

ANALYSE DE SENSIBILITÉ ET ESTIMATION DE PARAMÈTRES POUR DES PROBLÈMES EN GÉOHYDROLOGIE

F. Clément (INRIA, Rocquencourt)

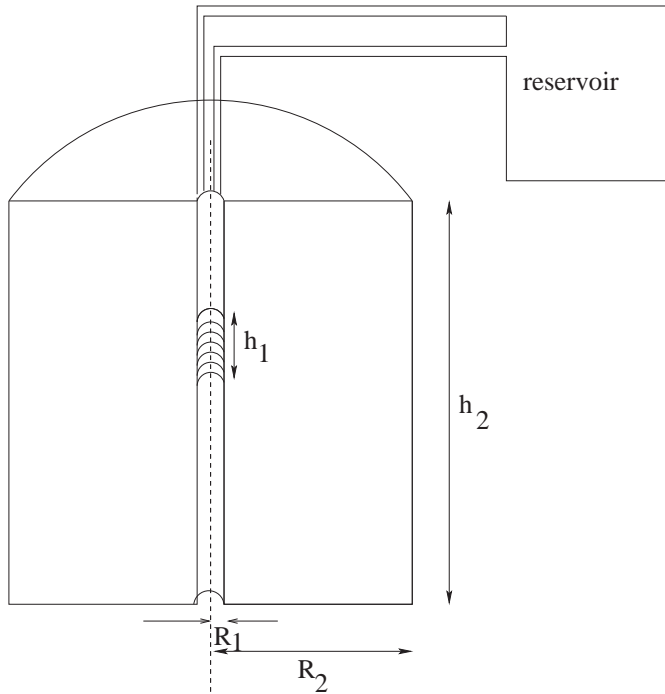
N. Khvoenkova (INRIA/CEA)

A. Cartalade, P. Montarnal (CEA)

H. Ben Ameer (LAMSIN/ENIT, Tunis)

G. Chavent, J. Jaffré (INRIA)

EXPÉRIENCE DE DIFFUSION (MONT TERRI)



pas de convection
symétrie axiale \Rightarrow 1D
(pendage \sim 3D)

Mesures : monitoring $C(R_1, t)$ et temps final $C(r, T_f)$

Paramètres à estimer : porosité $\omega(r)$ et diffusion $D(r)$

PLAN

- Formulation aux moindres carrés (état adjoint)
 - Analyse de sensibilité (SVD)
 - Zonation par indicateurs de raffinement
 - Autres techniques développées dans MoMaS

MODÈLE MATHÉMATIQUE/NUMÉRIQUE

Équation de diffusion

$$\omega(r) \frac{\partial C}{\partial t}(r, t) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D(r) \frac{\partial C}{\partial r}(r, t) \right) + \lambda \omega(r) C(r, t) = 0$$

$$(CL) \begin{cases} C(R_1, t) = C(R_1, 0) + \alpha D(R_1) \int_0^t \frac{\partial C}{\partial r}(R_1, \tau) d\tau \\ D(R_2) \frac{\partial C}{\partial r}(R_2, t) = 0 \end{cases}$$

$$(CI) C(r, 0) = 0$$

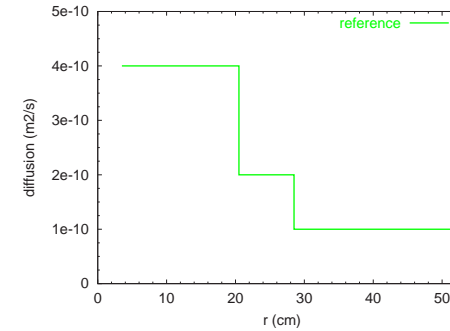
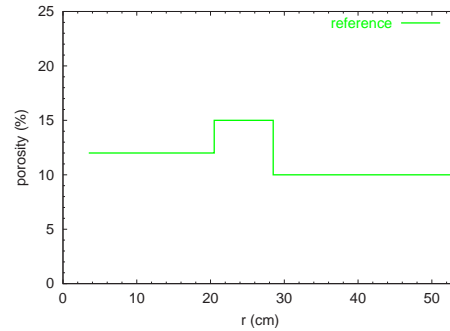
Problème discret : $r_l = R_1 + l \frac{R_2 - R_1}{L}$ et $t^n = n \frac{T_f}{N}$, $C^n = (C_0^n, \dots, C_L^n)$

$$\begin{cases} (M(\omega) + K(\omega, D)) C^n = M(\omega) C^{n-1}, & n = 1, \dots, N \\ C^0 = (C_0^0, 0, \dots, 0)^T \end{cases}$$

PROBLÈME DIRECT : $p \mapsto \mathcal{F}(p) = \mathcal{M}(u_p)$

Paramètre

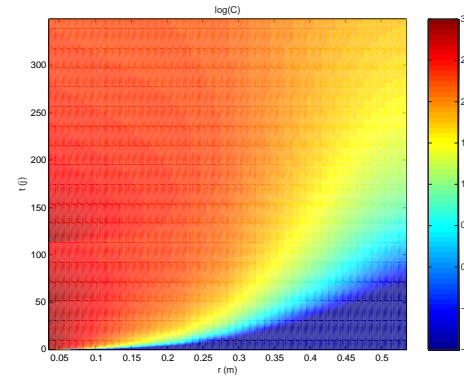
$$p = \left(\frac{\omega}{\omega_{\text{ref}}}, \frac{D}{D_{\text{ref}}} \right)$$



Variable d'état

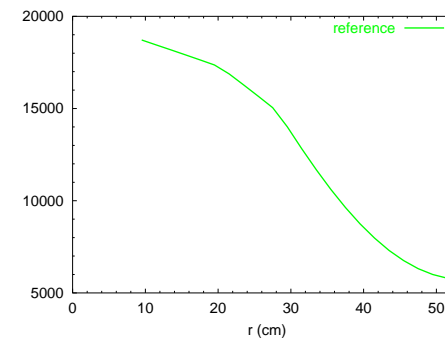
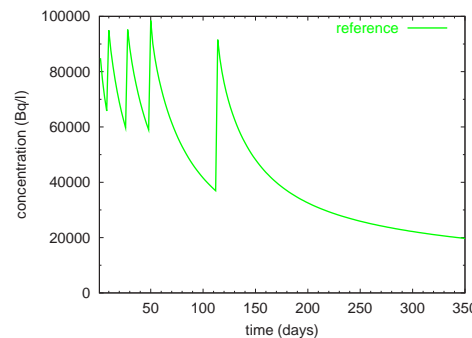
$$u = C = (C^0, \dots, C^N)$$

$$u_p = \text{solution de : } \mathcal{E}(p, u) = 0$$



Mesures

$$\mathcal{M}(u_p) = (\nu C_0, \mu C^N)$$



PROBLÈME INVERSE : $d \mapsto \mathcal{F}^{-1}(d)$?

Formulation aux moindres carrés : $J = \frac{1}{2} \|\mathcal{M}(u) - d\|^2$

\Rightarrow minimisation de J / p sous la contrainte $\mathcal{E}(p, u) = 0$

unicité/régularité \Rightarrow régularisation (**paramétrisation**)

Analyse de sensibilité

permet le calcul d'**incertitudes**

détermine les paramètres **principaux** du système

Techniques globales (probabilistes)

coût (grand nombre de simulations)

précision (modèle dégradé)

Techniques locales (déterministes)

difficulté de **mise en œuvre** (calcul de gradient/jacobienne)

CALCUL DES DÉRIVÉES

Différences finies : $f'(x)\delta x = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon}(f(x + \varepsilon\delta x) - f(x))$

simple mais coûteux et peu précis \Rightarrow **validation** des calculs analytiques

Mode direct/tangent : $\delta y = f'(x)\delta x$

coût proportionnel au nombre de **paramètres**

\Rightarrow la jacobienne est calculée par colonnes ($\delta x = \delta x_j$)

Mode inverse/adjoint : $g_x = f'(x)^T g_y$

coût proportionnel au nombre de **mesures** \Rightarrow gradient de la fonction coût J

\Rightarrow la jacobienne est calculée par lignes ($g_y = e_i$)

IMPLÉMENTATION DES DÉRIVÉES

- Il faut dériver la fonction **discrète** (et non discrétiser la dérivée continue)

Différentiation automatique

surcharge d'opérateur (mode adjoint difficile)

transformation du code source (Tapenade, Adifor, . . .)

⇒ simple, **coût** (calcul, mémoire)

Différentiation à la main

méthode de l'**état adjoint**, composition de boîtes de calcul

⇒ tâche **méticuleuse**

MÉTHODE DE L'ÉTAT ADJOINT (G. Chavent)

Lagrangien : $\mathcal{L}(p, u, \lambda) = G(\mathcal{M}(u)) + \langle \mathcal{E}(p, u), \lambda \rangle$

Théorème : $\nabla_p G = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial p}(p, u_p, \lambda_p) = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial p}(p, u_p)^T \lambda_p$ avec

u_p solution de $\mathcal{E}(p, u) = 0$

λ_p solution de $\forall \delta u \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u}(p, u_p, \lambda) \delta u = 0$, i.e.

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial u}(p, u_p)^T \lambda = -\mathcal{M}'(u_p)^T \nabla_v G(\mathcal{M}(u_p))$$

$$G(v) = \langle v, e_i \rangle \rightsquigarrow \nabla_p G = \mathcal{F}'(p)^T e_i$$

$$G(v) = \langle v, g_v \rangle \rightsquigarrow \nabla_p G = \mathcal{F}'(p)^T g_v$$

$$G(v) = \frac{1}{2} \|v - d\|^2 \rightsquigarrow \nabla_p G = \nabla_p J$$

Il suffit donc
de changer le **second membre**

- L'équation adjointe est **linéaire**

PLAN

- *Formulation aux moindres carrés (état adjoint)*
- Analyse de sensibilité (SVD)
- Zonation par indicateurs de raffinement
- Autres techniques développées dans MoMaS

DÉCOMPOSITION EN VALEURS SINGULIÈRES (SVD)

- Généralisation des **valeurs propres** aux matrices **rectangulaires**

$$vs = \sqrt{\text{vp}(A^T A)}$$

A = matrice à I lignes et J colonnes

$$A = USV^T$$

$V = (v_j)$: vecteurs singuliers de l'espace de départ (unitaires)

$U = (u_i)$: vecteurs singuliers de l'espace d'arrivée

$S = \text{diag}(s_k)$: valeurs singulières ($s_{k+1} \geq s_k \geq 0$)

$$Av_k = \begin{cases} s_k u_k & \text{si } k \leq I, J \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

ANALYSE DE SENSIBILITÉ

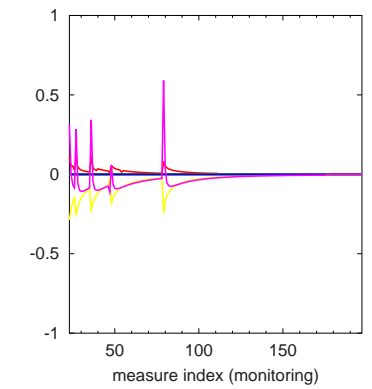
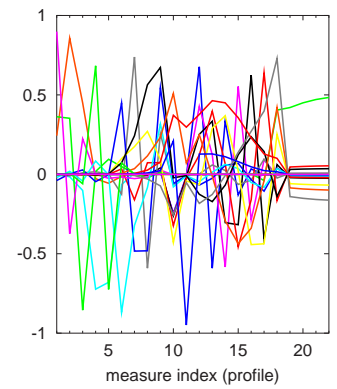
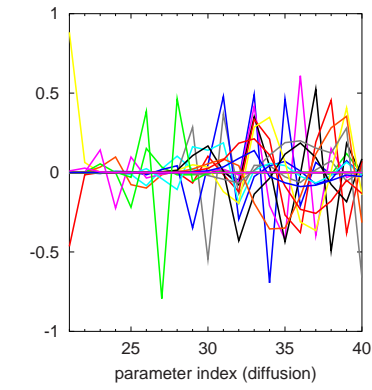
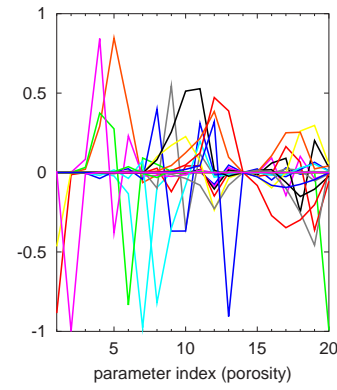
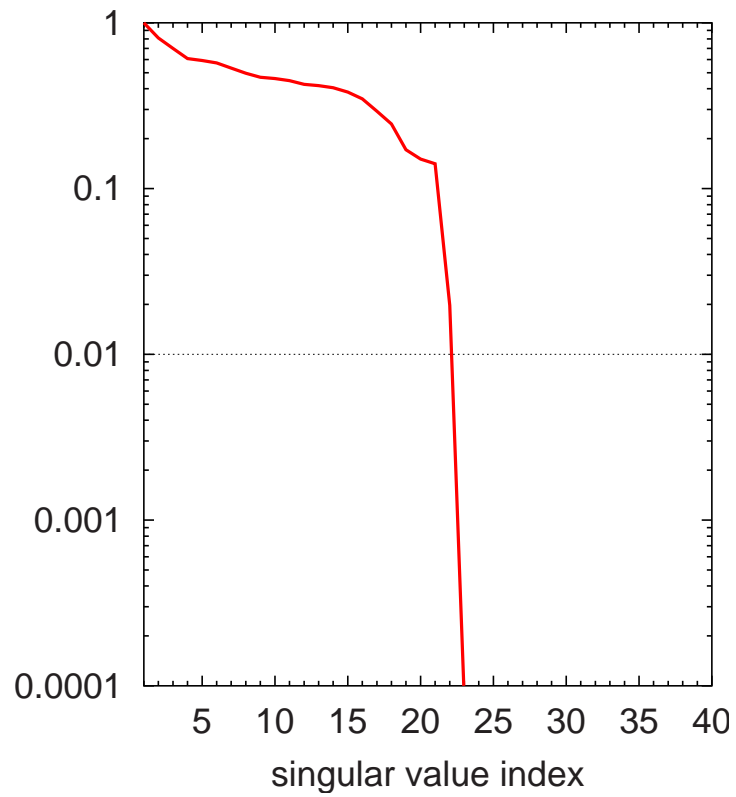
$$\begin{aligned}d_0 &= \mathcal{F}(p_0) & d &= d_0 + \delta d & p &= p_0 + \delta p \\ \mathcal{F}'(p_0) &= USV^T & \delta d &= \sum_i \delta d_i u_i & \delta p &= \sum_j \delta p_j v_j\end{aligned}$$

$$\frac{\delta p_k}{\|p_0\|} \leq \frac{s_1}{s_k} \frac{\delta d_k}{\|d_0\|} \text{ et donc } \frac{\delta d_k}{\|d_0\|} \leq \sigma_d, \frac{s_k}{s_1} \geq \frac{\sigma_d}{\sigma_p} \Rightarrow \frac{\delta p_k}{\|p_0\|} \leq \sigma_p$$

\Rightarrow on définit $K = \max_{\substack{s_k \geq \sigma_d \\ s_1 \geq \sigma_p}} \{k\}$

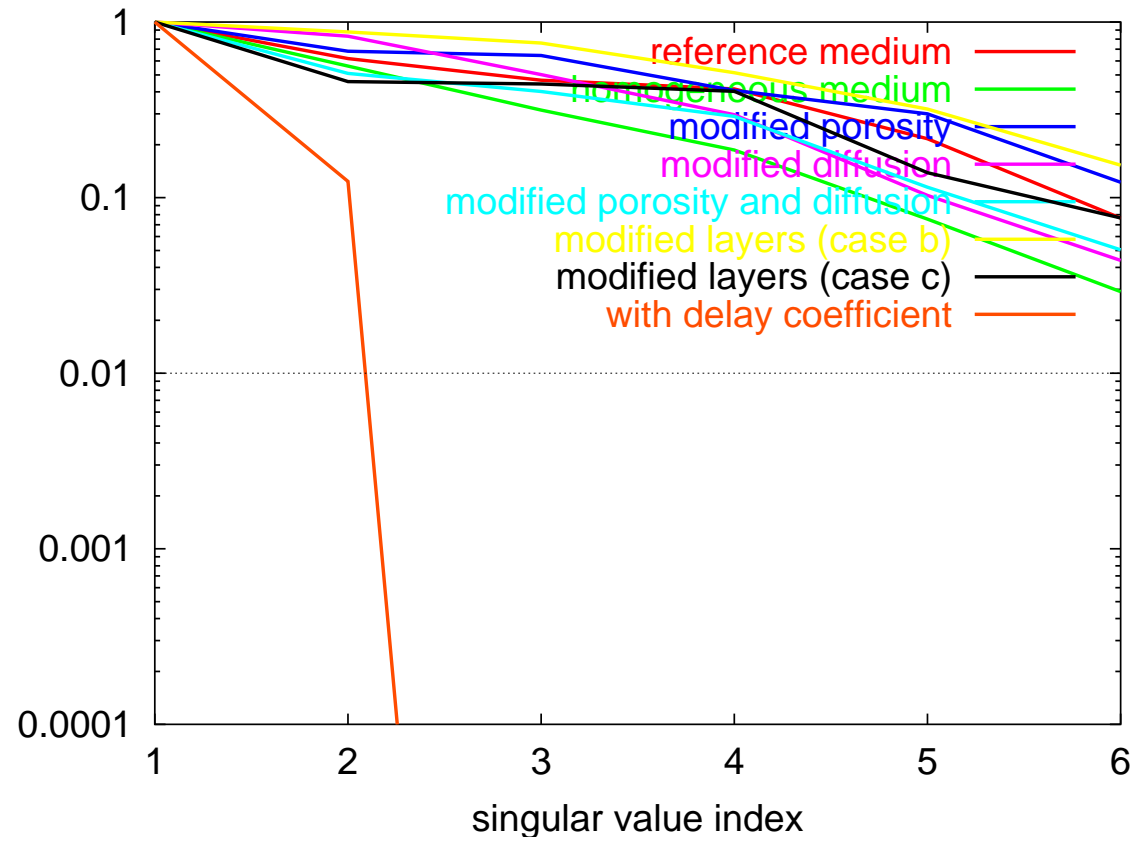
les composantes δp_k pour $k \leq K$ sont identifiables de façon **stable**

ÉLÉMENTS SINGULIERS



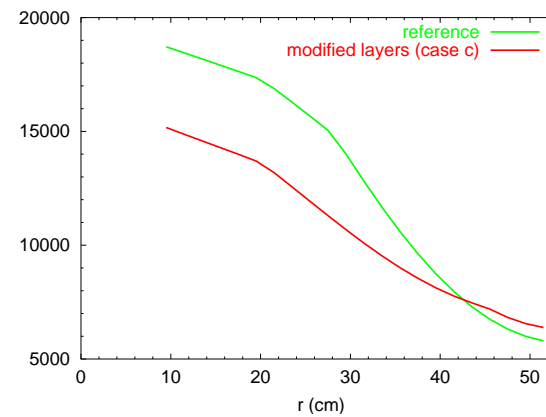
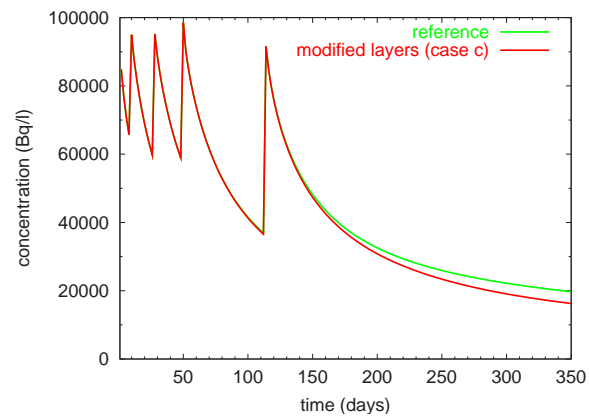
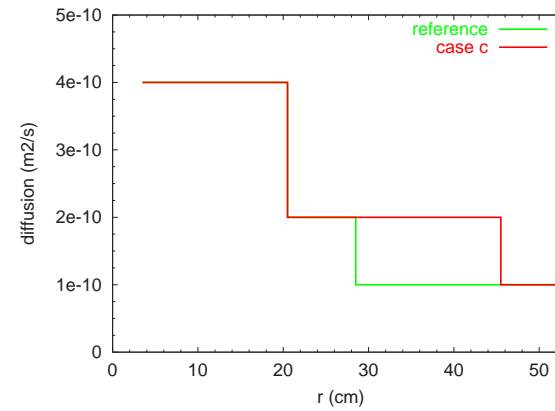
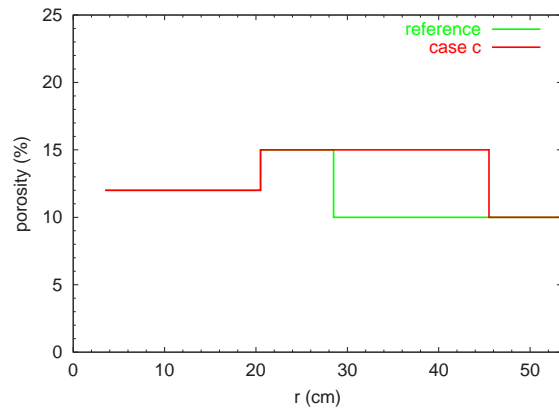
INFLUENCE DU POINT ÉTUDIÉ

valeurs singulières (3 zones)



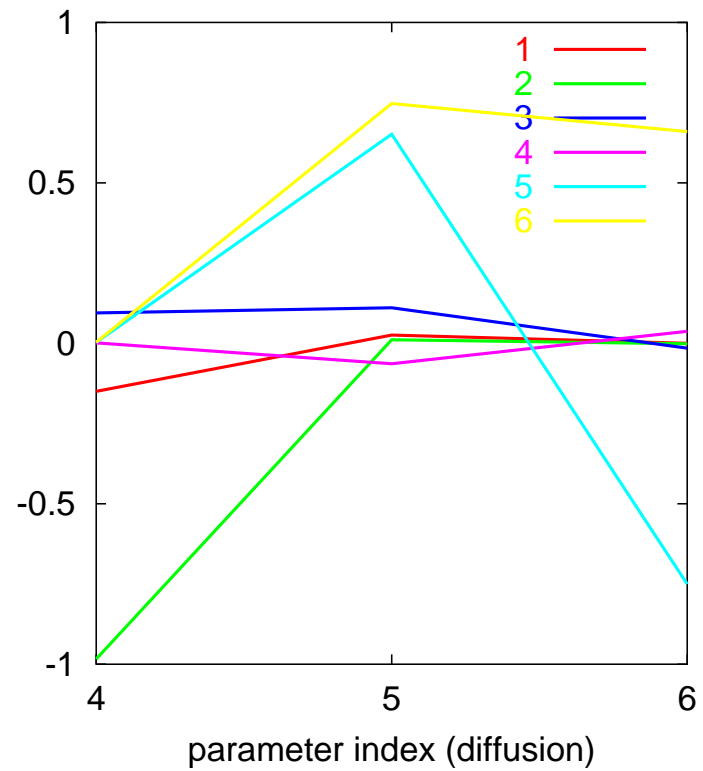
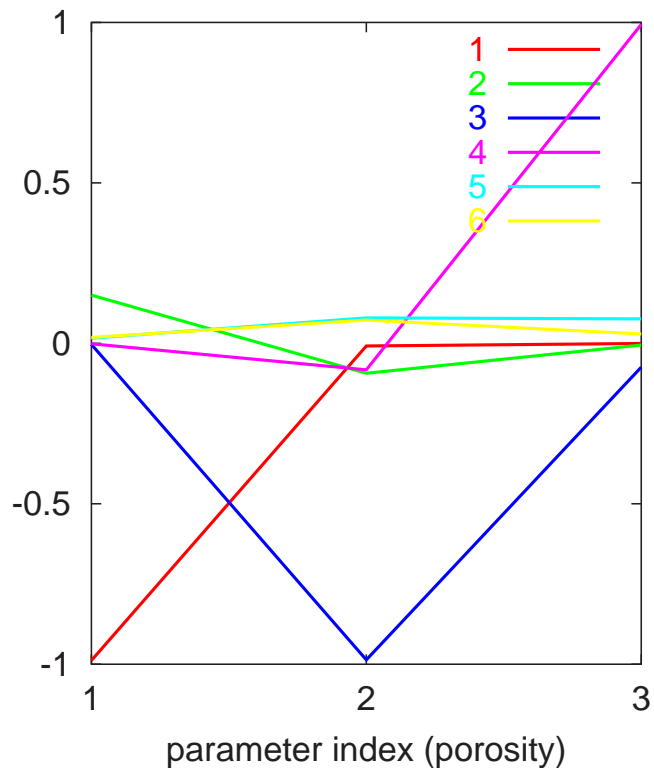
INFLUENCE DU POINT ÉTUDIÉ

paramètre, mesures

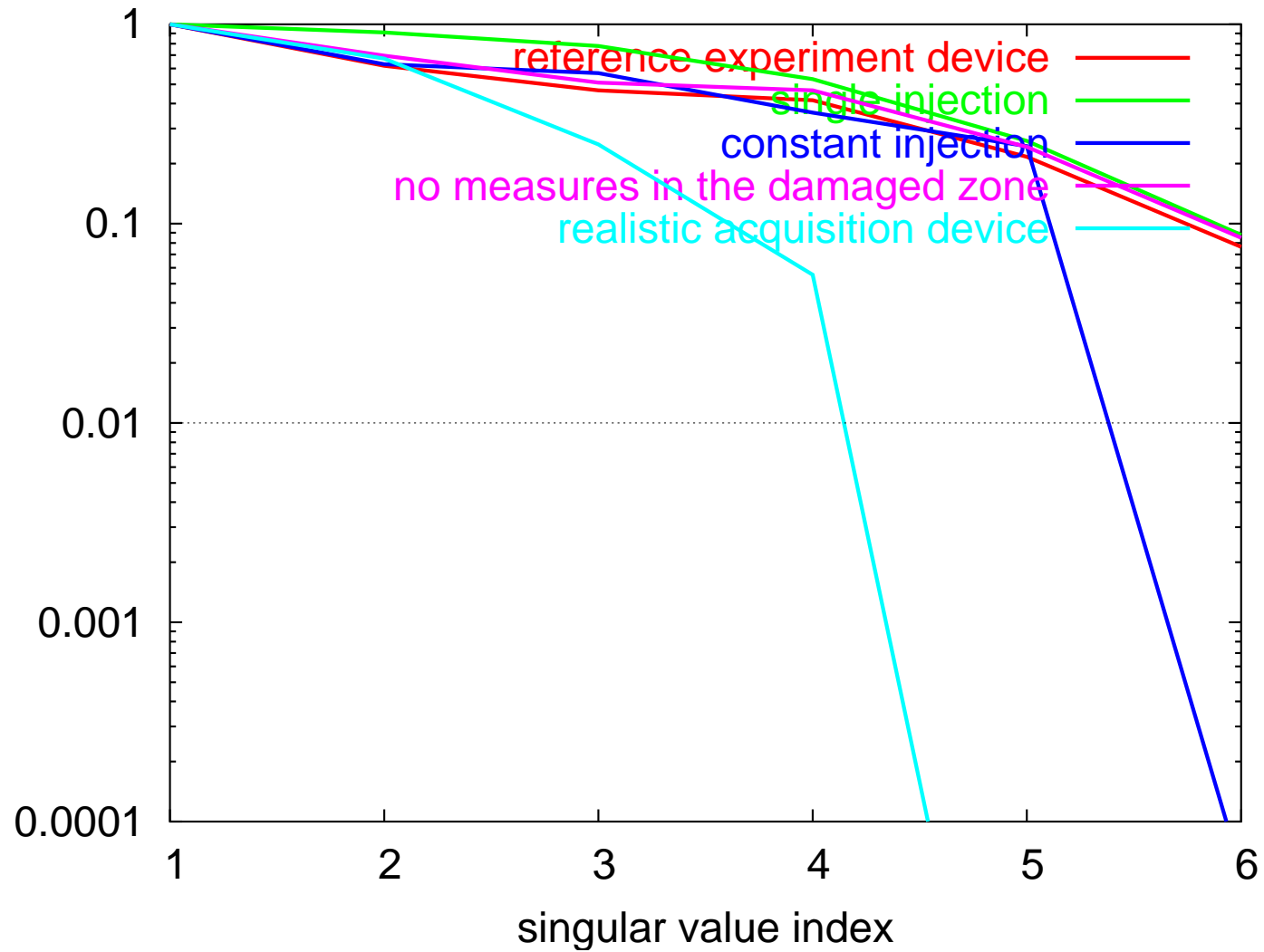


INFLUENCE DU POINT ÉTUDIÉ

vecteurs singuliers dans l'espace des paramètres (3 zones)



CHOIX DU DISPOSITIF EXPÉRIMENTAL



APPLICATIONS DE L'ANALYSE DE SENSIBILITÉ PAR SVD

Calcul d'incertitudes

couplage écoulement-transport + précipitation/dissolution (E. Marchand)

Estimation de paramètres

⇒ fournit des indicateurs de sensibilité (K, v_k, u_k)

calibration (normalisation, discrétisation, ...)

analyse de la non-linéarité du modèle direct

choix de la paramétrisation

choix du dispositif expérimental

Désavantages

informations locales (approximation du premier ordre)

le calcul peut être coûteux (3D ?)

PLAN

- *Formulation aux moindres carrés (état adjoint)*
- *Analyse de sensibilité (SVD)*
- Zonation par indicateurs de raffinement
- Autres techniques développées dans MoMaS

PARAMÉTRISATION

Représentation **fine**
de la physique
($\dim p \gg 1$)

vs.

Estimation **unique**
et **stable** du paramètre
($\dim p \sim 1$)

\Rightarrow choix de $\mathcal{P} : m \mapsto p$ avec $1 < \dim m \ll \dim p$

$$\begin{aligned} p &\rightsquigarrow \mathcal{P}(m) & \nabla_p J &\rightsquigarrow \mathcal{P}'(m)^T \nabla_p J \\ \mathcal{F}(p) &\rightsquigarrow \mathcal{F} \circ \mathcal{P}(m) & \mathcal{F}'(p) &\rightsquigarrow \mathcal{F}'(\mathcal{P}(m)) \mathcal{P}'(m) \end{aligned}$$

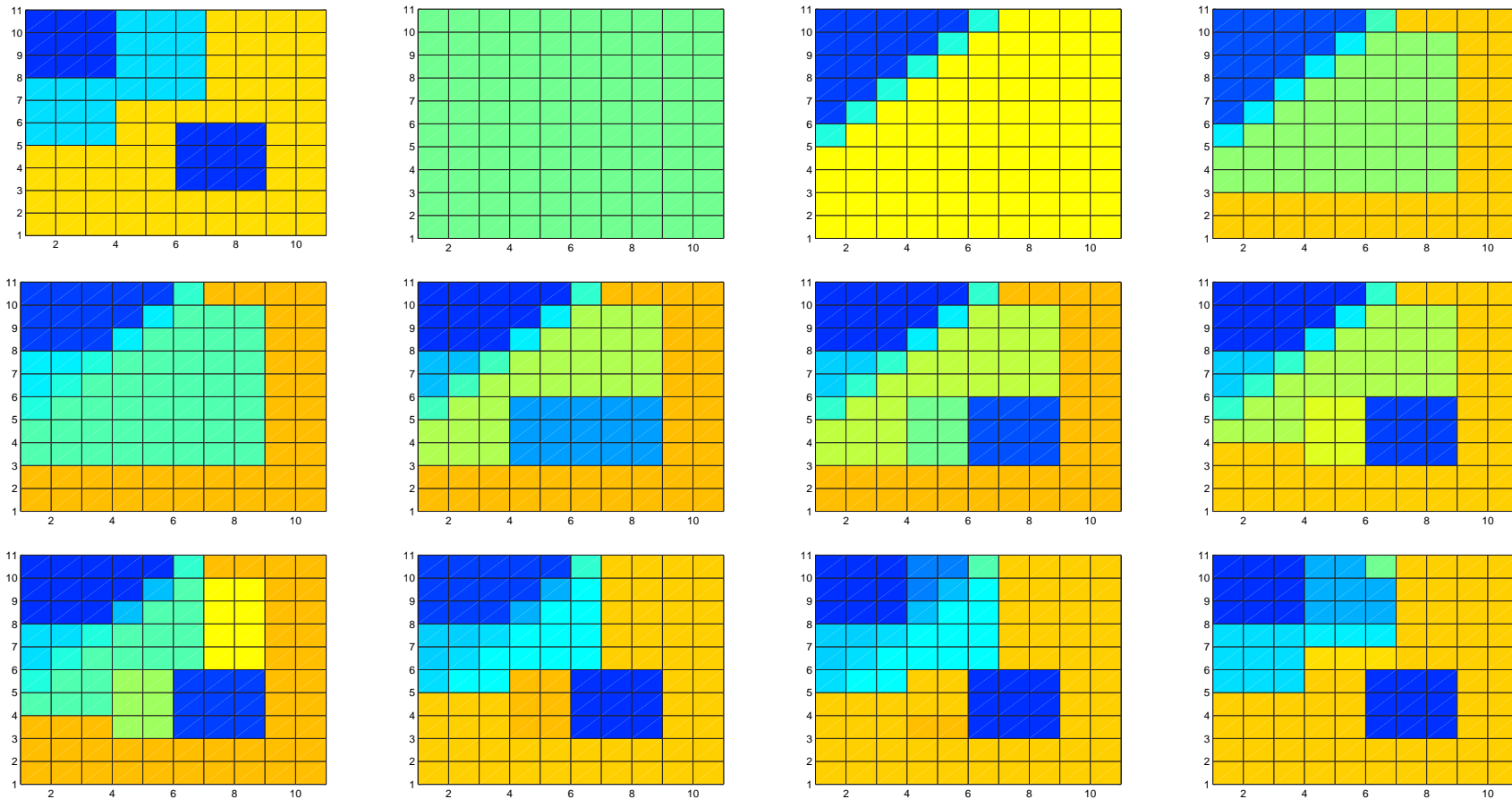
Exemple : zonation

Techniques : analyse de sensibilité, **zonation automatique**

ZONATION PAR INDICATEUR DE RAFFINEMENT

- Estimation **conjointe** de la paramétrisation \mathcal{P} et du paramètre $p = \mathcal{P}(m)$
- Procède par **découpages optimaux** successifs (à l'aide de l'état adjoint λ)

Application : estimation de transmissivités hydrauliques



FUTURE OFFRE LOGICIELLE (2005)

OCaml

langage **fonctionnel** de haut niveau, **sûr** (théorèmes)

⇒ parallélisation **automatique** (OCamlP3I)

Outils généraux

l'utilisateur fournit un programme résolvant l'équation d'état et l'équation adjointe à la demande (sans contrainte de langage)

⇒ validation des dérivées, SVD, zonation par indicateur de raffinement, . . .

PLAN

- *Formulation aux moindres carrés (état adjoint)*
- *Analyse de sensibilité (SVD)*
- *Zonation par indicateurs de raffinement*
- Autres techniques développées dans MoMaS

AUTRE TECHNIQUES DÉVELOPPÉES DANS MOMAS

Zonation par optimisation de forme (level set)

G. Allaire (gregoire.allaire@polytechnique.fr)

O. Pantz (olivier.pantz@polytechnique.fr)

Sensibilité aux données (adjoint au second ordre)

J. Blum (jblum@unice.fr)

Approche probabiliste (réseaux de neurones, hypercube latin)

A. Badea (badea@emse.fr)

O. Gipouloux (gipoul@mcs.univ-lyon1.fr)