- information. *Water Ressources Research*, 22(2):199–210, 1986a.
- [20] J. Carrera and S.P. Neuman. Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions: 2. Uniqueness, stability and solution algorithms. *Water Ressources Research*, 22(2):211–227, 1986b.
- [21] J. Carrera and S.P. Neuman. Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions: 3. Application to synthetic and field data. *Water Ressources Research*, 22(2):228–242, 1986c.
- [22] G. Chavent. Identification of functional parameters in partial differential equations. In R. E. Goodson and M Polis, editors, *Identification of parameters in distributed systems, ASME Conference on Automatic Control*, pages 31–48, Austin, Texas, june 17-21 1974.
- [23] G. Chavent. Identification of Distributed Parameters Systems: About the Output Least Squares Methods, its Implementation and Identifiability. In *5-th IFAC Symp. on Identification and System Parameter Estimation*, pages 85–97, Darmstadt, 1979. Pergamon Press, Oxford.
- [24] G. Chavent. Local stability of the output least square parameter estimation technique. *Math. Applic. Comp.*, 2:3–22, 1983.
- [25] G. Chavent. On the theory and practice of non-linear least-squares. *Adv. Water Ressour.*, 14(2):55–63, 1991.
- [26] M. Chifflet, V. Andersen, L. Prieur, and I. Dekeyser. One-dimensional model of short-term dynamics of the pelagic ecosystem in the NW Mediterranean Sea : effects of wind events. *J. Mar. Sys.*, 30:89–114, 2001.
- [27] G. Copin-Montegut and B. Avril. Vertical distribution and temporal variation on dissolved organic carbon in the Northwestern Mediterranean Sea. *Deep-Sea Research*, 40:1963–1972, 1993.
- [28] P. Courtier and O. Talagrand. Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation. II. numerical results. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 113:1329–1347, 1987.
- [29] M. Cushman-Roisin. *The hydrological inverse problem: reconsideration and application to the microcomputer*. PhD thesis, Florida Sate University, Tallahassee,

- 1986.
- [30] R. Dautray and J.-L. Lions. *Analyse mathématique et calcul numérique pour les sciences et les techniques*, volume 4. Masson, 1988a.
- [31] R. Dautray and J.-L. Lions. *Analyse mathématique et calcul numérique pour les sciences et les techniques*, volume 8. Masson, 1988b.
- [32] P. De Mey. Data assimilation at the oceanic mesoscale: A review. *Journal of Meteorological Society of Japan*, 75:415–427, 1997.
- [33] H. Drange. *An isopycnic coordinate carbon cycle model for the North Atlantic and the possibility of disposing of fossil fuel CO₂ in the ocean*. PhD thesis, Dep. of mathematics, University of Bergen/NERSC, Norway, 1994.
- [34] H. Drange. A 3-dimensional isopycnic coordinate model of the seasonal cycling of carbon and nitrogen in the Atlantic Ocean. *Phys. Chem. Earth*, 21(5-6):503–509, 1996.
- [35] A.M. Edwards. *A rational dynamical-systems approach to plankton population modelling*. PhD thesis, University of Leeds, UK, 1997.
- [36] M. Eknes and G. Evensen. Parameter estimation solving a weak constraint variational formulation for an ekman model. *Journal of Geophysical Research*, 102(C6):12:479–491, 1997.
- [37] M. Eknes and G. Evensen. An ensemble Kalman filter with a 1-D marine ecosystem model. *J. Mar. Sys.*, 36:75–100, 2002.
- [38] G.T. Evans. The role of local models and data sets in the joint global ocean flux study. *Deep-Sea Research I*, 46:1369–1389, 1999.
- [39] G. Evensen. Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using Monte Carlo methods to forecast error statistics. *Journal of Geophysical Research*, 99(C5):143–162, 1994.
- [40] G. Evensen, D. Dee, and J. Schröter. Parameter estimation in dynamical models. In *Ocean Modeling and Parameterizations*, NATO ASI. Chassignet, E.P., Verron, J. (Eds.), 1998.
- [41] M.J.R. Fasham, H.W. Ducklow, and S.M. McKelvie. A nitrogen-based model of plankton dynamics in the oceanic mixed-layer. *J. Mar. Res.*, 48:591–639, 1990.

- [42] M.J.R. Fasham and G.T. Evans. The use of optimization techniques to model marine ecosystem dynamics at the JGOFS station at 47 deg N 20 deg W. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, B 348:203–209, 1995.
- [43] C. Faure and Y. Papegay. Odyssée version 1.6, the language reference manual. Rapport Technique 211, INRIA, 1997.
- [44] K. Fennel, M. Losch, J. Schröter, and W. Manfred. Testing a marine ecosystem model: sensitivity analysis and parameter optimization. *J. Mar. Sys.*, 28:45–63, 2001.
- [45] M.-A. Foujols, M. Lévy, O. Aumont, and G. Madec. Opa 8.1 tracer model reference manual. Rapport interne, LODYC, Institut Pierre Simon Laplace, 1998.
- [46] P. Gaspar, Y. Gregories, and J.M. Lefevre. A simple eddy kinetic energy model for simulations of the oceanic vertical mixing: tests at station Papa and long term upper ocean study site. *Journal of Geophysical Research*, 95:16179–16193, 1990.
- [47] R.J. Geider. Light and temperature dependence of the carbon to chlorophyll a ratio in microalgae and cyanobacteria: implications for physiology and growth of phytoplankton. *New Phytol.*, 106:1–34, 1987.
- [48] R.J. Geider, H.L. MacIntyre, and T.M. Kana. Dynamic model of phytoplankton growth and acclimation: responses of the balanced growth rate and the chlorophyll a:carbon ratio to light, nutrient-limitation and temperature. *MEPS*, 148:187–200, 1997.
- [49] J.C. Gilbert and C. Lemaréchal. Some numerical experiments with variable storage quasi-newton algorithms. *Mathematical Programming*, 45:407–435, 1989.
- [50] A. Griewank. *Evaluating Derivatives. Principles and Techniques of Algorithmic Differentiation*. Frontiers in applied mathematics. SIAM, 2000.
- [51] J. Gunson, A. Oschlies, and V. Garçon. Sensitivity of ecosystem parameters to simulated satellite ocean color data using a coupled physical-biological model of the North Atlantic. *J. Mar. Res.*, 57:613–639, 1999.
- [52] D. Henry. *Geometric Theory of Semilinear Parabolic Equations*. Lecture Notes in Mathematics. Springer-Verlag, 1981.

- [53] E.M. Hood and L. Merlivat. Annual to interannual variations of f in the northwestern Mediterranean Sea: results from hourly measurements made by CARIOCA buoys, 1995-1997. *J. Mar. Res.*, accepted, 2002.
- [54] G.C. Hurtt and R.A. Armstrong. A pelagic ecosystem model calibrated with BATS data. *Deep-Sea Research II*, 43:653–683, 1996.
- [55] G.C. Hurtt and R.A. Armstrong. A pelagic ecosystem model calibrated with BATS data and OWSI data. *Deep-Sea Research I*, 46:27–61, 1999.
- [56] D.R. Jacket and T.J. McDougall. Minimal adjustment of hydrographic data to achieve static stability. *J. Atmos. Ocean. Tech.*, 12:381–389, 1995.
- [57] R. E. Kalman. A new approach to linear filter and prediction problems. *J. Basic. Eng.*, 82:35–45, 1960.
- [58] H. Kielhöfer. Global solutions of semilinear evolution equations satisfying an energy inequality. *Journal of Differential Equations*, 36:188–222, 1980.
- [59] M.A. Krasnosel'skii. *Topological Methods in the Theory of Nonlinear Integral Equations*. Pergamon Press, 1964.
- [60] L.M. Lawson, E.E. Hofmann, and Y.H. Spitz. Time series sampling and data assimilation in a simple marine ecosystem model. *Deep-Sea Research II*, 43:625–651, 1996.
- [61] L.M. Lawson, Y.H. Spitz, E.E. Hofmann, and R.B. Long. A data assimilation technique applied to a predator-prey model. *Bulletin of Mathematical Biology*, 57:593–617, 1995.
- [62] F.X. Le Dimet and O. Talagrand. Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations: theoretical aspects. *Tellus*, 38A:97–110, 1986.
- [63] L. Legendre and J. Michaud. Flux of biogenic carbon in oceans: size-dependent regulation by pelagic food webs. *MEPS*, 164:1–11, 1998.
- [64] J.M. Lellouche, J.-L. Devenon, and I. Dekeyser. Data assimilation by optimal control in a 3-D coastal oceanic model: the problem of the discretization. *J. Atmos. Ocean. Tech.*, 15:470–481, 1998.

- [65] Y. Leredde, J.-L. Devenon, and I. Dekeyser. Turbulent viscosity optimized by data assimilation. *Ann. Geophysicae*, 17:1463–1477, 1999.
- [66] M. Lévy. *Modélisation des processus biogéochimiques en méditerranée nord-occidentale, cycle saisonnier et variabilité mésoéchelle*. PhD thesis, Université PARIS VI, 1996.
- [67] M. Lévy, L. Mémery, and J.-M. André. Simulation of primary production and export fluxes in the northwestern mediterranean sea. *J. Mar. Res.*, 56:197–238, 1998a.
- [68] M. Lévy, L. Mémery, and G. Madec. The onset of a bloom after deep winter convection in the Northwestern Mediterranean Sea : mesoscale process study with a primitive equation model. *J. Mar. Sys.*, 16:7–21, 1998b.
- [69] R. Lewandosky. *Analyse Mathématique et Océanographie*. Recherche en mathématiques appliquées. Masson, 1997.
- [70] J.M. Lewis and J.C. Derber. The use of adjoint equations to solve a variational adjustment problem with adjective constraints. *Tellus Series A*, 37:309–322, 1985.
- [71] J.-L. Lions. *Quelques méthodes de résolution de problèmes aux limites non linéaires*. Gauthier Villard, 1969.
- [72] J.-L. Lions and E. Magenes. *Problèmes aux limites non homogènes et applications*, volume 1. Dunod, 1968.
- [73] J.L. Lions. *Optimal control of system governed by partial differential equations*. Springer, Berlin Heidelberg New York, 1971.
- [74] R.B. Long and W.C. Thacker. Data assimilation into a numerical equatorial ocean model, part I: the model and the assimilation algorithm. *Dynamics of the Atmosphere and Oceans*, 13:379–412, 1989a.
- [75] R.B. Long and W.C. Thacker. Data assimilation into a numerical equatorial ocean model, part II: assimilation experiments. *Dynamics of the Atmosphere and Oceans*, 13:313–440, 1989b.
- [76] A.R. Longhurst and W.J. Harrison. The biological pump: profiles of plankton production and consumption in the upper ocean. *Prog. Oceanog*, 22:47–123, 1989.

- [77] B. Luong, J. Blum, and J. Verron. A variational method for the resolution of data assimilation problem in oceanography. *Inverse problems*, 14:979–997, 1998.
- [78] G.. Madec, M. Chartier, P. Delecluse, and M Crepon. A three-dimensional numerical study of deep water formation in the Northwestern Mediterranean Sea. *Journal of Physical Oceanography*, 21:1349–1371, 1991.
- [79] G. Madec, P. Delecluse, M. Imbard, and C. Lévy. Opa 8.1 ocean general circulation model reference manual. Rapport interne, LODYC, Institut Pierre Simon Laplace, 1999.
- [80] S. Magri. *En préparation*. PhD thesis, Grenoble, 2002.
- [81] J.H. Martin and S.E. Fitzwater. Dissolved Organic Carbon in the Atlantic, Southern and Pacific Oceans. *Nat.*, 356:699–700, 1992.
- [82] J.-C. Marty. Opération DYFAMED, rapport d’activité pour 1993 et programme pour 1994. Technical report, programme France/JGOFS, 1993.
- [83] J.-C. Marty and J. Chiavérini. Seasonal and interannual variations in phytoplankton production at DYFAMED time-series station, Northwestern Mediterranean Sea. *Deep-Sea Research II*, 49:2017–2030, 2002.
- [84] R.J. Matear. Parameter optimization and analysis of ecosystem models using simulated annealing: A case study at Station P. *J. Mar. Res.*, 53:571–607, 1995.
- [85] L. Mémerly, M. Lévy, S. Vérant, and L. Mervilat. The relevant time scales in estimating the air - sea CO_2 exchange in a mid latitude region. *Deep-Sea Research II*, 49:2067–2092, 2002.
- [86] H.J. Minas. La distribution de l’oxygène en relation avec la production primaire en méditerranée nord-occidentale. *Marine Biology*, 7:181–204, 1970.
- [87] J.-C. Miquel, S.W. Flower, and J. La Rosa. Vertical particle fluxes in the Ligurian Sea. *Ann. Inst. Oceanogr.*, 69:107–110, 1993.
- [88] J.-C. Miquel, S.W. Flower, J. La Rosa, and P. Buat-Menard. Dynamics of the downward flux of particles and carbon in the open Northwestern Mediterranean Sea. *Deep-Sea Research*, 41:243–262, 1994.

- [89] L.-J. Natvik. *A data assimilation system for a 3-dimensional biochemical model of the North Atlantic*. PhD thesis, Dep. of mathematics, University of Bergen/NERSC, Norway, 2001.
- [90] T.R. Parsons, M. Takahashi, and B. Hargrave. *Biological Oceanographic Processes*. Oxford, third edition, 1984.
- [91] A. Pazy. *Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations*. Applied Mathematical Sciences. Springer-Verlag, 1983.
- [92] D. T. Pham, J. Verron, and Roubaud M.C. A singular evolutive extended Kalman filter for data assimilation in oceanography. *J. Mar. Sys.*, 16(3-4):323–340, 1998.
- [93] P. Prunet, J.F. Minster, V. Echevin, and I. Dadou. Assimilation of surface data in a one-dimensional physical-biogeochemical model of the surface ocean: 2. Adjusting a simple trophic model to chlorophyll, temperature, nitrate, and pCO₂ data. *Global Biogeochem. Cycles*, 10:139–158, 1996b.
- [94] P. Prunet, J.F. Minster, D. Ruiz-Pino, and I. Dadou. Assimilation of surface data in a one-dimensional physical-biogeochemical model of the surface ocean: 1. Method and preliminary results. *Global Biogeochem. Cycles*, 10:111–138, 1996a.
- [95] K. Richardson. The ICES 14C Primary Production measurement intercomparison exercise. *MEPS*, 72:189–201, 1993.
- [96] H. Roquet, S. Platon, and P. Gaspar. Determination of ocean surface heat fluxes by a variational method. *Journal of Geophysical Research*, 98(C6):10: 211–221, 1993.
- [97] M. Schartau, A. Oschlies, and J. Willebrand. Parameter estimates of a zero-dimensional ecosystem model applying the adjoint method. *Deep-Sea Research II*, 48:1769–1800, 2001.
- [98] J. H. Seinfeld and C. Kravaris. Distributed parameter identification in geophysics-petroleum reservoirs and aquifers. In S. G. Tzafestas, editor, *Distributed parameter control system*, pages 367–390. Pergamon Press, Oxford, 1982.
- [99] U. Siegenthaler and J.L. Sarmiento. Atmospheric carbon dioxide and the ocean. *Nature*, 365:119–125, 1993.

- [100] Y.H. Spitz, J.R. Moisan, and M.R. Abbot. Configuring an ecosystem model using data from the Bermuda Atlantic Series (BATS). *Deep-Sea Research II*, 48:1733–1768, 2001.
- [101] Y.H. Spitz, J.R. Moisan, M.R. Abbot, and J.G. Richman. Data assimilation and a pelagic ecosystem model: parameterization using time series observations. *J. Mar. Sys.*, 16:51–68, 1998.
- [102] N.-Z. Sun and W. W.-G. Yeh. Coupled inverse problem in groundwater modeling, 1, Sensitivity and parameter identification. *Water Ressources Research*, 26(10):2507–2525, 1990a.
- [103] N.-Z. Sun and W. W.-G. Yeh. Coupled inverse problem in groundwater modeling, 2, Identifiability and experimental design. *Water Ressources Research*, 26(10):2527–2540, 1990b.
- [104] O. Talagrand and P. Courtier. Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation. I. theory. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 113:1311–1328, 1987.
- [105] H. Tanabe. *Equations of evolution*. (English translation). Pitman, London, 1979.
- [106] A. H. Taylor. A modelling investigation of the role of phytoplankton in the balance of carbon at the surface of the North Atlantic. *Global Biogeochem. Cycles*, 5:151–171, 1991.
- [107] W.C. Thacker. The role of the hessian in fitting models to measurements. *Journal of Geophysical Research*, C 94:6177–6196, 1989.
- [108] J.W. Thomas. *Numerical Partial Differential Equations*. Text in Applied Mathematics. Springer-Verlag, 1995.
- [109] A.N. Tikhonov and V.Y. Arsenin. *Solutions of Ill-posed problems*. Winston, Washington, D.C., 1977.
- [110] A.F. Vézina and T. Platt. Food web dynamics in the ocean. i. best-estimates of flow networks using inverse methods. *Mar. Ecol. Prog Ser.*, 42:269–287, 1988.
- [111] C. Wunsch. *The Ocean Circulation Inverse Problem*. Cambridge University Press, 1996.

-
- [112] W. W.-G. Yeh. Review of parameter estimation procedures in groundwater hydrology. *Water Res. Rev.*, 22:95–108, 1986.

Résumé

Ce travail concerne la mise en oeuvre d'une méthode numérique d'optimisation de type contrôle optimal appliquée à un problème d'assimilation de données en biogéochimie marine.

Après avoir présenté le système d'équations aux dérivées partielles non-linéaires régissant l'évolution en temps et en espace des différentes variables physiques et biologiques, un premier travail, mathématique, a consisté à montrer l'existence, l'unicité et la positivité de la solution du modèle biologique.

La seconde partie du travail est numérique. Le modèle est discrétisé par différences finies et les codes linéaire tangent et adjoint sont obtenus par différentiation automatique. Ces outils informatiques étant développés, on peut aborder le problème inverse d'assimilation variationnelle de données.

Les variables de contrôle sont les paramètres intervenant dans les termes non-linéaires de réactions biologiques. On cherche un jeu de paramètres optimal minimisant une fonction coût. Celle-ci mesure l'écart au sens des moindres carrés entre les observations et les sorties correspondantes du modèle.

Une étude de sensibilité préliminaire, utilisant le modèle tangent linéaire, ainsi que des expériences d'identification, utilisant le modèle adjoint, avec données simulées, sont menées. On utilise enfin la méthode pour assimiler des données réelles de la station Dyfamed en Méditerranée Nord-Occidentale.

Mots clés

Assimilation variationnelle de données, biogéochimie de l'océan, équations aux dérivées partielles semi-linéaires, contrôle optimal, optimisation, estimation de paramètres, code adjoint.

Variational data assimilation in a coupled ocean-biogeochemical model

Abstract

This thesis is concerned with the implementation of the optimal control numerical method applied to a data assimilation problem in ocean biogeochemistry.

We first present the system of non-linear partial differential equations which modelizes the evolution over space and time of physical and biological variables. A first part of the work is mathematical and consists of proving existence, uniqueness and positivity of the solution to the biological model.

The second part of the work is numerical. The model is discretized using finite differences. Then, the tangent linear and adjoint codes are derived using automatic differentiation. Once these tools are developed the inverse data assimilation problem can be dealt with.

The control variables are the parameters included in the non-linear biological reaction terms. We seek an optimal parameter set minimizing a cost function which measures the distance between model and observations in a least square sens.

A preliminary sensitivity study using the tangent linear model as well as twin experiments using the adjoint model are conducted. We then use the method to assimilate real data from the JGOFS-Dyfamed station in the Northwestern Mediterranean Sea.