



HAL
open science

Assimilation de données et identification de paramètres : une application en hydrologie

Pierre Désiré Ngnepieba

► **To cite this version:**

Pierre Désiré Ngnepieba. Assimilation de données et identification de paramètres: une application en hydrologie. Modélisation et simulation. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2001. Français. NNT: . tel-00004695

HAL Id: tel-00004695

<https://theses.hal.science/tel-00004695>

Submitted on 16 Feb 2004

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

Pierre NGNEPIEBA

POUR OBTENIR LE TITRE DE DOCTEUR
DE L'UNIVERSITÉ JOSEPH FOURIER - GRENOBLE 1
ET DE L'UNIVERSITÉ DE YAOUNDÉ 1

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

SPECIALITÉ : MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES

ASSIMILATION DE DONNÉES ET IDENTIFICATION DE
PARAMÈTRES : UNE APPLICATION EN HYDROLOGIE

Date de soutenance : 13 Décembre 2001

Composition du Jury :

M. Gabriel NGUETSENG	Président
M. Bernard PHILIPPE	Rapporteur
M. Robert MOSÉ	Rapporteur
M. François-Xavier LE DMET	Directeur
M. Randel HAVERKAMP	Examineur
M. Victor SHUTYAEV	Examineur

*Thèse préparée au sein du Laboratoire de Modélisation et Calcul (Projet
IDOPT) - Grenoble et du Département de Mathématiques (UY1)*

Table des matières

1	Mathématiques pour les milieux poreux	7
1.1	Introduction	8
1.2	Définition du milieu poreux	8
1.3	Hydrodynamique du milieu poreux	8
1.4	Modèle direct : aspects mathématiques	15
1.5	Résolution numérique de l'équation de l'hydrodynamique en milieu poreux non-saturé	22
1.6	Résultats numériques	28
1.7	Conclusion	30
2	Assimilation variationnelle de données et identification	31
2.1	Introduction	31
2.2	Définition d'un problème de contrôle optimal en milieu poreux non-saturé	32
2.3	Principes de l'assimilation variationnelle de données	35
2.4	Assimilation de données : identification	44
2.5	Conclusion	71
3	Études au second ordre	73
3.1	Introduction	74
3.2	Rappels sur l'assimilation variationnelle de données : formulation générale	75
3.3	Calcul du produit Hessien \times vecteur	78
3.4	Analyse de sensibilité	83
3.5	Sensibilité du contrôle optimal par rapport à un bruit sur les observations	89
3.6	Application au modèle d'écoulement en zone non-saturée	93
3.7	Résultats numériques	96
3.8	Sensibilité par rapport à la configuration temporelle des observations .	105
3.9	Rôle du Hessien en assimilation variationnelle des données	107
3.10	Conditionnement du Hessien	111
3.11	Diagonalisation du Hessien par la méthode de Lanczos	112
3.12	Expériences numériques	115
3.13	Conclusion et perspectives	128
4	Un générateur automatique de codes	131
4.1	Introduction	132
4.2	Calcul des dérivées	133

4.3	Détermination pratique du système adjoint	136
4.4	Dérivation automatique des codes adjoints : Utilisation d'Odyssee	141
4.5	Assimilation de données et différentiation automatique	142
4.6	Résultats numériques	147
4.7	Conclusion	163
5	Méthode de Newton en assimilation de données	165
5.1	Introduction	165
5.2	Présentation de la méthode de Newton	166
5.3	Méthode de Newton	167
5.4	Problème d'assimilation de données linéaire à chaque étape	168
5.5	Convergence de la méthode de Newton	169
5.6	Méthode de Newton pour résoudre $\nabla J(u) = 0$	171
5.7	Méthode de Newton pour $\nabla J(u) = 0$: convergence	172
5.8	Étude d'un exemple d'application	175
5.9	Résultats numériques	179
5.10	Conclusion	198

Introduction générale

Le travail de recherche présenté dans ce mémoire a été réalisé au sein de l'équipe Équations aux Dérivées Partielles du Laboratoire de Modélisation et Calcul, et dans le cadre du projet IDOPT ("IDentification, OPTimisation et Simulation Numérique en Physique et en Environnement"), projet commun CNRS-INPG-UJF-INRIA. Ce travail a été soutenu par ailleurs par le projet européen ANFAS, l'INRIA à travers les actions CARI, AIRE Développement à travers l'équipe Calcul parallèle de l'Université de Yaoundé 1 et la Mission Française de Coopération et d'Action Culturelle de Yaoundé. Il porte sur les problèmes inverses utilisant les techniques de contrôle optimal, avec comme application l'identification des paramètres hydrodynamiques sur les modèles d'écoulements en milieu poreux non-saturé.

Problématique

L'essentiel des transferts assurant le renouvellement et/ou la dégradation des ressources en eaux souterraines se fait à travers les sols et la zone non-saturée de l'aquifère. Cette interface entre l'atmosphère et la ressource «eau souterraine» est une zone très active d'un point de vue hydrique, physico-chimique et biologique. Les transferts peuvent être des retours à l'atmosphère (prélèvement d'eau et de solutés par les plantes, dégradation biologique, ...) ou des infiltrations vers les nappes à surface libre.

Le processus physique de l'eau pénétrant dans le sol à partir de sa surface est généralement connu sous le nom d'infiltration. L'infiltration est une composante primordiale dans le cycle hydrologique. Il y a un lien étroit entre la quantité d'eau infiltrée dans le sol et son processus de redistribution dans les zones non-saturées. Cette redistribution d'eau dépend des conditions d'humidité, de la pression d'eau et de la perméabilité en zone non-saturée.

Cet écoulement de l'eau dans le sol est caractérisé par des paramètres qui prennent en compte le type de sol (paramètres hydrodynamiques), la condition initiale et les conditions aux limites du sol considéré au travers des modèles numériques (lois de conservation et de comportement).

Or ces paramètres et ces conditions aux limites nécessaires à la mise en œuvre de ces modèles sont, dans la plupart des cas, très peu connus car le complexe sol-eau ne présente pas de propriétés et de conditions d'équilibre stables. Ceci est dû à sa très grande variabilité spatio-temporelle.

Méthodologie

L'assimilation variationnelle de données est une technique qui permet de déterminer des paramètres inconnus dans un modèle en combinant des informations sur les observations et la dynamique du modèle afin que les paramètres identifiés permettent au comportement du système de s'accorder avec les observations. Le principe des méthodes variationnelles qui repose sur la technique de contrôle optimal des systèmes gouvernés par les équations aux dérivées partielles [60], est d'introduire une fonctionnelle (fonction coût) dépendant des paramètres de contrôle et de la minimiser en cherchant les valeurs optimales de ceux-ci dans un espace de contrôles admissibles. Dans la plupart des cas, cette fonctionnelle est choisie (au sens des moindres carrés) comme étant l'écart quadratique entre les champs analysés (prévision du modèle) et les mesures expérimentales (observations). Les valeurs optimales des paramètres inconnus de cette fonctionnelle peuvent être trouvées en utilisant une méthode d'optimisation sans contraintes qui nécessite la connaissance du gradient de la fonction coût par rapport aux paramètres de contrôle. La méthode de contrôle optimal est plus pratique et plus efficace et permet d'éviter la très large demande en calcul et en stockage qu'aurait demandé une différentiation numérique, particulièrement pour les systèmes possédant un très grand nombre de paramètres. Une analyse diagnostique (qualitative et quantitative) du processus d'assimilation variationnelle notamment en ce qui concerne l'influence du bruit sur les observations sur le processus d'assimilation et sa propagation sur les paramètres identifiés ou l'influence de la configuration spatio-temporelle des données récoltées *in situ* passe par des études au second ordre [104, 43]. La résolution du problème de contrôle optimal passe par l'étape de calcul du gradient et l'analyse diagnostique par les études au second ordre. Cette démarche passe nécessairement par le calcul des dérivées premières et secondes de la fonction coût. Le calcul des dérivées par rapport aux paramètres de contrôle étant fastidieuse et sources d'innombrables erreurs, nous avons utilisé le générateur automatique de codes *Odyssee* opérant en mode direct et inverse sur les codes écrits en Fortran à partir d'une approximation discrète de la fonction coût et du modèle direct.

Application aux modèles d'écoulement

Le formalisme variationnel introduit pour la première fois par Sasaki [90] dans le contexte des modèles d'écoulement, a depuis connu un développement considérable tant du point de vue formel que du point de vue algorithmique. L'abondante littérature sur les résultats obtenus par différents auteurs à ce sujet en témoigne. En milieu non-saturé cette recherche se base sur le travail des météorologues (et plus récemment des océanographes) jouissant d'une plus grande expérience dans le domaine. Les différentes méthodes d'estimation des paramètres hydrodynamiques sur les modèles d'écoulements en milieu poreux (des mesures *in situ*, des essais au laboratoire sur un échantillon remanié), se voient donc ainsi être remplacées par cette démarche que les physiciens dénomment calage ou étalonnage de modèles. Les travaux de Chavent [12, 13, 11] en sont des précurseurs. Cette dernière décennie a vu une application

sans cesse croissante des problèmes inverses dans les milieux poreux non-saturés. Les possibilités offertes par cette approche sont nombreuses et son utilisation est devenue fréquente pour l'estimation des paramètres dans les modèles hydrologiques. Dans notre contexte, la fonctionnelle coût définie mesure les écarts au sens des moindres carrés, qui existe entre l'infiltration cumulée calculée et l'infiltration cumulée mesurée. Le problème de contrôle optimal consistant à déterminer le jeu de paramètres ajustant «au mieux» ces deux infiltrations cumulées.

Organisation du mémoire

Le présent mémoire est organisé autour de cinq chapitres. Nous commençons par regardé l'aspect physique afin de définir notre modèle hydrologique d'infiltration. L'équation aux dérivées partielles de type parabolique quasilinéaire qui en dérive est résolue en suivant la méthodologie développée dans [12] et plus généralement dans [82, 62]. Cette résolution mathématique est suivie d'une résolution numérique. Dans un second chapitre, nous définissons le problème d'identification en milieu poreux non-saturé, ensuite, nous présentons dans un cadre plus général le principe de l'assimilation variationnelle de données en utilisant la technique de contrôle optimal avec comme paramètres de contrôle : la condition initiale, les conditions aux limites et un paramètre général. Ceci sera utilisé pour définir le système d'optimalité dans le cadre continu et discret de notre problème d'identification. Des séries d'expériences numériques utilisant d'une part les données synthétiques non-bruitées (infiltrations cumulées) distribuées selon plusieurs configurations temporelles, d'autre part des données de terrain (réalistes) sont effectuées dans un premier temps sans pénalisation de la fonction coût et dans un second temps avec pénalisation. La qualité d'une «bonne» identification est non seulement liée au modèle, mais aussi à la qualité des données. Or l'acquisition des données *in situ* est en général entachée d'erreurs. Il apparaît de façon naturelle après la phase d'identification de réaliser au sein du chapitre trois les études de sensibilités utilisant les équations adjointes. Ces études des sensibilités basées sur le calcul du Hessien de la fonction coût (produit du Hessien par un vecteur) et son inversion (analyse au second ordre) se font en suivant la démarche proposée dans [81, 26], avec en toile de fond un essai de déterminer non seulement l'impact éventuel d'une erreur de mesure des observations sur les paramètres identifiés mais aussi de quantifier les données les plus importantes à observer dans le processus d'identification. Dans le quatrième chapitre, en nous servant des progrès sans cesse croissants de la différentiation automatique, nous reprenons les études réalisées aux chapitres deux et trois en nous servant des techniques permettant d'obtenir des dérivées exactes (aux erreurs d'arrondi près) d'une fonction représentée par un programme informatique : le différentiateur *Odysée* opérant sur les codes écrit en Fortran a été utilisé. Dans la dernière partie, nous présentons une application des méthodes de Newton en assimilation variationnelle de données [28], avec des expériences numériques sur le modèle hydrologique d'infiltration en zone non-saturée, le paramètre de contrôle étant réduit à la condition initiale.

Chapitre 1

Mathématiques pour les milieux poreux

Plan du chapitre

1.1	Introduction	8
1.2	Définition du milieu poreux	8
1.3	Hydrodynamique du milieu poreux	8
1.3.1	La loi empirique de Darcy	8
1.3.2	Équation de continuité	9
1.3.3	Equation des écoulements en milieu non-saturé : équation de Richards (1931)	10
1.3.4	Les fonctionnelles $K(\theta)$ et $\theta(h)$	10
1.4	Modèle direct : aspects mathématiques	15
1.4.1	Formulation du problème	15
1.4.2	Résolution du problème pour les conditions initiale et aux limites données	16
1.4.3	Formulation du problème en terme d'opérateurs	18
1.4.4	Existence et unicité	19
1.4.5	Conclusion	21
1.5	Résolution numérique de l'équation de l'hydrodynamique en milieu poreux non-saturé	22
1.5.1	Introduction	22
1.5.2	L'équation de l'hydrodynamique	22
1.5.3	Solution numérique de l'équation de l'hydrodynamique	24
1.5.4	La méthode de Picard appliquée à la forme h	26
1.5.5	Remarque (forme $\theta-h$)	27
1.6	Résultats numériques	28
1.7	Conclusion	30

1.1 Introduction

Nous présentons dans ce chapitre la physique liée à notre problématique. Cet aspect physique nous conduira à un modèle hydrodynamique régissant les écoulements en milieux poreux non-saturés : modèle direct. Ainsi, plusieurs formulations des équations sont décrites : formulation en terme de pression en eau du sol, formulation en terme de teneur en eau du sol et formulation mixte pression-teneur en eau du sol. Toutes ces formulations sont mathématiquement équivalentes la seule différence se situant (pour certaines) sur le plan de la conservation de la masse [7]. De façon générale, les équations de l'hydrodynamique caractérisant les écoulements en milieu poreux non-saturés obtenues, sont des équations aux dérivées partielles non-linéaires de type parabolique quasilinéaire et nous présentons une résolution dans des espaces fonctionnels convexes. Ce travail est suivi de quelques expériences numériques utilisant des paramètres hydrodynamiques d'un sable de Grenoble.

1.2 Définition du milieu poreux

Le sol est un système hétérogène complexe composé de trois phases : la phase liquide représentée par l'eau du sol, la phase gazeuse par l'air et la phase solide par les particules du sol, Hillel [50]. L'essentiel des transferts de masses conduisant à l'évapotranspiration, à la redistribution et à l'infiltration se fait dans la zone du sol constituée des couches superficielles. Cette zone est appelée *zone non-saturée*. Les constituants élémentaires du sol sont des particules solides dont la répartition en différentes classes de taille (argile, sable, limon, gravier) permet de définir la texture sol et sert de base à la classification des sols.

1.3 Hydrodynamique du milieu poreux

1.3.1 La loi empirique de Darcy

La loi de Darcy permet de décrire les écoulements dans un milieu poreux saturé : elle exprime la proportionnalité entre le flux d'eau, ou vitesse de filtration q traversant une colonne et le gradient de charge hydraulique (c.f. [58]) :

$$q = -K \frac{\rho g}{\mu} \nabla \left(\frac{P}{\rho g} - z \right),$$

relation dans laquelle :

q est la densité de flux volumique (LT^{-1}),

K est la perméabilité du milieu poreux, indépendant du fluide (L^2),

P est la pression de l'eau dans le sol ($ML^{-1}T^{-2}$),

μ est la viscosité dynamique de l'eau (MLT^{-1})

ρ est la masse volumique de l'eau (ML^{-3}),

g est l'accélération de la pesanteur (LT^{-2}),

z est la profondeur (orientée vers le bas) (L).

La loi de Darcy, bien que conçue à l'origine pour les écoulements en milieu saturé, fut étendue par Richards en 1931 (c.f. [88]) à l'écoulement en sol non-saturé en stipulant que la constante de proportionnalité K appelée conductivité hydraulique est fonction de la teneur en eau du sol :

$$q = K(\theta) \cdot \nabla (h - z),$$

où

$\theta = \frac{V_w}{V_t}$: la teneur en eau volumique du sol ($L^3 L^{-3}$), avec V_w volume d'eau dans le sol et V_t volume total du sol considéré.

$K(\theta) = K \cdot K_{rw}(\theta) \frac{\rho g}{\mu}$: la conductivité hydraulique (LT^{-1}) et $K_{rw}(\theta)$ la perméabilité relative.

$h = \frac{P}{\rho g}$: la pression effective de l'eau (L).

On peut également l'exprimer sous forme de la pression en eau du sol sous la forme :

$$q = K(h) \cdot \nabla (H)$$

$H = h - z$ est la charge piézométrique, z représente la cote considérée.

L'expression de la conductivité hydraulique en fonction de la teneur en eau θ ou en terme de pression h est complexe et dépend du type de sol considéré (voir figure 1.1) suivant ses caractéristiques structurales et texturales (Hillel [50]).

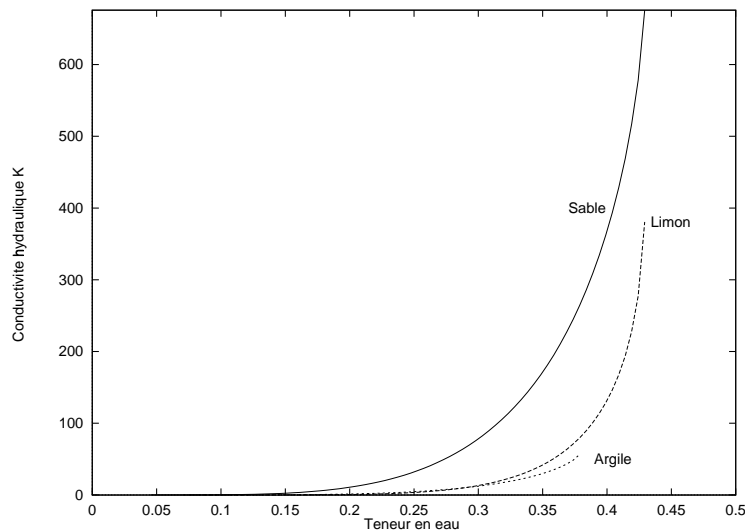


FIG. 1.1 – Courbes $K(\theta)$ pour trois types de sols différents

1.3.2 Équation de continuité

La loi de Darcy, à elle seule, ne suffit pas à décrire l'équation générale de l'écoulement. Il faut pour cela, utiliser l'équation dite de continuité qui exprime la conservation

de la masse d'eau dans une volume élémentaire représentatif du sol et qui s'écrit en supposant l'indéformabilité du milieu (masse volumique constante) et la masse volumique de l'eau également constante sous la forme :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\nabla \cdot q$$

Cette équation exprime la correspondance entre la variabilité spatiale du flux et la variabilité temporelle de la teneur en eau.

1.3.3 Equation des écoulements en milieu non-saturé : équation de Richards (1931)

L'équation générale des écoulements en milieu poreux non-saturé résulte de la combinaison de la loi de Darcy généralisée en milieu non-saturé et de l'équation dite de continuité. Diverses formulations de cette équation sont possibles selon la variable d'état considérée à savoir, la pression $h(L)$ ou la teneur en eau $\theta (L^3.L^{-3})$. Cette équation plus connue sous le nom d'équation de Richards depuis 1931, s'exprime comme suit :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla [K(\theta)\nabla H] \quad (1.1)$$

où

θ est la teneur en eau du sol ($L^3.L^{-3}$)

H : est la charge piézométrique ($H = h - z$) (L) avec h la pression effective de l'eau du sol.

$K(\theta)$ est la conductivité hydraulique ($L.T^{-1}$)

L'équation aux dérivées partielles (1.1) est associée aux conditions suivantes :

- des conditions aux limites du domaine d'étude de type Dirichlet (pressions imposées), de type Neumann (flux imposées) ou de type Fourier (conditions mixtes) ;
- des conditions initiales en pressions h ou en teneur en eau θ .

A cause de la non-linéarité de ces équations, il est pratiquement impossible d'avoir une solution analytique (excepté dans certains cas particuliers). Par conséquent, les méthodes numériques sont largement utilisées pour résoudre l'équation de l'écoulement en milieu poreux non-saturé.

1.3.4 Les fonctionnelles $K(\theta)$ et $\theta(h)$

Relations $\theta(h)$

Pour résoudre l'équation (1.1), il est nécessaire de connaître la courbe de rétention $\theta(h)$. Cette fonctionnelle relie la teneur en eau du sol $\theta(h)$ et la pression h . Il faut aussi définir l'expression de la conductivité hydraulique K en fonction de la teneur en eau $\theta(h)$.

Ces relations caractérisant le milieu poreux sont très difficiles d'accès. De plus, la relation entre la teneur en eau et la pression ne peut être unique en raison de l'hystérèse,

dont une description plus détaillée est donnée par Hillel [50], Philip [85].

Plusieurs relations ont été proposées pour décrire la courbe de rétention des sols. Parmi ces relations, les plus utilisées sont celle de Brooks et Corey 1964 [5] et celle de Van Genuchten 1980 [37]. La formulation de Brooks et Corey donne la relation entre la teneur en eau et la pression à travers l'expression suivante :

$$\theta = \begin{cases} \theta_r + (\theta_s - \theta_r)(\alpha h)^{-\lambda} & \text{si } \alpha h > 1 \\ \theta_s & \text{si } \alpha h \leq 1 \end{cases} \quad (1.2)$$

θ_r et θ_s représentent respectivement la teneur en eau résiduelle et la teneur en eau à saturation naturelle, α est un paramètre empirique. En utilisant la teneur en eau réduite S_e , ou encore le taux de saturation donné par l'expression suivante :

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}, \quad (1.3)$$

l'équation (1.2) devient :

$$S_e = \begin{cases} (\alpha)^{-\lambda} & \text{si } \alpha h > 1 \\ 1 & \text{si } \alpha h \leq 1 \end{cases} \quad (1.4)$$

La simplicité de cette équation fait qu'elle est souvent utilisée dans les modèles numériques d'étude des milieux non-saturés.

La relation de Van Genuchten [37] permet de mieux décrire la courbe de rétention pour des valeurs de la teneur en eau proche de la saturation et de bien reproduire les formes de courbes que sont susceptibles de restituer les autres méthodes.

L'équation est donnée en considérant le taux de saturation (1.3) par la relation suivante :

$$S_e = \frac{1}{[1 + (\alpha h)]^m}, \quad (1.5)$$

m , λ et α sont des constantes empiriques qui déterminent la forme de la courbe de rétention. Avec la simplification proposée par Van Genuchten $m = 1 - \frac{1}{n}$, cette équation est utilisée dans la relation de Mualem (1976) [72] donnant la conductivité hydraulique.

Relations $K(\theta)$

Etant donné qu'une estimation de la courbe de conductivité hydraulique $K(\theta)$ est plus difficile à obtenir expérimentalement que celle de la courbe de rétention $h(\theta)$ (c.f. [58]), différents auteurs ont proposé des formulations mathématiques pour obtenir des conductivités à partir de la courbe de rétention. Parmi celles-ci, nous présentons le modèle de Mualem 1976. Il donne la conductivité hydraulique à partir du taux de saturation par la relation suivante :

$$K(S_e) = k_s S_e^l \left[\frac{f(S_e)}{f(1)} \right]^2, \quad (1.6)$$

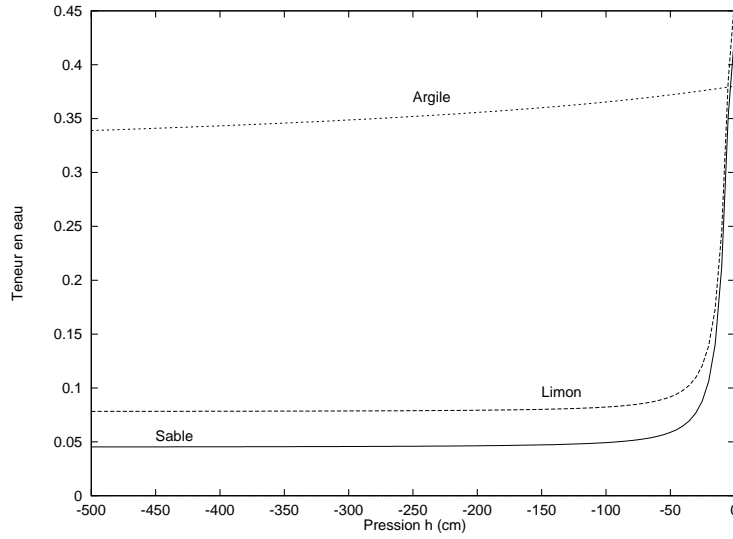


FIG. 1.2 – Teneur en eau en fonction de la pression h pour différents types de sol

avec

$$f(x) = \int_0^x \frac{1}{h(x)},$$

l représente la connectivité des pores. l a été estimé par Mualem à $\frac{1}{2}$ après une moyenne faite sur plusieurs échantillons de sols.

Après intégration et en supposant que $m = 1 - \frac{1}{n}$ (Van Genuchten 1980), la conductivité hydraulique est donnée par la relation suivante :

$$K(S_e) = k_s S_e^l \left[1 - \left(1 - S_e^{\frac{1}{m}} \right)^m \right]^2. \quad (1.7)$$

En terme de pression cette équation s'écrit :

$$K(h) = k_s \frac{\left[1 - (\alpha h)^{mn} [1 + (\alpha h)^n]^{-m} \right]^2}{[1 + (\alpha h)^n]^{ml}}. \quad (1.8)$$

En utilisant les relations de Brooks et Corey [5], l'expression de la conductivité hydraulique est donnée par

$$K(S_e) = K_s S_e^{l+2+\frac{2}{\lambda}}, \quad (1.9)$$

ou en terme de pression avec $\alpha h > 1$:

$$K(h) = \frac{K_s}{(\alpha h)^{\lambda(l+2)+2}}. \quad (1.10)$$

Les courbes de conductivités hydrauliques $K(\theta)$ reposent sur l'ajustement des valeurs expérimentales et sur les lois mathématiques empiriques. Ceci concerne également

la relation $h(\theta)$.

Différents modèles ont été déjà décrits plus haut. Dans la suite de notre étude, notre choix sera porté sur le modèle de Mualem-Van Genuchten :

- courbe de rétention :

$$\theta(h) = \begin{cases} \theta_r + (\theta_s - \theta_r) \left(1 + \left(\frac{h}{h_g}\right)^n\right)^{1-\frac{1}{n}} & \text{si } h < 0 \\ \theta_s & \text{si } h \geq 0 \end{cases} \quad (1.11)$$

- la conductivité hydraulique :

$$K(\theta) = K_s \left(\frac{\theta - \theta_s}{\theta_s - \theta_r}\right)^\eta \quad (1.12)$$

Nous en déduisons l'expression de la capacité capillaire donnée par la relation suivante :

$$C(h) = \begin{cases} \frac{(\theta_s - \theta_r)}{h_g} \left(\frac{h}{h_g}\right)^{n-1} \left(1 + \left(\frac{h}{h_g}\right)^n\right)^{\frac{1}{n}-1} & \text{si } h < 0 \\ 0 & \text{si } h \geq 0 \end{cases}$$

Dans ces relations, h_g (L^{-1}) est le paramètre d'échelle de Van Genuchten 1980 [37]. η et n sont des paramètres de forme adimensionnels

D'après Haverkamp et al [45], les paramètres de forme η et n sont fortement liés à la texture du sol alors que les paramètres hydrodynamiques K_s , θ_s , θ_r , h_g sont eux fortement liés à la structure du sol.

Ici, le nombre total de paramètres est de 6 : $(K_s, \theta_s, \theta_r, h_g, n, \eta)$.

Ce type de modèle a été utilisé par Haverkamp et al [47] pour comparer différentes techniques de résolution numériques de l'équation de Richards et par Hills et al [51] pour étudier l'écoulement de l'eau dans des sols très secs.

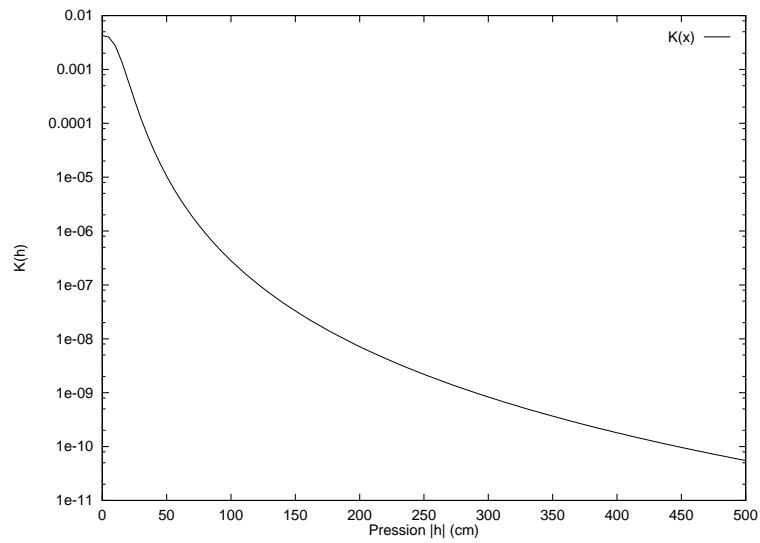


FIG. 1.3 – Allure de la relation conductivité hydraulique-pression : paramètres *Grenoble Sand*

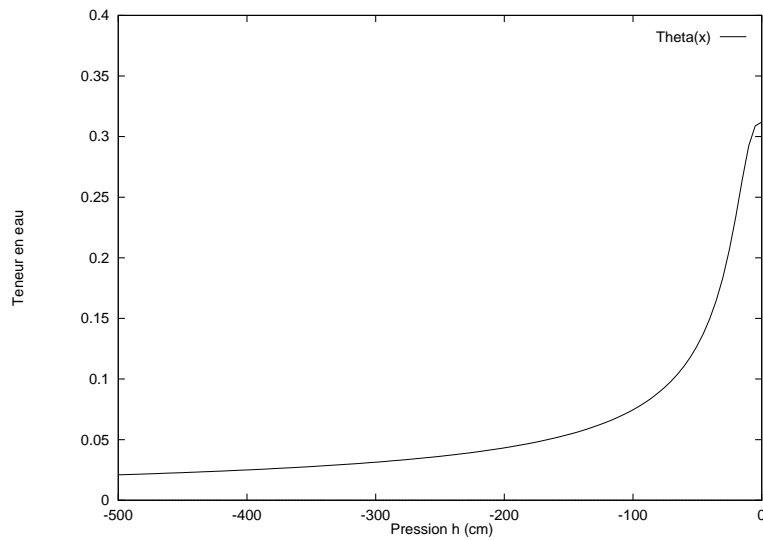


FIG. 1.4 – Allure de la relation pression-teneur en eau pour : Paramètres *Grenoble Sand*

1.4 Modèle direct : aspects mathématiques

L'objectif de ce paragraphe est de présenter le modèle direct ainsi qu'une approche de résolution. C'est un problème quasilineaire dont la prescription des conditions initiale et aux limites dans un espace fonctionnel convenable permet sa résolution. Pour ce faire, nous nous servirons des méthodes développées par Lions [61] et reprises par Chavent et Lemonnier [12].

1.4.1 Formulation du problème

L'écoulement de l'eau dans le sol dans la direction horizontale n'est pas considéré. Ainsi, le modèle monodimensionnel est en $z - t$ et est gouverné par l'équation parabolique quasilineaire [59] :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} \right] - \frac{\partial K(\theta)}{\partial z} \quad (t, z) \in \Omega = [0, T] \times [0, Z] \quad (1.13)$$

avec les coefficients non-linéaires

$$\begin{cases} D(\theta) = -\frac{b\Phi_s K_s}{\theta_s} \left(\frac{\theta}{\theta_s} \right)^{b+2} \\ K(\theta) = K_s \left(\frac{\theta}{\theta_s} \right)^{2b+3} \end{cases} \quad (1.14)$$

où $\theta = \theta(t, z)$ est la teneur en eau, z est la coordonnée verticale orientée positivement vers le bas (voire figure (1.5)) et la profondeur de sol considérée est Z , t est le temps.

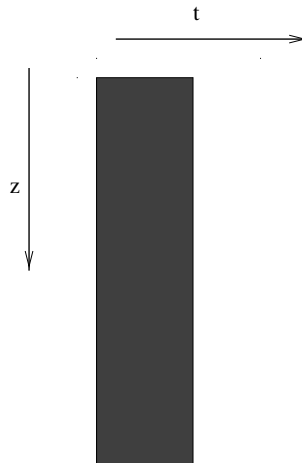


FIG. 1.5 – Colonne de sol

Les fonctions $D(\theta)$ et $K(\theta)$ sont respectivement, le coefficient de diffusion et la conductivité hydraulique [72]. Φ_s, K_s, θ_s correspondent respectivement au potentiel du sol à saturation, à la conductivité hydraulique à saturation et à la teneur en eau à saturation. $K_s, \theta_s > 0$, $\Phi_s < 0$, $b > 0$ est un paramètre lié au sol considéré.

Les coefficients $D(\theta)$ et $K(\theta)$ peuvent aussi être définis par une autre formule, par exemple [59] :

$$D(\theta) = D_0 \exp(-\beta(\theta_0 - \theta)), \quad ; \quad ; K(\theta) = K_s \exp(-\beta(\theta_s - \theta)), \quad \beta > 0.$$

La condition initiale est :

$$t = 0, \quad 0 \leq z \leq Z, \quad \theta(0, z) = \theta_0(z) \quad (1.15)$$

et les conditions aux limites :

$$\begin{aligned} t > 0, \quad z = 0, \quad ; D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} &= E_p, \quad \text{si } \theta \geq \theta_k \\ t > 0, \quad z = 0, \quad ; D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} &= \frac{\theta}{\theta_k} E_p, \quad \text{si } 0 < \theta < \theta_k \\ t > 0, \quad z = Z, \quad \theta(t, L) &= \theta_1(t) \end{aligned} \quad (1.16)$$

où E_p est le potentiel d'évaporation contrôlé par les conditions d'air, θ_k est un paramètre qui donne la possibilité des sols à la rétention d'eau. Il est plus petit que le taux d'humidité à saturation. En physique, quand $\theta \geq \theta_k$, cela signifie que le sol est assez humide, ainsi l'évaporation est entièrement contrôlée par l'air. Quand $\theta < \theta_k$, l'humidité du sol devient un facteur qui influence sur l'évaporation. Dans cette phase, l'évaporation peut être rattachée à l'humidité.

Remarque 1.1 *Les coefficients D et K peuvent être donnés par d'autres formules, par exemple Van Genuchten [37]. Plus généralement, en utilisant le coefficient de diffusivité, on peut également (voir paragraphe 1.5.2) obtenir une forme en pression en eau, ou la forme mixte pression-teneur en eau.*

1.4.2 Résolution du problème pour les conditions initiale et aux limites données

Nous allons considérer de manière générale le problème quasilinear parabolique monodimensionnel de la forme suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \theta}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left[D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} \right] - \frac{\partial K(\theta)}{\partial z} = f(t, z) \quad (t, z) \in \Omega = [0, T] \times [0, Z] \\ \left(D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} - K(\theta) \right) \Big|_{z=0} = 0 \\ \left(D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} - K(\theta) \right) \Big|_{z=Z} = 0 \\ \theta(0, z) = \theta_0(z) \end{array} \right. \quad (1.17)$$

où $\theta = \theta(t, z)$ est la fonction inconnue, les coefficients $D = D(\theta)$, $K = K(\theta)$, et les fonctions $f(t, z)$, $q_0(t)$, $q_1(t)$ ($q_0(t)$, $q_1(t)$ étant les flux de drainage net) sont supposées connues pour $t \in [0, T]$, $z \in [0, Z]$, $T, Z \in \mathbb{R}_*^+$.

La résolution et les propriétés de régularité des problèmes quasilineaires paraboliques ont été traités par plusieurs auteurs. Nous pouvons citer de façon non exhaustive Ladyzenskaya et al [82], Lions et Magenes [62], Henry [49], Lions [61]. Les résultats sur l'existence et l'unicité de la solution faible des équations paraboliques quasilineaires de forme générale sont donnés dans [82].

Remarque 1.2 *Le choix des conditions aux limites de type Neumann est fait pour des raisons de simplicités. On aurait pu également choisir des conditions aux limites de type Dirichlet $\theta(t, 0) = \theta_0(z)$ à la limite supérieure du domaine et $\theta(t, Z) = \theta_0(z)$ à la limite inférieure du domaine d'étude ou des conditions aux limites de type mixtes [28].*

Comme nous l'annonçons dans le résumé de ce chapitre, nous allons considérer l'équation parabolique quasilineaire de forme générale (1.17) avec les coefficients $D(\theta)$, $K(\theta)$ fonctions de la solution, et avec des conditions aux limites non-linéaires pour $z = 0$ et $z = Z$. La formulation générale du problème est considérée. L'existence et l'unicité de la solution sont prouvées dans une classe spécifique d'espaces fonctionnels en suivant la démarche proposée dans [12].

Nous allons à présent, mener une investigation du problème (1.17). Pour introduire la formulation généralisée de ce problème et sa formulation en terme d'opérateurs, introduisons les espaces fonctionnels suivants :

$H = L^2([0, Z])$ l'espace des fonctions à valeurs réelles de carré intégrable sur $[0, Z]$ Soit Y l'espace de Hilbert $H^1([0, Z])$ vérifiant :

$$H_0^1([0, Z]) \subset Y \subset H \tag{1.18}$$

Ce choix de Y est fait pour résoudre de façon générale le problème (1.17) avec des conditions de Dirichlet ou un problème intermédiaire.

On notera dans la suite par $\|\cdot\|_{\mathcal{O}}$ et par $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{O}}$ la norme et le produit scalaire dans l'espace \mathcal{O} , \mathcal{O} correspondant à l'un des espaces définis ci-dessus.

On rappelle que (voir [61, 12]) :

$$\langle u, v \rangle_{Y'} = \langle \Lambda_Y^{-1} u, \Lambda_Y^{-1} v \rangle_Y, \quad \forall u, v \in Y \tag{1.19}$$

où Λ_Y est l'isomorphisme canonique de Y dans Y' défini par :

$$\forall v \in Y, \Lambda_Y v \in Y' \text{ est défini par } \langle \Lambda_Y v, u \rangle_{Y', Y} = \langle v, u \rangle_Y \quad \forall u \in Y. \tag{1.20}$$

On identifiera enfin Y à une partie de H et à son dual H' , et on aura la situation suivante :

$$Y \subset H \subset Y' \tag{1.21}$$

1.4.3 Formulation du problème en terme d'opérateurs

Définissons à présent $A : Y \longrightarrow Y'$ un opérateur non-linéaire par :

$$\left\{ a(v, w) = \langle A(v), w \rangle_H = \int_0^Z \left[D(\theta) \frac{\partial v}{\partial z} \cdot \frac{\partial w}{\partial z} - K(\theta) \frac{\partial w}{\partial z} \right] dz \quad \forall v, w \in Y \quad (1.22) \right.$$

Nous ferons l'hypothèse suivante dans la suite :

Hypothèse 1.1 (H1) *Les fonctions $D(\theta)$ et $K(\theta)$ de $\mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ sont continues, bornées et vérifient :*

$$\left\{ \begin{array}{l} \exists \alpha_1, \alpha_2, M_1, M_2 > 0 \text{ tels que } 0 \leq \alpha_1 < D(\theta) < M_1, \quad 0 \leq \alpha_2 < K(\theta) < M_2, \\ \text{presque partout dans } \mathbb{R} \end{array} \right. \quad (1.23)$$

Remarque 1.3

- (i) *Cette hypothèse n'est pas restrictive, en réalité, la conductivité hydraulique et le coefficient de diffusivité sont des fonctions continues positives et bornées de la variable θ indépendamment du type de sol considéré, c'est-à-dire du choix des paramètres hydrodynamiques.*
- (ii) *La fonction a est une fonction scalaire et est en réalité fonction du coefficient de diffusivité $D(\theta)$ et de la conductivité hydraulique $K(\theta)$ et on confondra simultanément cette fonction à l'application de $Y \times Y \longrightarrow \mathbb{R}$*

Supposons que :

$$f \in L^2(0, T; H) \quad \theta_0 \in L^2([0, Z]) = H \quad (1.24)$$

On considère alors l'équation non-linéaire suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \left\langle \frac{d\theta}{dt}(t), w \right\rangle_H + a(\theta(t), w) = \langle f(t), w \rangle_H \quad \forall w \in Y, \text{ pp sur } [0, T] \\ \theta(0) = \theta_0 \end{array} \right. \quad (1.25)$$

Nous avons le théorème suivant :

Théorème 1.1 *Sous l'hypothèse (H1) et avec les notations qui précèdent, le problème (1.25) admet une solution unique qui vérifie :*

$$\theta \in L^2(0, T; Y) \cap L^2(0, T; H) \quad (1.26)$$

$$\frac{d\theta}{dt} \in L^2(0, T; Y') \quad (1.27)$$

1.4.4 Existence et unicité

La démonstration du théorème 1.1 est fournie dans [12] dans un cadre plus général, cependant nous verrons en reprenant les grandes lignes de celle-ci, qu'elle s'adapte bien à notre considération.

Existence et unicité de la solution du problème 1.25

On se donne une base w_1, \dots, w_m, \dots de Y vérifiant :

$$\langle w_j, v \rangle_Y = \lambda_j \langle w_j, v \rangle_H \quad \forall v \in Y,$$

ce qui permet de définir le problème approché dans $[w_1, \dots, w_m]$ par :

$$\begin{cases} \left\langle \frac{d\theta_m}{dt}, w_j \right\rangle_H + a(\theta_m, w_j) = \langle f, w_j \rangle_H & j = 1, 2, \dots, m \quad t \in [0, T] \\ \theta_m(0) = \theta_{0m}, \quad \theta_{0m} \longrightarrow \theta_0 \text{ dans } L^2([0, Z]) \text{ lorsque } m \longrightarrow +\infty \end{cases} \quad (1.28)$$

Ce système d'équations différentielles non-linéaires admet une solution locale θ_m pour $t \in [0, T_f]$ avec $T_f \leq T$.

Etape 1 : Estimations a priori

Les estimations a priori sont indispensables à la résolution du problème (1.25). Les trois estimations ci-dessous, permettront de justifier le passage à la limite.

i) Il existe une constante C tel que

$$\begin{cases} \|\theta_m\|_{L^2(0, T_f; Y)} \leq C \\ \|\theta_m\|_{L^\infty(0, T_f; Y)} \leq C \end{cases} \quad (1.29)$$

ii) A est un opérateur borné de Y dans $L^2(0, T; Y')$ et de plus, on a :

$$\left\| \frac{d\theta_m}{dt} \right\|_{L^2(0, T; Y')} \leq C \quad (1.30)$$

iii) On définit ensuite les fonctions

$$\beta_1(\zeta) = \int_0^\zeta D(\eta) d\eta \quad \text{et} \quad \beta_2(\zeta) = \int_0^\zeta K(\eta) d\eta \quad \forall \zeta \in \mathbb{R}$$

primitives de D et K respectivement s'annulant en 0.

Alors les fonctions β_1, β_2 sont continues de $\mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ et vérifient respectivement les relations :

$$\begin{cases} \|\beta_1(\theta_m)\|_{L^2(0, T; Y)} \leq C \\ \|\beta_2(\theta_m)\|_{L^2(0, T; Y)} \leq C \end{cases} \quad (1.31)$$

Ce résultat se déduit facilement de l'hypothèse (1.23) et de la majoration (1.29).

Etape 2 : Existence de la solution du problème 1.25

Des estimations a priori fournies par les relations (1.29), (1.30) et (1.31) précédentes, on déduit l'existence d'une sous suite θ_ν de la suite θ_m telle que :

$$\theta_\nu \longrightarrow \theta \text{ dans } L^2(0, T; Y) \text{ faible} \quad (1.32)$$

$$\frac{d\theta_\nu}{dt} \longrightarrow \frac{d\theta}{dt} \text{ dans } L^2(0, T; Y') \text{ faible} \quad (1.33)$$

$$\theta_\nu \longrightarrow \theta \text{ dans } L^2(\Omega) \text{ fort et presque partout} \quad (1.34)$$

$$\beta_1(\theta_\nu) \longrightarrow \chi_1, \quad \beta_2(\theta_\nu) \longrightarrow \chi_2 \text{ dans } L^2(0, T; Y) \text{ faible} \quad (1.35)$$

de (1.34), (1.35) et du fait que les fonctions β_j , $j = 1, 2$ sont continues par rapport à θ , il en résulte que

$$\beta_1(\theta) = \chi_1 \text{ et } \beta_2(\theta) = \chi_2 \quad (1.36)$$

et on peut passer à la limite dans l'équation (1.28). D'où l'existence d'une solution à l'équation (1.25).

Etape 3 : Unicité

Pour prouver l'unicité de la solution de l'équation (1.25), on considère deux solutions θ_1 et θ_2 . En posant

$$w = \theta_1 - \theta_2, \quad (1.37)$$

on déduit de l'équation (1.25) que cette différence vérifie :

$$\begin{cases} \left\langle \frac{dw}{dt}(t), v \right\rangle_H + \langle A(\theta_1(t)) - A(\theta_2(t)), v \rangle_H = 0 \quad \forall v \in Y, \text{ pp sur } [0, T] \\ w(0) = 0 \end{cases} \quad (1.38)$$

En prenant dans (1.38) $v = \Lambda_Y^{-1}w(t)$, il vient

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle w(t), w(t) \rangle_{Y'} + \langle A(\theta_1(t)) - A(\theta_2(t)), \Lambda_Y^{-1}.w(t) \rangle_H = 0 \\ w(0) = 0 \end{cases} \quad (1.39)$$

compte tenu de la définition (1.22) de l'opérateur A et de (1.19), la relation (1.39) se réécrit :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle w(t), w(t) \rangle_{Y'} &+ \int_0^Z (\beta_1(\theta_1) - \beta_1(\theta_2)) (\theta_1 - \theta_2) dz \\ &- \int_0^Z (\beta_2(\theta_1) - \beta_2(\theta_2)) (\theta_1 - \theta_2) dz \\ &= \int_0^Z ((\beta_1 - \beta_2)(\theta_1) + (\beta_2 - \beta_1)(\theta_2)) (\theta_1 - \theta_2) v dt \end{aligned} \quad (1.40)$$

Grâce à l'hypothèse (1.23), on déduit que :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle w(t), w(t) \rangle_{Y'} + \alpha_1 \int_0^Z |\theta_1 - \theta_2|_H^2 dz + \alpha_2 \int_0^Z |\theta_1 - \theta_2|_H^2 dz &\leq \\ &\leq (M_1 + M_2) \int_0^Z |\theta_1 - \theta_2|_H |v|_H dz \end{aligned}$$

d'où

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle w(t), w(t) \rangle_{Y'} + \frac{\alpha_1}{2} \int_0^Z |\theta_1 - \theta_2|_H^2 dz + \frac{\alpha_2}{2} \int_0^Z |\theta_1 - \theta_2|_H^2 dz &\leq \\ &\leq \frac{M^2}{2\alpha} |v|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\leq \frac{M^2}{2\alpha} \langle w(t), w(t) \rangle_{Y'} \end{aligned}$$

$$w(0) = 0$$

où $M = M_1 + M_2$ et $\alpha = \alpha_1 + \alpha_2$ d'où le résultat en utilisant le lemme de Gronwall.

Il existe également un autre théorème utilisant le principe du maximum. Ce théorème est dû à G. Chavent et Lemonnier (c.f. [12]). Compte tenu de l'hypothèse 1.1, le théorème 1.2 ci-dessus s'accorde parfaitement à notre problème.

Théorème 1.2 *Avec les notations précédentes et l'hypothèse (1.23), si en plus*

$$f \in L^2(\Omega) \text{ et } \theta_0 \in L^2([0, Z]) \quad (1.41)$$

Alors, la solution de l'équation (1.25) vérifie (1.26) et (1.27) du théorème 1.1 et de plus :

$$\theta \in L^\infty(\Omega) \quad (1.42)$$

1.4.5 Conclusion

Les résultats d'existence et d'unicité d'une solution du modèle hydrologique d'infiltration que nous avons présentés ne sont qu'un cas particulier des équations paraboliques quasilineaires. De façon générale, les équations aux dérivées partielles de type parabolique quasi-linéaire sont utilisées pour la modélisation de plusieurs phénomènes physiques, on peut citer de façon non exhaustive la modélisation de la chaleur, modélisation des écoulements en milieux poreux etc...

1.5 Résolution numérique de l'équation de l'hydrodynamique en milieu poreux non-saturé

1.5.1 Introduction

La solution de l'équation aux dérivées partielles qui décrit l'écoulement de l'eau en zone non-saturée dépend de plusieurs facteurs, dont la forme de l'équation retenue, c'est-à-dire la formulation en pression h , la formulation en teneur en eau θ ou la formulation mixte pression teneur en eau $\theta-h$.

Différents auteurs (Milly [70], Celia et al [7], Rathfelder et Abriola [86]) ont noté que les solutions numériques obtenues avec la formulation mixtes de l'équation de Richards sont plus précises que celles obtenues avec la formulation en h .

La discrétisation en espace de l'équation peut être réalisée, soit avec la méthode des différences finies, soit avec la méthode des éléments finis. Toutes fois, les deux méthodes produisent des résultats presque identiques si la matrice de stockage utilisée dans la méthode des éléments finis est diagonalisée afin de supprimer d'éventuelles oscillations de la solution (c.f. [70, 7]). Cependant, en se référant à [86, 7], tout compte fait la méthode des éléments finies semble plus appropriée. D'autres techniques de résolution peuvent être utilisées (méthodes spectrales par exemple).

En milieu poreux non-saturé, les relations entre variables caractéristiques du milieu sont fortement non-linéaires. A cause de cette non-linéarité, un processus itératif est utilisé pour résoudre le problème de l'écoulement dans un domaine considéré. Pour ce faire, plusieurs méthodes itératives existent parmi lesquelles la méthode de Picard ou méthode de substitution, la méthode de Newton-Raphson.

La méthode de Picard ou méthode du point fixe est la plus utilisée à cause de la simplicité de sa mise en œuvre.

Dans cette partie nous présentons une résolution de l'équation de l'hydrodynamique en milieu poreux non-saturé, en utilisant le processus itératif de Picard. L'illustration est faite en utilisant les paramètres hydrodynamiques d'un sable de Grenoble (*Grenoble Sand*).

1.5.2 L'équation de l'hydrodynamique

L'équation de l'hydrodynamique en milieu poreux non-saturé est une équation fortement non-linéaire. La non-linéarité de cette équation provient des relations $\theta(h)$ et $K(h)$. Dans le cas de l'écoulement vertical à une dimension, elle est donnée par :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(\theta) \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \right] \quad (1.43)$$

où $\theta(L^3L^{-3})$ est la teneur en eau, $h(L)$ est la pression en eau du sol, $K(\theta)(LT^{-1})$ conductivité hydraulique $z(L)$ est la profondeur orientée positivement vers le bas, t (T) est le temps.

On associe à cette équation aux dérivées partielles des conditions aux limites du domaine d'étude et une condition initiale.

Rappelons que trois choix sont possibles en fonction de la variable d'état considérée : forme h , exprimée en fonction de la pression en eau, forme $\theta-h$, exprimée en fonction de la teneur en eau θ et de la pression h et résolue en terme de pression et la forme θ exprimée en fonction de la teneur en eau.

L'équation de en h

L'introduction de la capacité capillaire (Richards 1931), définie par :

$$C(h) = \frac{\partial \theta}{\partial h},$$

permet de mettre l'équation (1.43) sous la forme suivante :

$$C(h) \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \right], \quad (1.44)$$

$K(h)$ est la conductivité hydraulique exprimée en fonction de la pression en eau, elle est obtenue en combinant les relations $K(\theta)$ et $\theta(h)$. Il est à remarquer que cette équation peut être résolue en milieu poreux non-saturé, la pression h variant d'une façon continue dans tout le domaine de l'écoulement (Haverkamp et al, [47]). La discrétisation de cette équation est en général très délicate.

En effet si une attention particulière n'est pas apportée au terme $C(h) \frac{\partial h}{\partial t}$, il peut ne pas y avoir équivalence entre l'expression continue et l'expression discrète (c.f. [86]).

L'équation mixte $\theta-h$

L'équation de l'hydrodynamique sous la forme mixte s'écrit :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \right]. \quad (1.45)$$

Cette équation est aussi une équation fortement non-linéaire. La discrétisation de cette équation a l'avantage de donner une équation conservative en masse (Celia et al [7]). Elle peut être utilisée en milieu poreux saturé et non-saturé.

L'équation en θ

L'introduisant du coefficient de diffusivité capillaire par Childs et Collis-Georges 1950 défini par :

$$D(\theta) = K(\theta) \frac{\partial h}{\partial \theta}$$

permet d'exprimer l'équation de l'hydrodynamique comme une fonction dépendant uniquement de θ :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[D(\theta) \cdot \frac{\partial \theta}{\partial z} - K(\theta) \right] \quad (1.46)$$

L'équation (1.46) est appelée équation de Fokker-Planck, elle a pour variable d'état la teneur en eau θ , c'est une équation conservative en masse. Mais elle a un inconvénient majeur, elle ne peut pas être utilisée si une partie du domaine est saturée. En effet, tout point d'une zone saturée est défini par une valeur constante de la teneur en eau égale à la teneur en eau à saturation naturelle θ_s .

1.5.3 Solution numérique de l'équation de l'hydrodynamique

Nous allons considérer la formulation en h et la formulation mixte sera donnée en remarque. La linéarisation des différentes équations est faite en utilisation la méthode de Picard.

L'équation en h

La discrétisation temporelle de (1.43) est faite en utilisant un schéma implicite d'Euler. La discrétisation spatiale est effectuée en utilisant un schéma aux différences finies.

i désigne l'indice de discrétisation en espace, ΔZ le pas de discrétisation en hauteur
 $z_i = i\Delta z$

j désigne l'indice de discrétisation temporel, ΔT le pas de discrétisation en temps
 $t_j = j\Delta T$.

On obtient le système suivant :

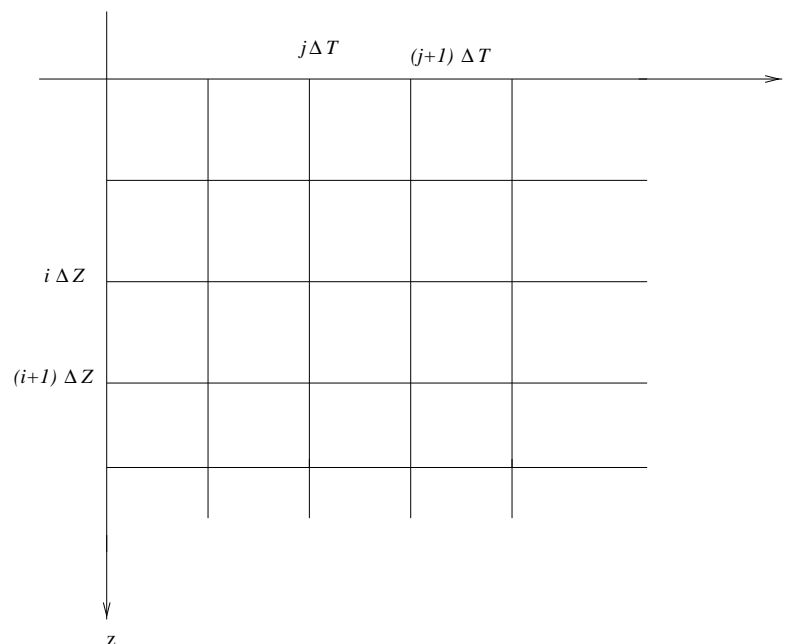


FIG. 1.6 – Grille de discrétisation

$$C_i^{j+1} \frac{h_i^{j+1} - h_i^j}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta z} \left[K_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} \left(\frac{h_{i+1}^{j+1} - h_i^{j+1}}{\Delta z} - 1 \right) - K_{i-\frac{1}{2}}^{j+1} \left(\frac{h_i^{j+1} - h_{i-1}^{j+1}}{\Delta z} - 1 \right) \right] \quad i = 1, \dots, N_z, \quad j = 0, \dots, N_T \quad (1.47)$$

Avec $C_i^{j+1} = C(h_i^{j+1})$ et $K_{i\pm\frac{1}{2}}^{j+1} = \sqrt{K(h_i^{j+1}) \times K(h_{i\pm 1}^{j+1})}$.

Nous avons choisi comme expression de $K_{i\pm\frac{1}{2}}^{j+1}$ la moyenne géométrique entre les valeurs de K_i et $K_{i\pm 1}$ qui donne de meilleurs résultats numériques (Haverkamp et Vaulin [87]) comparativement à la moyenne arithmétique.

L'équation (1.47) se met sous la forme :

$$\begin{aligned} -K_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} \cdot h_{i+1}^{j+1} + \left(K_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} + K_{i-\frac{1}{2}}^{j+1} + \frac{\Delta z^2}{\Delta t} C_i^{j+1} \right) \cdot h_i^{j+1} - K_{i-\frac{1}{2}}^{j+1} \cdot h_{i-1}^{j+1} \\ = \frac{\Delta z^2}{\Delta t} C_i^{j+1} \cdot h_i^j + \Delta z \cdot \left(K_{i-\frac{1}{2}}^{j+1} - K_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} \right), \end{aligned}$$

soit sous forme matricielle :

$$A(H^{j+1}) \cdot H^{j+1} = F(H^{j+1}) \quad (1.48)$$

où (H^{j+1}) est le vecteur de pression en eau au pas de temps $j + 1$, $H_i^{j+1} = h_i^{j+1}$.

$A(H^{j+1})$ est la matrice de conductance globale tridiagonale symétrique par définition dont les éléments sont composés de conductivité hydraulique et de capacité capillaire aux différents points de discrétisation.

Concrètement nous avons :

$$\begin{aligned} A_{i,i+1} = A_{i+1,i} = -K_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} \\ A_{i,i} = K_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} + K_{i-\frac{1}{2}}^{j+1} + \frac{\Delta z^2}{\Delta t} C_i^{j+1} \end{aligned} \quad (1.49)$$

$F(H^{j+1})$ est un vecteur global dont les éléments sont fonctions des conductivités hydrauliques et des capacités capillaires.

Le système (1.48) doit être associé à des conditions initiale et aux limites.

Conditions aux limites

→ C'est dans le vecteur $F(H^{j+1})$ qu'interviennent les conditions aux limites de type Neuman (conditions en flux) :

• $F_1(H^{j+1}) = F_1(H^{j+1}) + q_0$ avec q_0 le flux imposé à la limite supérieure du domaine, $z = 0$ défini par $q_0 = \left(-K(h) \frac{\partial h}{\partial z} - K \right)_{|z=0}$

• $F_{N_z}(H^{j+1}) = F_{N_z}(H^{j+1}) - q_z$ avec q_z le flux imposé à la limite inférieure du domaine, $z = Z$ défini par $q_z = \left(-K(h) \frac{\partial h}{\partial z} - K \right)_{|z=Z}$

→ Les conditions de type Dirichlet (pression ou teneur en eau imposées) :

- . $H_1^{j+1} = h(t, 0)$ ou $\theta_1^{j+1} = \theta(t, 0)$ condition à la limite supérieure du domaine, $z = 0$.
- . $H_{N_z}^{j+1} = h(t, Z)$ ou $\theta_{N_z}^{j+1} = \theta(t, Z)$ condition à la limite inférieure du domaine, $z = Z$.

Conditions initiales

- . $H_i^0 = h(0, z)$ pour $i = 1, 2, \dots, N_z$, en terme de pression en eau.
- . $\theta_i^0 = \theta(0, z)$ pour $i = 1, 2, \dots, N_z$, en terme de teneur en eau.

L'équation discrète de l'écoulement (1.48) est une équation non-linéaire, les coefficients de cette équation sont fonction de la variable d'état que nous cherchons à déterminer. Il faut, pour la résoudre, utiliser un processus itératif.

1.5.4 La méthode de Picard appliquée à la forme h

La méthode de Picard est la plus couramment employée. C'est une méthode assez simple à utiliser. Elle fait appel à un processus itératif. Le système d'équation global s'écrit :

$$A(h^{j+1,m}) \cdot h^{j+1,m+1} = F(h^{j+1,m}) \quad (1.50)$$

où m est l'indice d'itération. Le processus itératif est poursuivi jusqu'à ce que les variations de pressions d'une itération à l'autre soient inférieures à une tolérance fixée a priori. Pour la première itération on se fixe $(H^{j+1,0}) = (H^j)$.

Le système d'équation généralisée pour la *méthode modifiée de Picard* s'écrit :

$$A(h^{j+1,m}) \Delta h^{j+1,m} = F(h^{j+1,m}) - A(h^{j+1,m}) h^{j+1,m} \quad (1.51)$$

où m est le compteur d'itération, $h^{j+1,m}$ représente le vecteur de pression au pas de temps $j+1$ et à l'itération m , $\Delta h^{j+1,m+1} = h^{j+1,m+1} - h^{j+1,m}$ est le vecteur des pressions en eau du sol au pas de temps $j+1$ et à l'itération $m+1$ (itérations de Picard).

Ce processus itératif est construit de la manière suivante :
la manière suivante :

Etape 1 $h^{j+1,0} = h^j$, est un vecteur initiale avec h^j la pression h au pas de temps j .

Etape 2 pour $m = 0, 1, 2, \dots, N_z$ faire :

- (i) Construire le système (1.51)
- (ii) Résoudre le système linéaire (1.51) pour le vecteur $\Delta h^{j+1,m}$
- (iii) Construire la nouvelle solution : $h^{j+1,m+1} = \Delta h^{j+1,m+1} + h^{j+1,m}$
- (iv) Tester la convergence $|\Delta h^{j+1,m}| = |h^{j+1,m+1} - h^{j+1,m}| < \epsilon \times |h^{j+1,m+1}|$
 - si le critère n'est pas vérifié alors $m = m + 1$ et on retourne à l'étape 2.
 - sinon $h^{j+1,m+1}$ est la solution approchée de l'équation (1.47) au pas de temps $j+1$

Cette méthode est simple à mettre en œuvre et lorsque qu'elle converge, a une vitesse de convergence assez faible (asymptotiquement linéaire).

Remarque 1.4 *D'autres méthodes de linéarisation existent par exemple la méthode de Newton-Raphson. Cette méthode a été employée pour la résolution de l'équation de l'écoulement en zone non-saturée par plusieurs auteurs, Celia et al 1990 [7], Rathfelder et Abriola 1994 [86], Lehmann 1996 [58]. Nous optons pour la méthode de Picard en raison de sa simplicité.*

1.5.5 Remarque (forme $\theta-h$)

Remarque 1.5 *Cette formulation est utilisée dans le but de remédier aux problèmes de bilan en eau Celia et al [7].*

La discrétisation de l'équation mixte (forme $\theta-h$) est réalisée de la même façon que la forme en h , c'est-à-dire en utilisant un schéma aux différences finies homogène en espace et un schéma implicite d'Euler en temps à l'équation mixte $\theta-h$. Ce qui donne :

$$\begin{aligned} \frac{\theta_i^{j+1,m+1} - \theta_i^j}{\Delta t} &= \frac{1}{\Delta z} \left[K_{i+\frac{1}{2}}^{j+1,m} \left(\frac{h_{i+1}^{j+1,m+1} - h_i^{j+1,m+1}}{\Delta z} - 1 \right) \right. \\ &\quad \left. - K_{i-\frac{1}{2}}^{j+1,m} \left(\frac{h_i^{j+1,m+1} - h_{i-1}^{j+1,m+1}}{\Delta z} - 1 \right) \right], \end{aligned} \quad (1.52)$$

m désigne l'indice d'itération.

Cette équation est résolue en pression d'eau h . Pour ce faire, nous allons effectuer un développement en série de Taylor pour exprimer la teneur en eau au pas de temps $j+1$ et à l'itération $m+1$ en fonction de la teneur en eau au pas de temps $j+1$ et à l'itération précédente m et de la pression en eau au pas de temps $j+1$ et aux itérations m et $m+1$ (c.f. [7, 86]) ce qui donne à l'ordre un :

$$\theta_i^{j+1,m+1} = \theta_i^{j+1,m} + \frac{d\theta}{dh} \Big|_{j+1,m} \cdot (h^{j+1,m+1} - h^{j+1,m}) + O(\delta), \quad (1.53)$$

avec $C_i^{j+1,m} = \frac{d\theta}{dh} \Big|_{j+1,m}$ capacité capillaire.

Nous obtenons en combinant les équations (1.52) et (1.53) l'équation d'écoulement de l'eau sous la forme mixte avec la méthode de Picard :

$$\begin{aligned} C_i^{j+1,m} h_i^{j+1,m+1} &- \frac{\Delta t}{\Delta z^2} \left[K_{i+\frac{1}{2}}^{j+1,m} \cdot h_{i+1}^{j+1,m+1} - \left(K_{i+\frac{1}{2}}^{j+1,m} + K_{i-\frac{1}{2}}^{j+1,m} \right) \cdot h_i^{j+1,m+1} \right. \\ &\quad \left. + K_{i-\frac{1}{2}}^{j+1,m} \cdot h_{i-1}^{j+1,m+1} \right] = C_i^{j+1,m} h_i^{j+1,m} - (\theta_i^{j+1,m} - \theta_i^j) \\ &- \frac{\Delta t}{\Delta z} \left(K_{i+\frac{1}{2}}^{j+1,m} - K_{i-\frac{1}{2}}^{j+1,m} \right). \end{aligned}$$

Soit :

$$K_{i+\frac{1}{2}}^{j+1,m} \cdot h_{i+1}^{j+1,m+1} - \left(K_{i+\frac{1}{2}}^{j+1,m} - K_{i-\frac{1}{2}}^{j+1,m} + \frac{\Delta z^2}{\Delta t} C_i^{j+1,m} \right) \cdot h_i^{j+1,m+1} - K_{i-\frac{1}{2}}^{j+1,m} \cdot h_{i-1}^{j+1,m+1}$$

$$\begin{aligned}
&= \Delta z \left(K_{i+\frac{1}{2}}^{j+1,m} - K_{i-\frac{1}{2}}^{j+1,m} \right) - \frac{\Delta z^2}{\Delta t} C_i^{j+1,m} \cdot h_i^{j+1,m} \\
&+ \frac{\Delta z^2}{\Delta t} \left(\theta_i^{j+1,m} - \theta_i^j \right),
\end{aligned}$$

soit sous forme matricielle :

$$A \left(H^{j+1,m} \right) \cdot H^{j+1,m+1} = F \left(H^{j+1,m} \right) - \frac{\Delta z^2}{\Delta t} \left(\theta^{j+1,m} - \theta^{j+1} \right) \quad (1.54)$$

La méthode de Picard modifiée appliquée à la forme mixte, se déduit de l'équation (1.54) et s'écrit :

$$A \left(H^{j+1,m} \right) \cdot \Delta H^{j+1,m} = F \left(H^{j+1,m} \right) - A \left(H^{j+1,m} \right) \cdot H^{j+1,m} - \frac{\Delta z^2}{\Delta t} \left(\theta^{j+1,m} - \theta^j \right) \quad (1.55)$$

La matrice de conductance globale est tridiagonale symétrique identique au cas précédent (forme en h) et le processus itératif utilisé pour résoudre cette équation est celui présenté pour la forme h .

1.6 Résultats numériques

– La capacité capillaire $C(h)$ et la conductivité hydraulique $K(h)$ considérées sont définies de façon empirique (Haverkamp et al [47]) par :

$$C(h) = \begin{cases} \frac{\theta_s(2-n)}{h_g} \left(\frac{h}{h_g} \right)^{n-1} \left[1 + \left(\frac{h}{h_g} \right)^n \right]^{\frac{2}{n}-2}, & \text{si } h < 0. \\ C(h) = 0, & \text{si } h \geq 0 \text{ (cas saturé)}. \end{cases} \quad (1.56)$$

$$K(h) = \begin{cases} K_s \left[1 + \left(\frac{h}{h_g} \right)^n \right]^{\eta \left(\frac{2}{n}-1 \right)}, & \text{si } h < 0. \\ K(h) = K_s, & \text{si } h \geq 0 \text{ (cas saturé)}. \end{cases} \quad (1.57)$$

la teneur en eau résiduelle est nulle $\theta_r = 0$.

– La longueur du profil est de 100 cm.

– conditions initiale et limites :

– condition initiale : $h(0, z) = -61.5$ cm

– condition à la limite supérieure : $h(t, 0) = -20.7$ cm

– condition à la limite inférieure : $h(t, Z) = -61.5$ cm

Les paramètres hydrodynamiques sont ceux d'un sable de Grenoble : $K_s = 4.28 \times 10^{-3}$ cm/s, $\theta_s = 0.312$ cm³/cm³, $h_g = -16.4$ cm, $n = 2.79$, $\eta = 6.73$

Les simulations sont réalisées sur une colonne de sol uniforme en considérant la formulation de l'équation de Richards en terme de pression eu eau (forme h). Le pas de discrétisation spatiale est variable : $\Delta z = 0.5$ cm, $\Delta z = 1$ cm et $\Delta z = 2$ cm. Le temps de simulation est de 2 heures.

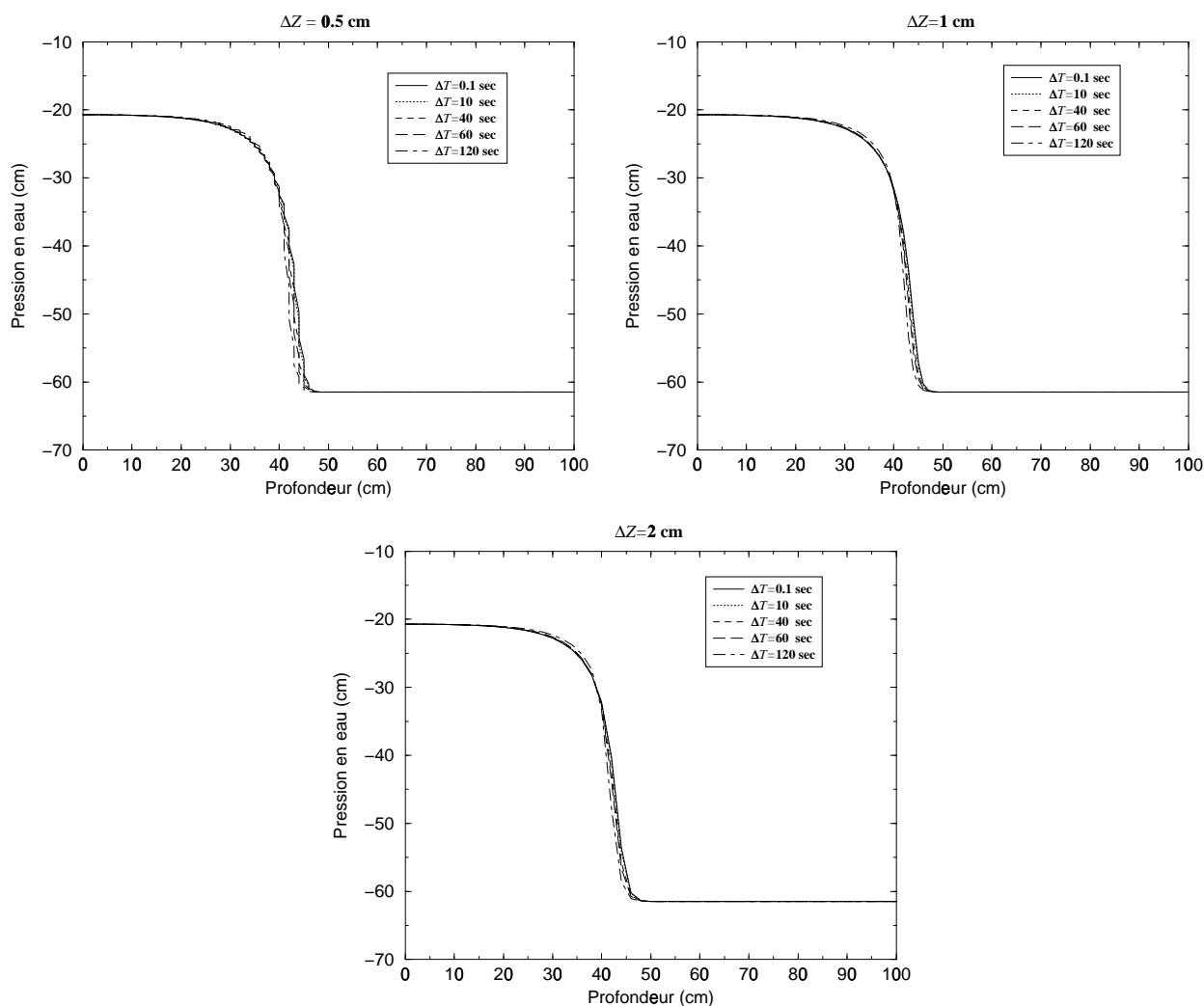


FIG. 1.7 – Distribution du profil des pressions en eau calculées avec la méthode modifiée de Picard pour la forme h de l'équation de Richards.

Le nombre d'itérations indispensable pour les simulations ne varie pas de façon significative en fonction de la variation des pas de discrétisation. On observe une légère variation (voir graphiques de la figure 1.7) de la solution lorsque ΔT croît. Néanmoins, cette variation n'altère pas la convergence des différentes solutions aux cours des itérations.

1.7 Conclusion

Ce chapitre nous a permis de décrire les fondements théoriques du modèle physique utilisé dans le cadre de ce travail. Le modèle décrit permet de simuler les écoulements d'eau dans un milieu poreux non-saturé. L'équation de Richards (1931) obtenue de cette description physique, est une équation aux dérivées partielles non-linéaire de type parabolique et sa résolution mathématique s'est inspirée de la démarche dérivée de [12, 82], en bénéficiant de l'hypothèse non restrictive faite sur la conductivité hydraulique et sur le coefficient de diffusivité. Les caractéristiques majeures de cette équation sont principalement la condition initiale, les conditions aux limites, la relation conductivité-teneur en eau, la relation teneur en eau-pression et les paramètres hydrodynamiques. La mise en œuvre numérique s'est faite en utilisant l'algorithme d'approximations successives de Picard sur la forme pression en eau.

Chapitre 2

Assimilation variationnelle de données et identification

Plan du chapitre

2.1	Introduction	31
2.2	Définition d'un problème de contrôle optimal en milieu poreux non-saturé	32
2.2.1	Aspect conceptuel de l'écoulement de l'eau en milieu non-saturé	32
2.2.2	Rappel des équations	32
2.2.3	Infiltration	33
2.3	Principes de l'assimilation variationnelle de données	35
2.3.1	Problème de minimisation sans contrainte	37
2.3.2	Condition d'optimalité, le modèle adjoint	37
2.3.3	Le modèle adjoint	38
2.3.4	Méthode de minimisation numérique	41
2.4	Assimilation de données : identification	44
2.4.1	Forme continue du système d'optimalité	45
2.4.2	Formulation du problème discrétisé en espace et en temps	46
2.4.3	Condition d'optimalité : cadre discret	48
2.4.4	Test de précision du gradient	51
2.4.5	Expériences numériques	51
2.4.6	Expériences sans pénalisation : $\lambda = 0$	52
2.4.7	Expériences avec pénalisation : $\lambda = 5 \times 10^{-1}$	61
2.4.8	Commentaires	70
2.5	Conclusion	71

2.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons le problème d'assimilation variationnelle de données pour l'identification des paramètres hydrodynamiques sur un modèle d'écoulement

en zone non-saturée. Dans ce problème, nous cherchons la solution d'un problème de type contrôle optimal. Les méthodes utilisant l'état adjoint, permettent de déterminer le gradient d'une fonction coût à définir en fonction des paramètres à identifier. C'est ainsi que nous rappelons et appliquons les techniques de développement du code adjoint dans un cadre général, ensuite, nous étudions sa faisabilité sur le modèle décrit dans le premier chapitre. Pour valider ce code et tester la faisabilité de la méthode d'optimisation de type descente, nous allons reconstituer les paramètres hydrodynamiques (P. Ngnepieba et al [78, 79]) par minimisation des écarts au sens des moindres carrés par des algorithmes utilisant le gradient de la fonctionnelle coût. Les conditions aux limites et la condition initiale optimales seront également déterminées. Les observations utilisées seront soit des observations simulées générées par le modèle direct (infiltration cumulée) soit des données de terrain d'une région de Grenoble.

2.2 Définition d'un problème de contrôle optimal en milieu poreux non-saturé

Nous nous intéressons ici à la recherche des paramètres d'un modèle numérique connaissant une distribution de la solution en différents points de l'espace et à différents temps de simulation. Nous allons ci-dessous, poser le problème et définir le problème de contrôle optimal (problème inverse).

2.2.1 Aspect conceptuel de l'écoulement de l'eau en milieu non-saturé

Le but de notre étude est l'identification des paramètres hydrodynamiques, des conditions aux limites et initiale dans un modèle hydrologique monodimensionnel d'infiltration de l'eau dans le sol.

2.2.2 Rappel des équations

En se basant sur les équations définies au chapitre 1, nous considérerons la formulation de l'équation en pression en eau (h) suivante :

$$\begin{cases} C(h) \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \right] \\ h(0, z) = h_{ini}(z) \\ h(t, 0) = h_{surf}(t) \\ h(t, Z) = h_{fond}(t) \end{cases}$$

avec la capacité capillaire $C(h)$ et la conductivité hydraulique $K(h)$ définies par (c.f. [47]) :

$$C(h) = \begin{cases} \frac{\theta_s(2-n)}{h_g} \left(\frac{h}{h_g}\right)^{n-1} \left[1 + \left(\frac{h}{h_g}\right)^n\right]^{\frac{2}{n}-2}, & \text{si } h < 0. \\ C(h) = 0, & \text{si } h \geq 0 \text{ (cas saturé)}. \end{cases} \quad (2.1)$$

$$K(h) = \begin{cases} K_s \left[1 + \left(\frac{h}{h_g}\right)^n\right]^{\eta\left(\frac{2}{n}-1\right)}, & \text{si } h < 0. \\ K(h) = K_s, & \text{si } h \geq 0 \text{ (cas saturé)}. \end{cases} \quad (2.2)$$

Les paramètres hydrodynamiques sont au nombre de cinq :

$$K_s, h_g, \theta_s, \eta, \text{ et } n. \quad (2.3)$$

avec h_g est le point d'inflexion de la courbe $h = f(\theta)$ définie par

$$f(x) = \theta_s \left[1 + \left(\frac{x}{h_g}\right)^n\right]^{\frac{2}{n}-1}.$$

La relation (2.2) peut également s'exprimer en fonction de θ par $K(\theta) = K_s \left(\frac{\theta}{\theta_s}\right)^\eta$

2.2.3 Infiltration

L'infiltration décrit le processus de l'eau pénétrant dans le sol à partir de sa surface. Plusieurs facteurs influencent le taux d'infiltration. Parmi ceux-ci nous pouvons citer les propriétés du sol telles que sa porosité, sa conductivité hydraulique, et son taux d'humidité initiale dépendant des conditions aux limites et initiale.

De manière générale, pour une condition initiale variable $\theta(0, z) = \theta_{ini}(z)$ l'infiltration cumulée (I_{cal} en dimension un de l'espace exprimée en centimètres par unité de surface) est définie par :

$$I_{cal}(t) = \int_0^Z q(t, \tau) d\tau, \quad (2.4)$$

$q(t, z)$ étant le taux d'infiltration.

Nous choisirons une condition initiale constante $\theta_{ini} = cte$, dans ce cas l'infiltration cumulée est définie par :

$$I_{cal}(t) = \int_0^Z (\theta(t, z) - \theta_{ini}) dz \quad (2.5)$$

où Z désigne la profondeur de sol considérée, $\theta(t, z)$ solution de (1.44) ou (1.45).

Ce type de mesure a été choisi pour sa simplicité. Les mesures de θ étant très longues, difficiles et coûteuses alors que la mesure de l'infiltration cumulée se fait assez simplement. Les mesures sont faites en posant un cylindre de faible diamètre (pour les mesures à une dimension) sur le sol et en versant de l'eau à l'intérieur. On mesure

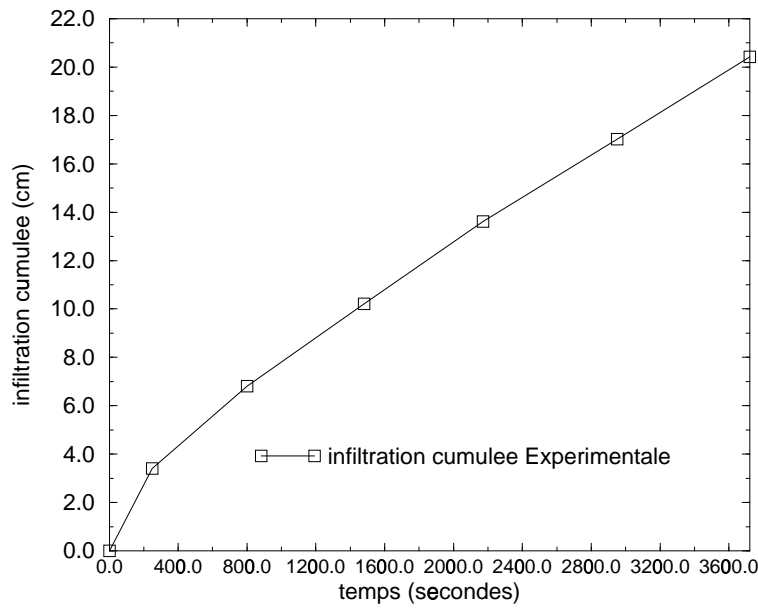


FIG. 2.1 – Infiltration cumulée expérimentale : méthode des cylindres

ensuite le temps que met le sol pour absorber une hauteur x d'eau. Cela nous donne à chaque temps t la quantité d'eau absorbée par le sol.

En général, les paramètres (2.3) sont estimés de façon empirique à partir des mesures d'infiltration sur le terrain.

Si l'on dispose des mesures de terrain $I_{obs}(t_j)$ aux instants t_j , $j = 0, \dots, M$, on peut naturellement se poser la question :

Quel est le jeu de paramètres (2.3) pour lequel l'infiltration cumulée $I_{cal}(t)$ calculée par (2.5) est «la plus proche possible» de l'infiltration mesurée $I_{obs}(t)$ aux instants t_j ?

Une description complète du processus d'infiltration impose de prendre en compte les caractéristiques du profil d'humidité et de pression du sol considéré, la profondeur et les différents temps d'intégration ; raison pour laquelle nous devons tenir compte des conditions aux limites et de la condition initiale de notre modèle pour mieux quantifier notre processus d'infiltration. Ainsi, à la question posée ci-dessus nous devons ajouter aux paramètres (2.3) la condition initiale θ_{ini} , et les deux conditions aux limites θ_{surf} , et θ_{fond} que nous supposons constantes dans le temps pour des raisons de simplicité.

Nous pouvons donc reformuler la question précédente par :

Quel est le jeu de paramètres $Par = (K_s, \theta_s, h_g, \eta, n, \theta_{ini}, \theta_{surf}, \text{ et } \theta_{fond})$ pour lequel l'infiltration cumulée $I_{cal}(t)$ calculée par (2.5) est «la plus proche possible» de l'infiltration mesurée $I_{obs}(t)$ aux instants t_j ?

Pour répondre à cette question, on construit la fonctionnelle d'écart (fonction coût) entre l'infiltration calculée et l'infiltration mesurée :

$$\begin{aligned}
 J(Par) &= \frac{\Delta t}{2} \sum_{j=0}^M (I_{cal}(t_j) - I_{obs}(t_j))^2 \\
 &= \frac{1}{2} \int_0^T \left[\int_0^Z (\theta(t, z) - \theta_{ini}) dz - I_{obs}(t) \right]^2 \cdot \delta(t - t_j) dt,
 \end{aligned} \tag{2.6}$$

où $\delta(t - t_j)$ représente la masse de Dirac concentrée autour du point t_j , Δt l'intervalle de temps entre les différentes observations (Δt sera également le pas de discrétisation temporelle qu'on définira au paragraphe lors des expériences numériques).

Le problème revient à trouver le vecteur de paramètres :

$$Par^* \left(K_s^*, \theta_s^*, h_s^*, \eta^*, n^*, \theta_{ini}^*, \theta_{surf}^*, \theta_{fond}^* \right) \tag{2.7}$$

tel que

$$J(Par^*) = \inf_{U \in \mathcal{P}} J(U) \tag{2.8}$$

où \mathcal{P} est l'ensemble des vecteurs de paramètres admissibles.

Une caractérisation de Par^* est donnée par l'équation d'Euler-Lagrange :

$$\nabla J(Par^*) = 0 \tag{2.9}$$

si l'ensemble des paramètres admissibles est l'espace \mathcal{P} tout entier. Sinon, on a plutôt l'inégalité variationnelle :

$$\langle \nabla J(Par^*), v - Par^* \rangle \geq 0 \quad \forall v \in V \subset \mathcal{P}, \tag{2.10}$$

∇J étant le gradient de J .

Mais c'est une condition nécessaire et non suffisante. En effet, la fonctionnelle J étant non quadratique ($I_{cal}(t)$ est fortement non-linéaire par rapport aux paramètres) nous ne pouvons chercher que des minima locaux.

2.3 Principes de l'assimilation variationnelle de données

Largement développées pour être utilisées dans la modélisation de l'environnement en géosciences, les méthodes adjointes peuvent être aussi utilisées pour rechercher le vecteur de paramètres optimal qui ajustera au mieux la sortie du modèle et les observations. Nous présentons ci-dessous le développement théorique dû à Le Dimet 1980 [16], 1982 [17], Le Dimet et Talagrand 1986 [29], Talagrand et Courtier [97, 98] etc. Nous appliquons le modèle adjoint et la théorie du contrôle optimal pour identifier les paramètres hydrodynamiques qui interviennent dans le modèle (1.44).

Principe

Dans la théorie du contrôle optimal, le modèle après discrétisation (différences finies, éléments finis, méthodes spectrales, méthode de Galerkin, méthode de collocation,...) peut être généralement décrit par une équation d'évolution de la forme suivante :

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = F(X, K) + B.v, & X \in \mathcal{X}, \\ X(0) = u \end{cases} \quad (2.11)$$

où X est la variable d'état appartenant à un espace de Hilbert \mathcal{X} ($\mathcal{X} \equiv \mathbb{R}^N$), t le temps, K un vecteur de paramètre appartenant à espace de Hilbert \mathcal{K} , F est un opérateur différentiel non-linéaire de $\mathcal{X} \times \mathcal{K}$ dans \mathcal{X} qu'on supposera (en général) différentiable, $v \in \mathcal{V}$ représente les valeurs de l'état X sur les frontières du domaine d'intégration et dépend de la position et du temps d'intégration, on suppose aussi que \mathcal{V} est un espace de Hilbert. B est un opérateur linéaire. On supposera que $\mathcal{P} = \mathcal{K} \times \mathcal{X} \times \mathcal{V}$, que l'on appellera aussi un ensemble de paramètres admissibles, est un espace de Hilbert.

Désignons par \mathcal{O} l'espace de Hilbert des observations et par C l'opérateur de projection de \mathcal{X} dans \mathcal{O} . Lors des applications numériques \mathcal{O} est nécessairement un espace de dimension finie car on ne peut disposer que d'un nombre fini d'observations.

Nous supposons que pour $K \in \mathcal{K}$, $u \in \mathcal{X}$ et $v \in \mathcal{V}$ fixés, le problème de Cauchy (2.11) admet une solution unique $X = X(K, u, v, t)$.

On définit une fonctionnelle d'écart entre la solution X du modèle (2.11) et une observation (*fonction coût*) $X_{obs} \in \mathcal{O}$ de \mathcal{P} dans \mathbb{R} par :

$$\begin{aligned} J(K, u, v) &= \frac{1}{2} \|C.X(K, u, v) - X_{obs}\|_{\mathcal{O}}^2 \\ &= \frac{1}{2} \int_0^T \|C.X(K, u, v, t) - X_{obs}(t)\|_{\mathcal{O}}^2 dt \end{aligned} \quad (2.12)$$

On pose alors le problème de contrôle optimal suivant :

$$\begin{cases} \text{trouver } (K^*, u^*, v^*) \in \mathcal{P} \text{ tel que :} \\ J(K^*, u^*, v^*) = \inf_{U \in \mathcal{P}} J(K, u, v) \end{cases} \quad (2.13)$$

De façon générale, lorsque J est différentiable, une condition nécessaire pour que (K^*, u^*, v^*) soit solution de (2.13) est donnée soit par l'équation d'Euler-Lagrange :

$$\nabla J(K^*, u^*, v^*) = \begin{pmatrix} \frac{\partial J}{\partial K} \\ \frac{\partial J}{\partial u} \\ \frac{\partial J}{\partial v} \end{pmatrix} = 0,$$

soit l'inégalité variationnelle :

$$\langle \nabla J(U^*), v - U^* \rangle \geq 0 \quad \forall v \in \mathcal{W} \subset \mathcal{P},$$

où ∇J représente le gradient de J par rapport à K , u et v .

La détermination de ∇J permet de mettre en œuvre des méthodes d'optimisation de type descente. Étant donné que la résolution de (2.13) nécessite le calcul du gradient de la fonction coût, nous allons donner ci-dessous la méthode de calcul de ce gradient.

2.3.1 Problème de minimisation sans contrainte

En fait, l'ensemble des états possibles étant théoriquement \mathbb{R}^N tout entier, on a donc un problème (pour le problème discrétisé en espace) d'optimisation sans contrainte s'écrivant :

$$(P) \left\{ \begin{array}{l} \text{trouver } (K^*, u^*, v^*) \in \mathcal{P} \text{ tel que :} \\ J(K^*, u^*, v^*) = \inf_{U \in \mathcal{P}} J(K, u, v) \end{array} \right. \quad (2.14)$$

La notion de convexité, en optimisation, joue un rôle très important, comme nous le montre la propriété qui suit :

Propriété

Si la fonctionnelle J est convexe alors tout minimum local est global. Si de plus J est strictement convexe, alors le minimum, s'il existe est unique.

Nous avons le théorème d'existence d'un optimum suivant :

Théorème 2.1 *Si la fonctionnelle J est convexe continue et si de plus :*

$$\lim_{\|v\|_{\mathcal{P}} \rightarrow \infty} J(v) = +\infty$$

alors il existe une solution minimale au problème (2.14).

En réalité, la condition de continuité n'est pas nécessaire, on peut la remplacer par une condition plus faible de semi-continuité inférieure.

Pour plus de détails concernant l'introduction à la théorie du contrôle optimal appliquée aux équations aux dérivées partielles, la référence de J. L. Lions [60] est bien appropriée.

2.3.2 Condition d'optimalité, le modèle adjoint

Définition 2.1 *Soit φ une application de \mathbb{R}^N dans \mathbb{R}^N de variable x . On appelle dérivée de Gâteaux de φ dans la direction w , l'application définie par :*

$$\hat{\varphi}(x, w) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\varphi(x + \alpha w) - \varphi(x)}{\alpha}$$

lorsque cette limite existe. Si $\hat{\varphi}$ est linéaire en w on peut alors noter

$$\hat{\varphi}(x, w) = \langle \nabla \varphi(x), w \rangle$$

où $\nabla\varphi$ est le gradient de φ par rapport à x

La dérivée de Gâteaux est encore appelée dérivée directionnelle.

En posant $H = (K, u, v) \in \mathcal{P}$, si nous désignons par $\widetilde{H} = (\widetilde{K}, \widetilde{u}, \widetilde{v})$, une perturbation sur H , alors cette perturbation permet de définir la dérivée directionnelle \widehat{J} de la fonction coût J dans la direction H qui vérifie :

$$\widehat{J}(H, \widetilde{H}) = \int_0^T \langle C.X(K, u, v) - X_{obs}, C.\widehat{X} \rangle dt \quad (2.15)$$

Ainsi, si on désigne par \widehat{X} la dérivée de Gâteaux (dérivée directionnelle dans la direction $\widetilde{K}, \widetilde{u}, \widetilde{v}$ respectivement) du modèle direct discrétisé (2.11) alors \widehat{X} est solution de l'équation (2.16) appelée *modèle linéaire tangent* :

$$\begin{cases} \frac{d\widehat{X}}{dt} = \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right] . \widehat{X} + \left[\frac{\partial F}{\partial K} \right] . \widetilde{K} + B.\widetilde{v} \\ \widehat{X}(0) = \widetilde{u} \end{cases} \quad (2.16)$$

où $\left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]$ et $\left[\frac{\partial F}{\partial K} \right]$ représentent respectivement l'opérateur Jacobien de F par rapport à X et par rapport K .

Par définition du gradient on a :

$$\widehat{J}(H, \widetilde{H}) = \langle \nabla J(H), \widetilde{H} \rangle. \quad (2.17)$$

Une façon de déterminer le gradient lui même (c'est-à-dire toutes ses composantes, puisque c'est ce qu'on veut calculer), est de faire une perturbation unitaire sur chaque paramètre, en maintenant les autres constants) et de calculer \widehat{J} . Ceci implique qu'il faudra résoudre (2.16) autant de fois qu'il y a de paramètres.

Dans le cas d'un petit nombre de paramètres, on pourrait faire cette démarche si on n'avait besoin que du gradient (par exemple dans le cas d'une analyse de sensibilité). Mais dans le cas qui nous intéresse, il faut faire appel au gradient dans un algorithme de minimisation et on comprend très vite que le coût (calcul et espace mémoire) de cette démarche devient trop vite élevé, sans d'ailleurs évoquer le grand nombre de paramètres que l'on a de façon plus générale pour les modèles météorologiques et océanographiques. Dans ce qui suit, nous introduisons une méthode de calcul du gradient de la fonction coût J , $\nabla J(H)$ par une seule intégration d'une équation associée au modèle linéaire tangent (2.16) indépendamment du nombre de paramètres de contrôle.

2.3.3 Le modèle adjoint

Pour trouver la linéarité de \widehat{J} par rapport à \widetilde{H} nous faisons le produit scalaire (convenablement choisi) de chacun des membres de la première équation du système linéaire tangent (2.16) par une variable P de même dimension que X ($P \in \mathcal{X}$), et nous intégrons le résultat obtenu sur l'intervalle $[0, T]$. Cela nous donne :

$$\int_0^T \left\langle \frac{\widehat{X}}{dt}, P \right\rangle dt = \int_0^T \left\langle \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right] \widehat{X} + \left[\frac{\partial F}{\partial K} \right] \widetilde{K} + B \cdot \tilde{v}, P \right\rangle dt.$$

En intégrant par parties le premier membre et en transposant le second, on trouve :

$$\begin{aligned} - \int_0^T \left\langle \left[\frac{\partial F}{\partial K} \right]^T P, \widetilde{K} \right\rangle dt + \langle \widehat{X}(T), P(T) \rangle - \langle \widehat{X}(0), P(0) \rangle - \int_0^T \langle B^T \cdot P, \tilde{v} \rangle dt = \\ = \int_0^T \left\langle \frac{dP}{dt} + \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T P, \widehat{X} \right\rangle dt, \end{aligned}$$

et en vertu de la condition initiale de (2.16) :

$$\begin{aligned} - \int_0^T \left\langle \left[\frac{\partial F}{\partial K} \right]^T P, \widetilde{K} \right\rangle dt + \langle \widehat{X}(T), P(T) \rangle - \langle \tilde{u}, P(0) \rangle - \int_0^T \langle B^T \cdot P, \tilde{v} \rangle dt = \\ = \int_0^T \left\langle \frac{dP}{dt} + \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T P, \widehat{X} \right\rangle dt. \end{aligned}$$

Si on définit P comme la solution de l'équation appelée *modèle adjoint* du système direct (2.16) :

$$\begin{cases} \frac{dP}{dt} + \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T P = C^T \cdot (C \cdot X - X_{obs}), & t \in [0, T] \\ P(T) = 0 \end{cases} \quad (2.18)$$

où C^T est la transposée (adjoint) de C , qui vérifie

$$\langle CX, Y \rangle_{\mathcal{O}} = \langle X, C^T Y \rangle_{\mathcal{X}}, \quad \forall X \in \mathcal{X}, Y \in \mathcal{O},$$

alors la dérivée directionnelle de la fonction coût peut se mettre sous la forme :

$$\hat{J}(H, \widetilde{H}) = \langle \nabla_H J, \widetilde{H} \rangle = - \int_0^T \left\langle \left[\frac{\partial F}{\partial K} \right]^T P, \widetilde{K} \right\rangle dt - \langle \tilde{u}, P(0) \rangle - \int_0^T \langle B^T \cdot P, \tilde{v} \rangle dt \quad (2.19)$$

et les composantes du gradient de la fonction coût par rapport à H sont données par :

$$\begin{cases} \nabla_K J = - \int_0^T \left[\frac{\partial F}{\partial K} \right]^T P dt \\ \nabla_u J = -P(0) \\ \nabla_v J = - \int_0^T B^T \cdot P dt \end{cases} \quad (2.20)$$

et le vecteur de paramètres optimaux est la solution des équations :

$$\begin{cases} \nabla_K J = - \int_0^T \left[\frac{\partial F}{\partial K} \right]^T . P dt = 0 \\ \nabla_u J = -P(0) = 0 \\ \nabla_v J = - \int_0^T B^T . P dt = 0 \end{cases}$$

Remarque 2.1 *Nous avons traité de façon générale le problème, en prenant comme paramètre de contrôle la condition initiale, les conditions aux limites et un paramètre intervenant dans le modèle à travers l'opérateur non-linéaire F . En considérant uniquement l'une des situations (un seul paramètre ou deux paramètres quelconques), la démarche serait identique, avec comme point commun le même modèle adjoint. Ce choix a été fait en raison de la question à laquelle nous sommes amenés à répondre dans la suite de notre travail : déterminer les paramètres hydrodynamiques, les conditions aux limites et initiale de notre modèle d'écoulements en zone non-saturée.*

Pour obtenir le gradient de la fonction coût J par rapport aux paramètres de contrôle, il suffit de résoudre le modèle direct (2.11), de le faire suivre de la résolution rétrograde du modèle adjoint (2.18) et enfin d'appliquer la formule (2.20) pour obtenir le gradient de la fonction coût nécessaire à l'algorithme d'optimisation. Les observations utilisés dans le second membre de l'équation adjointe sont des termes de forçages.

La solution (K^*, u^*, v^*) du problème (2.14) est donnée en résolvant le système :

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = F(X, K^*) + B.v^*, & X \in \mathbb{R}^N, \quad t \in [0, T] \\ X(0) = u^* \\ \frac{dP}{dt} + \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T . P = C^T . (C.X - X_{obs}), & t \in [0, T] \\ P(T) = 0 \\ \nabla_K J = - \int_0^T \left[\frac{\partial F}{\partial K} \right]^T . P dt = 0 \\ \nabla_u J = -P(0) = 0 \\ \nabla_v J = - \int_0^T B^T . P dt = 0 \end{cases} \quad (2.21)$$

qui est appelé *système d'optimalité*.

Cette technique a été utilisée par de nombreux auteurs dans divers problèmes. En météorologie et en océanographie on peut citer (de façon non exhaustive) les travaux de Le Dimet [15, 16, 18, 19, 21, 17], H. Ngodock [81], B. Luong [66], Thépaut et Courtier [100]. En hydrologie, on peut également citer les travaux de Yang [106] pour la modélisation du transport des sédiments en rivière, Lehmann [58] pour l'identification des paramètres par approche inverse sur un modèle d'écoulement en zone non-saturée, Chavent et al [11], et d'autres références [78, 79].

La fonctionnelle à minimiser de façon générale n'est pas quadratique, et une technique couramment utilisée consiste à la régulariser. Ainsi, si on dispose d'une observation (K_0, u_0, v_0) des paramètres de contrôle et des paramètres de régularisation $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ respectivement, cela permet de définir la fonction coût de la manière suivante :

$$J(K, u, v) = \frac{\lambda_1}{2} \|K - K_0\|_{\mathcal{K}}^2 + \frac{\lambda_2}{2} \|u - u_0\|_{\mathcal{X}}^2 + \frac{\lambda_3}{2} \|v - v_0\|_{\mathcal{V}}^2 + \frac{1}{2} \|C.X(K, u, v) - X_{obs}\|_{\mathcal{O}}^2 \quad (2.22)$$

En suivant la même démarche que précédemment, on constate que le système adjoint associé à cette nouvelle fonction coût reste inchangé. Par contre le gradient de cette fonctionnelle prenant en compte ces termes régularisants devient :

$$\begin{cases} \nabla_K J = \frac{\lambda_1}{2} (K - K_0) - \int_0^T \left[\frac{\partial F}{\partial K} \right]^T . P dt \\ \nabla_u J = \frac{\lambda_2}{2} (u - u_0) - P(0) \\ \nabla_v J = \frac{\lambda_3}{2} (v - v_0) - \int_0^T B^T . P dt \end{cases} \quad (2.23)$$

Le paramètre de régularisation joue un rôle très important en assimilation variationnelle de données. En général, il varie dans l'intervalle $[0, 1]$ et doit être choisi de sorte qu'au cours du processus de minimisation la distance de la solution du modèle aux observations puisse dominer ces termes régularisants.

Pour résoudre numériquement le problème de contrôle optimal, nous utilisons la technique de minimisation de la fonctionnelle des écarts au sens des moindres carrés par des algorithmes utilisant le gradient de la fonctionnelle. La plupart de ces algorithmes de minimisation (sans contraintes) reposent sur une méthode dite de descente : en partant d'un point quelconque, de l'espace, l'algorithme construit une suite de points dont le but est de converger vers le point de contrôle optimal en faisant diminuer le plus rapidement possible la fonctionnelle calculée en ces points. La direction liant deux points successifs est appelée *direction de descente*. Cette direction est calculée par l'algorithme grâce aux directions du gradient et aux valeurs de la fonctionnelle évaluée en différents points. Dans les algorithmes de descente, on a besoin, à chaque itération, du gradient de la fonctionnelle par rapport aux paramètres de contrôle.

Dans ce qui suit, nous allons présenter l'algorithme de minimisation que nous utilisons pour nos expériences numériques.

2.3.4 Méthode de minimisation numérique

Nous commençons tout d'abord par rappeler le principe des algorithmes de descente en décrivant l'algorithme de Newton pour la recherche d'un zéro d'une fonction au voisinage d'un point. Il est à noter que ce n'est qu'un cas particulier des algorithmes de descentes. Les autres (gradient, gradient conjugué. ...) ne diffèrent que selon la façon

de choisir le pas de descente que nous définirons par la suite. Elle consiste à résoudre successivement des problèmes linéarisés, ce qui donne l'algorithme suivant :

soit $G : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ et soit à résoudre

$$G(X) = 0.$$

En partant d'un point $X_0 \in \mathbb{R}^m$ quelconque, on calcule la suite $X_k \in \mathbb{R}^m$, qui converge vers un zéro de G sous certaines conditions. La suite X_k est définie par :

$$X_{k+1} = X_k - [JacG(X_k)]^{-1} \cdot G(X_k),$$

où $JacG(X_k)$ est le Jacobien de G calculé au point X_k .

Dans un problème de minimisation, la fonctionnelle G dont on veut chercher le zéro est la fonction qui, à chaque point de l'espace associe le vecteur gradient de la fonctionnelle J à minimiser, calculé en ce point :

$$\begin{aligned} G : \mathbb{R}^m &\longrightarrow \mathbb{R}^m \\ Y &\longmapsto \nabla J(Y) \end{aligned}$$

On cherche effectivement à résoudre $\nabla J(X) = 0$.

Le Jacobien $JacG(X_k)$ de G au point X_k dans ce cas est le Hessien de la fonction coût J calculé au même point. L'algorithme de Newton pour un problème de minimisation peut s'écrire :

$$X_{k+1} = X_k - [HessJ(X_k)]^{-1} \cdot \nabla J(X_k),$$

dans un problème d'optimisation, on ajoute un paramètre dit de pas de descente et l'algorithme se réécrit :

$$X_{k+1} = X_k - \rho_k [HessJ(X_k)]^{-1} \cdot \nabla J(X_k),$$

où ρ_k est le pas de descente.

La méthode de minimisation appliquée dans nos tests est un algorithme de type quasi-Newton à mémoire limitée (QNML), la forme est dite «BFGS» (resp. «BFGS» inverse) due à Broyden, Fletcher et al qui fournit une façon d'évaluer récursivement une approximation du Hessien (resp. de l'inverse du Hessien) au point X_k . Cette formule utilise uniquement les valeurs du vecteur gradient et les points X_k auxquels G_k a été évalué. La méthode de type quasi-Newton est en réalité une méthode de type gradient car elle utilise seulement les variations du gradient de la fonctionnelle coût J à minimiser entre deux itérés successifs pour obtenir de l'information sur le Hessien.

Nous avons utilisé plus précisément l'algorithme «M1QN3» développé par J.-C. Gilbert et C. Lemaréchal [38] de l'INRIA.

Nous allons à présent introduire le principe de la méthode QNML. À chaque itération de l'algorithme, le point $X_k \in \mathbb{R}^m$ est connu, on effectue :

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 $H_k = B_k^{-1}$, $B_k \simeq \text{Hess}J(X_k)$;

3 calcul du pas de descente ρ_k

$$J(X_k + \rho_k d_k) = \inf_{\rho \in \mathbb{R}} J(X_k + \rho d_k)$$

Ce qui revient à rechercher le minimum de J dans la direction de descente

4 Mettre à jour le point X_{k+1} par :

$$X_{k+1} = X_k + \rho_k d_k$$

L'une des méthodes de mise à jour à chaque itération de B_k ou H_k qui donne les meilleurs résultats est la formule ci-dessous :

1 La formule BFGS

$$[B_{k+1}] = [B_k] + \frac{y_k \otimes y_k}{\langle y_k, s_k \rangle} - \frac{[(B_k \cdot s_k) \otimes (B_k \cdot s_k)]}{\langle s_k, B_k \cdot s_k \rangle}$$

2 la formule BFGS inverse

$$\begin{aligned} [H_{k+1}] = [H_k] &+ \frac{[(s_k - H_k y_k) \otimes s_k] + [s_k \otimes (s_k - H_k y_k)]}{\langle y_k, s_k \rangle} \\ &- \frac{\langle s_k - H_k \cdot y_k, y_k \rangle}{y_k, s_k^2} [s_k \otimes s_k] \end{aligned}$$

où

$$s_k = X_{k+1} - X_k$$

est la différence entre deux points et,

$$y_k = G_{k+1} - G_k$$

est la différence entre deux gradients ; $\langle \cdot, \cdot \rangle$ est le produit scalaire choisi dans \mathbb{R}^m ; $[\cdot \otimes \cdot]$ est le produit tensoriel associé à ce produit scalaire et est défini par :

$$\begin{aligned} \otimes : \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m &\longrightarrow \mathcal{L}(\mathbb{R}^m) \\ (u, v) &\longmapsto [u \otimes v] \end{aligned}$$

avec pour $w \in \mathbb{R}^m$, $[u \otimes v] \cdot w = \langle v, w \rangle u$

En ce qui concerne la détermination du minimum de la fonction coût utilisant cette technique, nous pouvons par exemple citer les travaux de Navon et Zou [74, 73] Gilbert et Lemaréchal [38], Zou et al [108].

Remarque 2.2 Dans le cas où le produit scalaire choisi et le produit scalaire Euclidien, la matrice dans la base canonique $(e_j)_{1 \leq j \leq m}$ du produit tensoriel $[u \otimes v]$ s'écrit $[u.v^T]$.

Remarque 2.3 Les formules de type BFGS et BFGS inverse ont la propriété de conserver le caractère défini positif de B_k et H_k si et seulement si $\langle y_k, s_k \rangle$ est positif, ce qui assure que d_k est effectivement une direction de descente.

En pratique, lorsque la taille du problème est grand, il n'est pas possible de calculer et de stocker tous les coefficients des matrices B_k ou H_k , mais seulement un nombre limité de couples de vecteurs $(y_k, s_k)_{1 \leq k \leq m}$. Avec un algorithme spécialisé, on peut calculer la direction descente d_k à la $k^{\text{ième}}$ étape de la minimisation. Par conséquent, la méthode quasi-Newton à mémoire limitée (QNML) consiste à calculer la matrice H_k en ne faisant intervenir qu'un nombre limité de couples de vecteurs $(y_k, s_k)_{1 \leq k \leq m}$, les plus récents. La méthode QNML est donc une méthode très efficace pour une capacité de stockage raisonnable.

Critère d'arrêt de l'algorithme de minimisation

Dans le processus de minimisation, on doit choisir un critère d'arrêt de l'algorithme. En effet, soit l'algorithme s'arrête trop tôt, la convergence n'atteignant pas encore la solution, soit on a perdu trop de temps de calcul du pas de descente. En théorie de contrôle optimal, quand l'état de contrôle est proche de l'état optimal dans la procédure de minimisation, la fonction coût et son gradient par rapport à la variable de contrôle convergent tous vers une valeur nulle. Dans notre cas, nous utilisons un critère d'arrêt fréquent dans les algorithmes de minimisation. L'algorithme s'arrête lorsque la condition suivante est réalisée :

$$\frac{\|\nabla J(X_k)\|}{\|\nabla J(X_0)\|} \leq \beta \quad (2.24)$$

où β est un seuil fixé à l'avance de l'ordre de 10^{-6} .

Remarque 2.4 1 Pour cette condition d'arrêt, il faut faire attention de ne pas choisir une initialisation qui est proche de l'état optimal, en effet la quantité $\|\nabla J(X_0)\|$ serait initialement petite.

2 Pour l'algorithme de minimisation que nous utilisons (MIQN3) on a en plus la latitude de choisir d'autres tests d'arrêt portant sur le nombre d'itération ou sur le nombre total d'évaluation de la fonction coût ainsi que son gradient (nombre d'appels de la routine *simul*).

2.4 Assimilation de données : identification

Dans cette partie, nous présentons une application de la méthode adjointe décrite dans le paragraphe 2.3 pour le problème d'identification des paramètres sur un modèle

hydrologique d'infiltration en zone non-saturée. Nous cherchons à résoudre un problème numérique de type contrôle optimal de la forme (2.8) où les paramètres hydrodynamiques, la condition initiale et les conditions aux limites sont prises comme étant les variables de contrôle. Dans ce problème, nous cherchons à répondre à la question posée dans la section (2.2.3) c'est-à-dire déterminer les paramètres hydrodynamiques ajustant au mieux l'infiltration cumulée calculée et l'infiltration cumulée mesurée.

2.4.1 Forme continue du système d'optimalité

Nous faisons face à un problème monodimensionnel, nous noterons la variable d'état h (pression en eau) et P , la variable adjointe. Les observations sont prises ici comme étant l'infiltration cumulée simulée à partir du modèle direct.

La fonction coût se présente donc sous la forme :

$$\begin{aligned} J(Par) &= \frac{\lambda}{2} \|Par - par^0\|^2 + \frac{\Delta t}{2} \sum_{j=0}^M (I_{cal}(t_j) - I_{obs}(t_j))^2 \\ &= \frac{\lambda}{2} \|Par - par^0\|^2 + \frac{1}{2} \sum_{j=0}^M \int_0^T \left[\int_0^Z (\theta(t, z) - \theta_{ini}) dz - I_{obs}(t_j) \right]^2 \cdot \delta(t - t_j) dt, \end{aligned} \quad (2.25)$$

dans laquelle λ représente le paramètre de régularisation et Par^0 une estimation du paramètre de contrôle.

En suivant la méthodologie développée dans le paragraphe 2.3, pour le modèle direct défini au chapitre (1) :

$$\begin{cases} C(h) \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \right] \\ h(0, z) = h_{ini}(z) \\ h(t, 0) = h_{surf}(t) \\ h(t, Z) = h_{fond}(t) \end{cases} \quad (2.26)$$

Le modèle adjoint continu est défini par

$$\begin{cases} -\frac{\partial}{\partial t}(C.P) + \left[\frac{\partial C}{\partial h} \right] \cdot \left(P \cdot \left[\frac{\partial h}{\partial t} \right] \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left[K \frac{\partial P}{\partial z} \right] + \left[\frac{\partial K}{\partial h} \right] \cdot \left(\frac{\partial P}{\partial z} \cdot \left[\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right] \right) = \\ (I_{cal} - I_{obs}) \frac{\partial I_{cal}}{\partial h} \delta(t - t_i), \quad i = 0, \dots, (N-1) \\ P(t = T, z) = 0 \\ P(t, z = 0) = 0 \\ P(t, z = Z) = 0 \end{cases} \quad (2.27)$$

Les composantes du gradient de la fonction coût J par rapport aux paramètres de contrôle sont définies par :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \nabla J(U) = - \int_0^T \int_0^Z \left(\left[\frac{\partial C}{\partial U} \right] \cdot \left(P \frac{\partial h}{\partial t} \right) - \left[\frac{\partial K}{\partial U} \right] \left(\frac{\partial P}{\partial z} \cdot \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \right) \right) dt dz \\
 + \sum_{i=0}^N \int_0^Z (I_{cal}(t) - I_{obs}(t)) \left[\frac{\partial I_{cal}}{\partial U}(t) \right] \delta(t - t_i) dz \\
 + \int_0^T \left[\frac{\partial h_{ini}}{\partial U} \right] \left(K \frac{\partial P}{\partial z} \right)_{|z=Z} dt + \lambda (U - U^0) \\
 \nabla J(\theta_{ini}) = \int_0^Z \left((C(h)P)_{|t=0} - (I_{cal}(t) - I_{obs}(t)) \delta(t - t_j) \frac{\partial f(h)}{\partial h} \right) dz + \lambda (\theta_{ini} - \theta_{ini}^0) \\
 \nabla J(\theta_{surf}) = - \int_0^T \left(K(h) \left(\frac{\partial P}{\partial z} \right)_{|z=0} \right) dt + \lambda (\theta_{surf} - \theta_{surf}^0) \\
 \nabla J(\theta_{fond}) = \int_0^T \left(K(h) \left(\frac{\partial P}{\partial z} \right)_{|z=Z} \right) dt + \lambda (\theta_{fond} - \theta_{fond}^0)
 \end{array} \right. \quad (2.28)$$

Le vecteur de paramètre U est défini par $U = (K_s, \theta_s, h_s, \eta, n)$ et U^0 est l'observation correspondante.

Les détails relatifs au développement du modèle adjoint et du calcul du gradient de la fonction coût sont fournis dans Ngnepieba et al [78, 79]. En ce qui concerne l'existence et la régularité de la solution du problème de contrôle de ce type de problème, on peut se référer à G. Chavent et P. Lemonnier [12] qui ont étudié dans cet article le problème de l'identification de la non-linéarité d'une équation parabolique quasiliénaire, du même type que celle que nous considérons dans notre problème.

Remarque 2.5

Les détails plus approfondis concernant le développement des équations adjointes sont donnés dans [9, 66]. Nous en retenons qu'il est préférable de prendre directement l'adjoint du système direct discrétisé. Dans le cas contraire, on risque d'observer une divergence de l'algorithme de minimisation.

2.4.2 Formulation du problème discrétisé en espace et en temps

Soit Z la profondeur de sol considéré et T la durée de temps pendant laquelle on intègre le modèle direct (2.26).

On pose :

$$\Delta z = \frac{Z}{N} \quad z_i = i \times \Delta z, i = 0, \dots, N$$

$$\Delta t = \frac{T}{M} \quad t_j = j \times \Delta t, j = 0, \dots, M$$

en choisissant N et M convenablement, on discrétise alors l'équation (2.26) sous la forme :

$$C(h_i^{j-1}, Par) \cdot \frac{h_i^j - h_i^{j-1}}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta z} \left[K_{i+\frac{1}{2}}(h^{j-1}, Par) \left(\frac{h_{i+1}^j - h_i^j}{\Delta z} - 1 \right) - K_{i-\frac{1}{2}}(h^{j-1}, Par) \left(\frac{h_i^j - h_{i-1}^j}{\Delta z} - 1 \right) \right] \quad (2.29)$$

pour $j = 1, \dots, M$ et $i = 1, \dots, N-1$, où

$$K_{i+\frac{1}{2}}(h^{j-1}, Par) = \sqrt{K(h_{i+1}^j, Par) \times K(h_i^{j-1}, Par)} \quad i = 0, \dots, N-1$$

Les coefficients C et K sont donnés par les formules (2.1) et (2.2).

Dans la suite, on notera : $K_{i+\frac{1}{2}}^{j-1} = K_{i+\frac{1}{2}}(h^{j-1}, Par)$ et $C_i^{j-1} = C(h_i^{j-1}, Par)$

On initialise le modèle par :

$$\begin{aligned} h_i^0 &= h_{ini}(Par) & , & \quad i = 1, \dots, N \\ h_0^j &= h_{surf}(Par) & , & \quad j = 1, \dots, M \\ h_N^j &= h_{fond}(Par) & , & \quad j = 1, \dots, M \end{aligned}$$

Où $h_{ini}(Par)$, $h_{surf}(Par)$ et $h_{fond}(Par)$ sont obtenus à partir de θ_{ini} , h_{surf} et h_{fond} qui sont également des paramètres à identifier.

Le vecteur d'inconnues à résoudre à chaque pas de temps j est alors $H^j \in \mathbb{R}^{N-1}$, $H_i^j = h_i^j$, $i = 1, \dots, N-1$. L'équation (1.44) se met alors sous la forme matricielle :

$$\begin{cases} A(H^{j-1}, Par) \cdot H^j = F(H^{j-1}, Par) & , \quad j = 1, \dots, M \\ H^0 = H_{ini}(Par) \end{cases} \quad (2.30)$$

Où A est une matrice carrée tridiagonale symétrique d'ordre $(N-1)$ donnée par :

$$\begin{aligned} A_{i,i} &= - \left(K_{i+\frac{1}{2}}^{j-1} + K_{i-\frac{1}{2}}^{j-1} + \frac{\Delta z^2}{\Delta t} C_i^{j-1} \right), & , \quad i = 1, \dots, N-1 \\ A_{i,i+1} &= K_{i+\frac{1}{2}}^{j-1} & i = 1, \dots, N-2 \\ A_{i,i-1} &= K_{i-\frac{1}{2}}^{j-1} & i = 2, \dots, N-1 \end{aligned} \quad (2.31)$$

et $F(H^{j-1}, Par) \in \mathbb{R}^{N-1}$ est le vecteur donné par

$$\begin{cases} F_1 = -K_{\frac{1}{2}}^{j-1} h_0^j + \Delta z \left(K_{\frac{3}{2}}^{j-1} - K_{\frac{1}{2}}^{j-1} \right) - \frac{\Delta z^2}{\Delta t} C_1^{j-1} h_1^{j-1}, \\ F_i = \Delta z \left(K_{i+\frac{1}{2}}^{j-1} - K_{i-\frac{1}{2}}^{j-1} \right) - \frac{\Delta z^2}{\Delta t} C_i^{j-1} h_i^{j-1}, & i = 2, \dots, N-2, \\ F_{N-1} = -K_{N-\frac{1}{2}}^{j-1} h_N^j + \Delta z \left(K_{N-\frac{1}{2}}^{j-1} - K_{N-\frac{3}{2}}^{j-1} \right) - \frac{\Delta z^2}{\Delta t} C_{N-1}^{j-1} h_{N-1}^{j-1}, \end{cases}$$

On construit ensuite la fonction coût discrète :

$$J(Par) = \frac{\lambda}{2} \sum_{l=0}^{N_p} (Par_l - Par_l^0)^2 + \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=0}^M (I_{cal}(t_k) - I_{obs}(t_k))^2 \quad (2.32)$$

où t_k , $k = 0, \dots, M$ désignent les instants auxquels on dispose des mesures. $I_{cal}(t_k)$ est obtenue en faisant une approximation de (2.5) par la formule des trapèzes :

$$I_{cal}(t_k) = \Delta z \left[\frac{1}{2}(\theta_{surf} - 2\theta_{ini} + \theta_{fond}) + \sum_{i=1}^{N-1} (\theta_i^k - \theta_{ini}) \right] \quad (2.33)$$

2.4.3 Condition d'optimalité : cadre discret

Nous avons le modèle direct discret :

$$\begin{cases} A(H^{j-1}, Par) \cdot H^j = F(H^{j-1}, Par), & j = 1, \dots, M, \\ H^0 = H_{ini}(Par) \end{cases}$$

la fonction coût,

$$J(Par) = \frac{\lambda}{2} \sum_{l=0}^{N_p} (Par_l - Par_l^0)^2 + \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=0}^M (I_{cal}(t_k) - I_{obs}(t_k))^2$$

où l'infiltration cumulée au temps j $I_{cal}(t_j)$ est définie par :

$$I_{cal}(t_j) = \Delta z \left(\sum_{k=1}^{N-1} (f(h_k^j) - \theta_{ini}) + \frac{1}{2}(\theta_{fond} - 2\theta_{ini} + \theta_{surf}) \right) \quad (2.34)$$

Définissons le lagrangien \mathcal{L} par :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(H, Par, P) = & \Delta t \Delta z \sum_{j=0}^M \left[\langle A(H^{j-1}, Par) H^j, P^j \rangle - \langle F(H^{j-1}, Par), P^j \rangle \right] \\ & + \frac{\Delta t}{2} \sum_{j=0}^M (I_{cal}(t_j) - I_{obs}(t_j))^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{l=0}^{N_p} (Par_l - Par_l^0)^2. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Où H, Par et P sont considérées comme des variables indépendantes. Nous allons dériver \mathcal{L} par rapport à ces variables indépendantes. P est regardé ici comme le multiplicateur de Lagrange.

Le gradient du Lagrangien doit être nul au point réalisant le minimum. Ceci nous conduit au système ci-dessous donnant les conditions du premier ordre :

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial H} = 0 \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial P} = 0 \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial Par} = 0 \end{cases} \quad (2.36)$$

$$\begin{aligned} \nabla_{\theta_s} J(Par) &= \Delta t \Delta z \sum_{j=1}^M \left(\sum_{k=1}^{N-1} \sum_{s=k-1}^{k+1} \frac{\partial A_{ks}}{\partial \theta_s} (H^{j-1}, Par) \cdot H_s^j P_k^j \right) + \Delta t \Delta z \sum_{j=1}^M \times \\ &\left(\sum_{k=1}^{N-1} \frac{\partial F_k}{\partial \theta_s} (H^{j-1}, Par) \cdot P_k^j + \sum_{k=1}^{N-1} (I_{cal}(t_j) - I_{obs}(t_j)) \cdot \frac{\partial f(H_k^j)}{\partial \theta_s} \right) + \lambda (\theta_s - \theta_s^0) \end{aligned} \quad (2.42)$$

$$\begin{aligned} \nabla_{\eta} J(Par) &= \Delta t \Delta z \sum_{j=1}^M \left(\sum_{k=1}^{N-1} \sum_{s=k-1}^{k+1} \frac{\partial A_{ks}}{\partial \eta} (H^{j-1}, Par) \cdot H_s^j P_k^j \right) + \\ &\Delta t \Delta z \sum_{j=1}^M \left(\sum_{k=1}^{N-1} \frac{\partial F_k}{\partial \eta} (H^{j-1}, Par) \cdot P_k^j \right) + \lambda (\eta - \eta^0) \end{aligned} \quad (2.43)$$

$$\begin{aligned} \nabla_n J(Par) &= \Delta t \Delta z \sum_{j=1}^M \left(\sum_{k=1}^{N-1} \sum_{s=k-1}^{k+1} \frac{\partial A_{ks}}{\partial n} (H^{j-1}, Par) \cdot H_s^j P_k^j \right) + \Delta t \Delta z \sum_{j=1}^M \times \\ &\left(\sum_{k=1}^{N-1} \frac{\partial F_k}{\partial n} (H^{j-1}, Par) \cdot P_k^j + \sum_{k=1}^{N-1} (I_{cal}(t_j) - I_{obs}(t_j)) \cdot \frac{\partial f(H_k^j)}{\partial n} \right) + \lambda (n - n^0) \end{aligned} \quad (2.44)$$

$$\begin{aligned} \nabla_{\theta_{ini}} J(Par) &= -\Delta t \Delta z \sum_{j=1}^M \left(N \cdot (I_{cal}(t_j) - I_{obs}(t_j)) + K_{\frac{1}{2}}^{j-1} \cdot \frac{\partial h_{ini}}{\partial \theta_{ini}} \cdot P_1^j \right) \\ &+ \lambda (\theta_{ini} - \theta_{ini}^0) \end{aligned} \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} \nabla_{\theta_{surf}} J(Par) &= \frac{\Delta t \Delta z}{2} \sum_{j=1}^M \left((I_{cal}(t_j) - I_{obs}(t_j)) + \frac{K(H_1^{j-1})}{K_{\frac{1}{2}}^{j-1}} \cdot \frac{\partial h_{surf}}{\partial \theta_{surf}} \cdot H_1^j \cdot P_1^j \right. \\ &\left. - (h_{ini} + \Delta t) \cdot \frac{K(H_1^{j-1})}{K_{\frac{1}{2}}^{j-1}} \cdot \frac{\partial h_{surf}}{\partial \theta_{surf}} \cdot P_1^j \right) + \lambda (\theta_{surf} - \theta_{surf}^0) \end{aligned} \quad (2.46)$$

$$\begin{aligned} \nabla_{\theta_{fond}} J(Par) &= \frac{\Delta t \Delta z}{2} \sum_{j=1}^M \left((I_{cal}(t_j) - I_{obs}(t_j)) + \frac{K(H_{N-1}^{j-1})}{K_{N-\frac{1}{2}}^{j-1}} \cdot \frac{\partial h_{fond}}{\partial \theta_{fond}} \cdot H_{N-1}^j \cdot P_{N-1}^j \right. \\ &\left. - (2 \cdot K_{N-\frac{1}{2}}^{j-1} + \frac{K(H_{N-1}^{j-1})}{K_{N-\frac{1}{2}}^{j-1}} \cdot \frac{\partial h_{fond}}{\partial \theta_{fond}}) \cdot P_{N-1}^j \right) + \lambda (\theta_{fond} - \theta_{fond}^0) \end{aligned} \quad (2.47)$$

Dans ces relations, f est la fonction qui permet de passer de $\theta(z, t)$ à $h(z, t)$; h_{ini} , h_{surf} , h_{fond} sont la condition initiale et les conditions aux limites du modèle direct et sont fonctions des paramètres.

Ainsi pour évaluer le gradient discret de notre fonction coût il faut résoudre le modèle direct (2.30) et le modèle adjoint (2.38) puis appliquer les formules (2.40),(2.42),(2.43), (2.43),(2.45), (2.46),(2.46), (2.47).

2.4.4 Test de précision du gradient

Dans le processus d'optimisation, il est indispensable de calculer correctement le gradient de la fonction coût par rapport à la variable de contrôle afin de trouver la bonne direction de descente. L'exactitude du calcul du gradient agit sur la vitesse de convergence de la minimisation et sur la valeur correcte du paramètre de contrôle optimal. Ainsi, avant d'entamer la phase d'optimisation proprement dite, on va vérifier l'exactitude du calcul du gradient de la fonction coût qui est obtenu par la méthode adjointe.

Pour tester le gradient, Courtier [14] a montré que le test efficace est fondé sur le développement de Taylor à l'ordre 1 de la fonctionnelle J . On écrit le développement de Taylor au point $U + \alpha w$ avec une perturbation αw , choisie de sorte que w , direction fixée, soit de norme 1, ensuite on fait tendre α vers 0. Ainsi pour,

$$J(U + \alpha w) - J(U) = \alpha \langle \nabla J(U), w \rangle + O(\alpha),$$

l'exactitude du gradient de la fonction coût est calculé en estimant :

$$\nu(\alpha) = \frac{J(U + \alpha w) - J(U)}{\alpha \cdot \langle \nabla J(U), w \rangle}, \quad (2.48)$$

et nous devons avoir :

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \nu(\alpha) = 1 \quad (2.49)$$

Nous avons implémenté ce test avec comme condition initiale et conditions aux limites : $\theta_{ini} = 8.2 \times 10^{-2} cm/cm$, $\theta_{surf} = 0.312 cm/cm$; $\theta_{fond} = 8.2 \times 10^{-2} cm/cm$, soit $h_{ini}(Par) = -87.72 cm$, $h_{surf}(Par) = 0 cm$ et $h_{fond}(Par) = -87.72 cm$. Nous avons pris $w = \frac{\nabla J(U)}{\|\nabla J(U)\|_2}$ comme direction de perturbation. Les données d'infiltration cumulées analytiques sont calculées avec comme paramètres d'entrées $\theta_{ini} = 8.210^{-2} cm/cm$, $\theta_{surf} = 0.312 cm/cm$, $\theta_{fond} = 8.210^{-2} cm/cm$ pour l'initialisation du modèle direct et les données d'infiltration cumulée analytique sont obtenues par le modèle direct. Les valeurs de ce test sont données dans le tableau (2.1).

Du tableau (2.1) on observe que $\nu(\alpha)$ tend vers 1 lorsque α tend vers 0 de façon uniforme : au début, $\alpha \leq 2^{-14}$ la précision obtenue est relativement faible, en revanche pour $\alpha \geq 2^{-16}$ le gradient de la fonction coût évalué en utilisant la méthode adjointe donne une bonne précision, car ça se stabilise autour de la racine de la précision machine (compris entre la convergence et les erreurs d'arrondi).

2.4.5 Expériences numériques

A présent que nous sommes en possession du gradient discret de la fonction coût obtenu en utilisant la variable adjointe, nous allons tester dans cette partie, la capacité du système adjoint à assimiler le paramètre de contrôle optimal. Nous allons utiliser les données d'infiltration cumulée (observations) simulées à partir du modèle direct. Ces observations seront distribuées suivant des configurations temporelles différentes. Nous

α	ν	α	ν	α	ν
2^{-11}	2.1569140919	2^{-23}	1.0002917866	2^{-35}	0.99994448022
2^{-12}	1.6575275331	2^{-24}	1.0001178511	2^{-36}	0.99994396152
2^{-13}	1.3211655791	2^{-25}	1.0000308824	2^{-37}	0.99994472837
2^{-14}	1.1593913083	2^{-26}	0.9999873986	2^{-38}	0.99994519527
2^{-15}	1.0793841029	2^{-27}	0.9999656547	2^{-39}	0.99994519527
2^{-16}	1.0406355858	2^{-28}	0.9999547891	2^{-40}	0.99994507159
2^{-17}	1.0215405012	2^{-29}	0.99994934661	2^{-41}	0.99994019844
2^{-18}	1.0109859608	2^{-30}	0.99994664755	2^{-42}	0.99998279522
2^{-19}	1.0054983820	2^{-31}	0.99994526890	2^{-43}	1.00005166248
2^{-20}	1.0027254365	2^{-32}	0.99994461425	2^{-44}	1.00002672778
2^{-21}	1.0013352240	2^{-33}	0.99994436388	2^{-45}	1.00025034851
2^{-22}	1.0006396404	2^{-34}	0.99994403574	2^{-46}	1.00075062562

TAB. 2.1 – Test de précision du gradient de la fonction coût

utiliserons successivement les données générées à tous les pas de temps, toutes les 60 secondes, toutes les 300 secondes et enfin toutes les 720 secondes afin de se mettre dans le cadre des données collectables sur le plan physique. Ensuite nous considérerons un jeu de données d'infiltration de terrain d'un sable de Grenoble.

Les paramètres de départ sont ceux d'un sable de Grenoble. Ce sont les mêmes paramètres que nous avons utilisés dans le paragraphe 2.4.4. Ces paramètres sont en outre utilisés comme observation du vecteur de paramètres dans la fonction coût. Nous faisons l'hypothèse $\theta_{fond} = \theta_{ini}$ ce qui permet d'avoir à l'initialisation du modèle direct $h_{ini}(Par) = h_{fond}(Par)$ ce qui du reste ne change rien au problème mais sera plutôt un indicateur d'exfiltration ou non à la fin de l'identification. Les simulations sont faites sur le sable de Grenoble et nous avons pris une profondeur $Z = 100$ cm et le temps de simulation est $T = 3600$ s. Les pas de discrétisations sont $\Delta z = 1$ cm en hauteur et $\Delta t = 10$ s en temps.

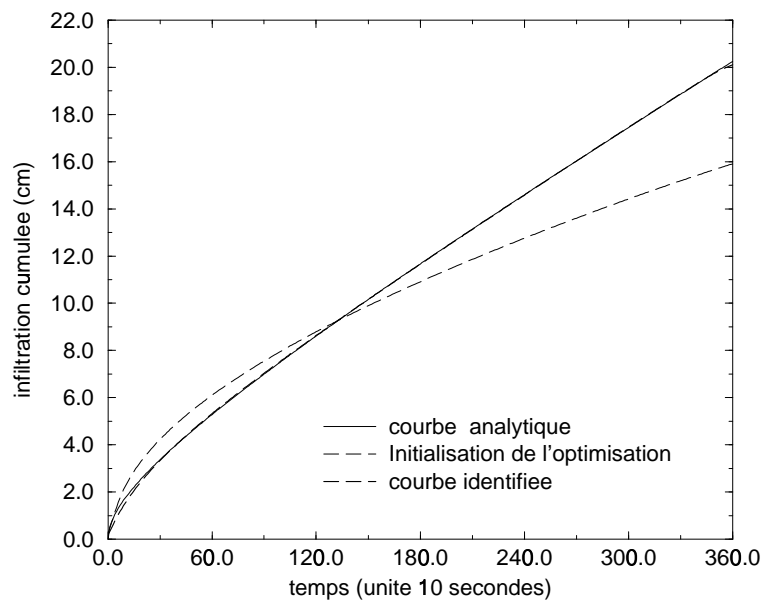
Nous commençons par une série d'expériences dans laquelle la fonction coût n'est pas pénalisée.

2.4.6 Expériences sans pénalisation : $\lambda = 0$

Données d'infiltration analytiques continues

Pour ce premier test nous avons utilisé les données d'infiltration simulées à tous pas de temps pour permettre à l'optimiseur d'avoir plus d'informations. L'application de la méthode décrite ci-dessus nous a donné les résultats suivants :

	Initialisation	Résultat	Valeur de référence
K_s	0.00188	3.6386×10^{-3}	4.28×10^{-3}
h_g	-15.8399	-15.83965	-16.40
θ_s	0.25	0.2861	0.312
η	4.973	4.9743	6.73
n	2.345	3.3702	2.79
θ_{ini}	0.0423	6.001×10^{-2}	8.16×10^{-2}
θ_{surf}	0.244	0.3755	0.312
θ_{fond}	0.242	4.0779×10^{-2}	8.16×10^{-2}

TAB. 2.2 – Tableau des paramètres identifiés : *données analytiques continues*FIG. 2.2 – Infiltrations cumulées simulée et identifiée : *données analytiques continues*

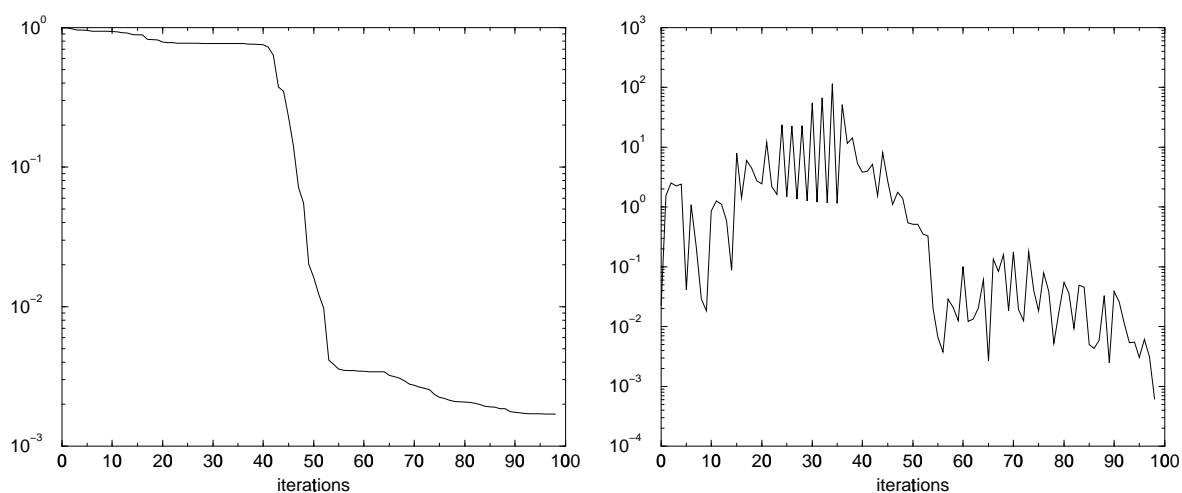


FIG. 2.3 – Variations de $\frac{J_k}{J_0}$ à gauche, et de $\frac{\|\nabla J_k\|}{\|\nabla J_0\|}$ à droite au cours des itérations : *données analytiques continues*

Données d'infiltration cumulée analytique distribuées toutes les 60 secondes

Nous avons donc, pour ce deuxième test, distribué les données toutes les 60 secondes. L'optimiseur nous a donné les résultats suivants :

	Initialisation	Résultat	Valeur réelle
K_s	0.00186	3.6044×10^{-3}	4.28×10^{-3}
h_g	-15.8399	-15.0095	-16.40
θ_s	0.25	0.3213	0.312
η	4.973	4.9748	6.73
n	2.345	2.3787	2.79
θ_{ini}	0.0423	7.041×10^{-2}	8.16×10^{-2}
θ_{surf}	0.244	0.3522	0.312
θ_{fond}	0.242	4.3116×10^{-2}	8.16×10^{-2}

TAB. 2.3 – Tableau des paramètres identifiés : *données discrètes toutes les 60 secondes*

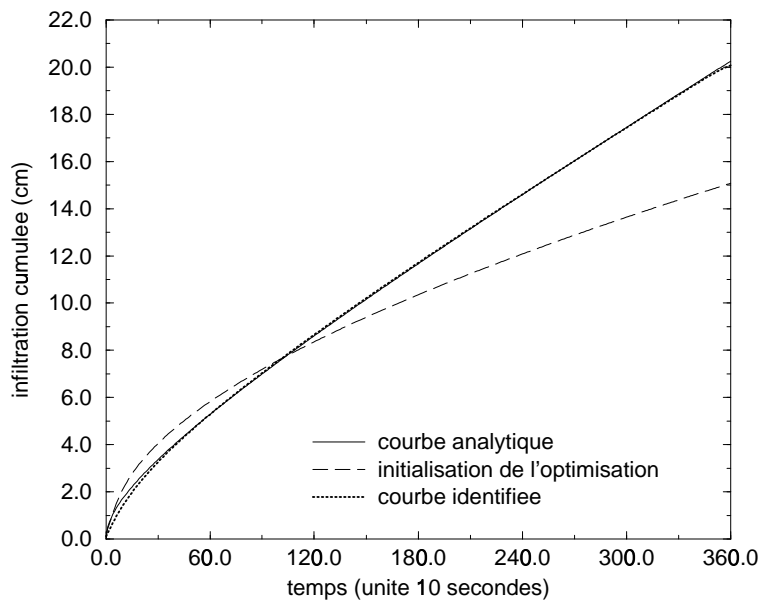


FIG. 2.4 – Infiltrations cumulées simulée et identifiée : *données discrètes toutes les 60 secondes*

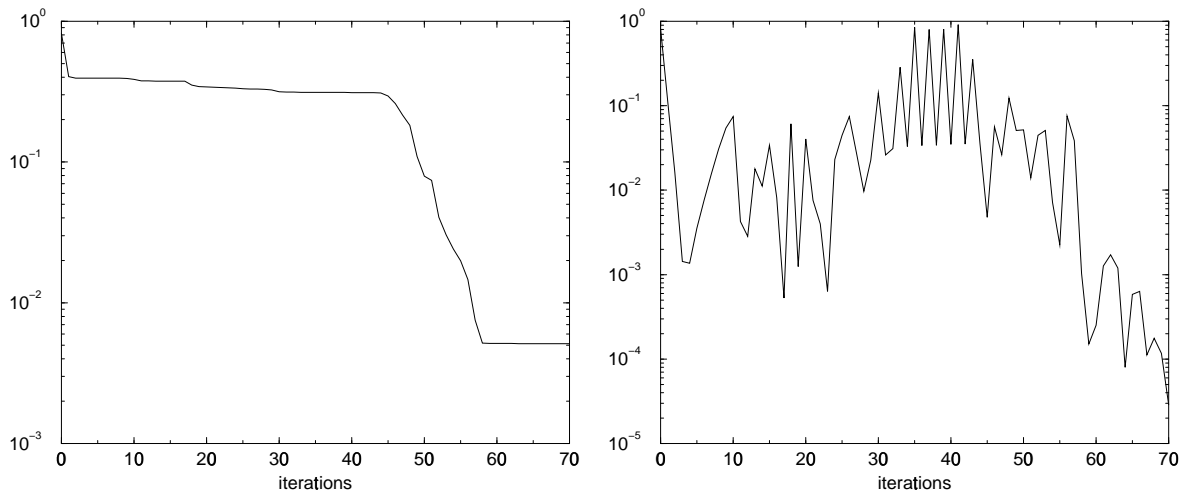


FIG. 2.5 – Variations de $\frac{J_k}{J_0}$ à gauche, et de $\frac{\|\nabla J_k\|}{\|\nabla J_0\|}$ à droite au cours des itérations : *données analytiques distribuées toutes les 60 secondes*

Données distribuées toutes les 300 secondes

Nous avons pour ce troisième test, distribué les données toutes les 300 secondes. Les résultats sont les suivants :

	Initialisation	Résultat	Valeur réelle
K_s	0.00196	4.1279×10^{-3}	4.28×10^{-3}
h_g	-15.94	-15.940	-16.40
θ_s	0.233	0.2221	0.312
η	4.973	4.9728	6.73
n	2.345	2.3449	2.79
θ_{ini}	0.06	2.3449	8.16×10^{-2}
θ_{surf}	0.225	8.2131×10^{-2}	0.312
θ_{fond}	0.222	0.1967	8.16×10^{-2}

TAB. 2.4 – Tableau des paramètres identifiés : *données discrètes toutes les 300 secondes*

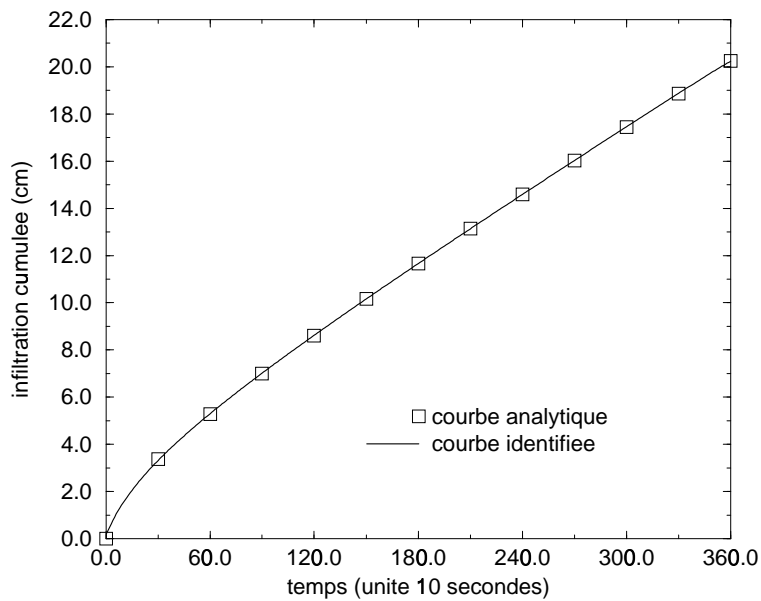


FIG. 2.6 – Infiltrations cumulées simulée et identifiée : *données analytiques discrètes toutes les 300 secondes*

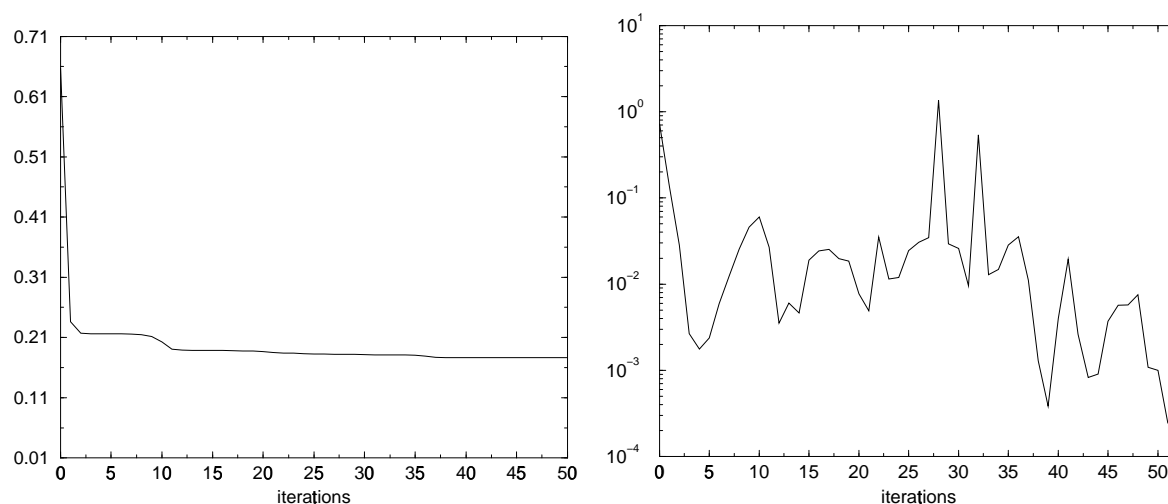


FIG. 2.7 – Variations de $\frac{J_k}{J_0}$ à gauche, et de $\frac{\|\nabla J_k\|}{\|\nabla J_0\|}$ à droite au cours des itérations : données analytiques distribuées toutes les 300 secondes

Données distribuées toutes les 720 secondes

Pour les données distribuées toutes les 720 secondes nous avons obtenu les résultats suivants :

	Initialisation	Résultat	Valeur réelle
K_s	0.00198	3.056×10^{-3}	4.28×10^{-3}
h_g	-15.84	-15.890	-16.40
θ_s	0.243	0.2403	0.312
η	4.973	4.9729	6.73
n	2.365	2.3643	2.79
θ_{ini}	0.055	5.2799×10^{-2}	8.16×10^{-2}
θ_{surf}	0.23	0.23349	0.312
θ_{fond}	0.22	0.22126	8.16×10^{-2}

TAB. 2.5 – Tableau des paramètres identifiés : données discrètes toutes les 720 secondes

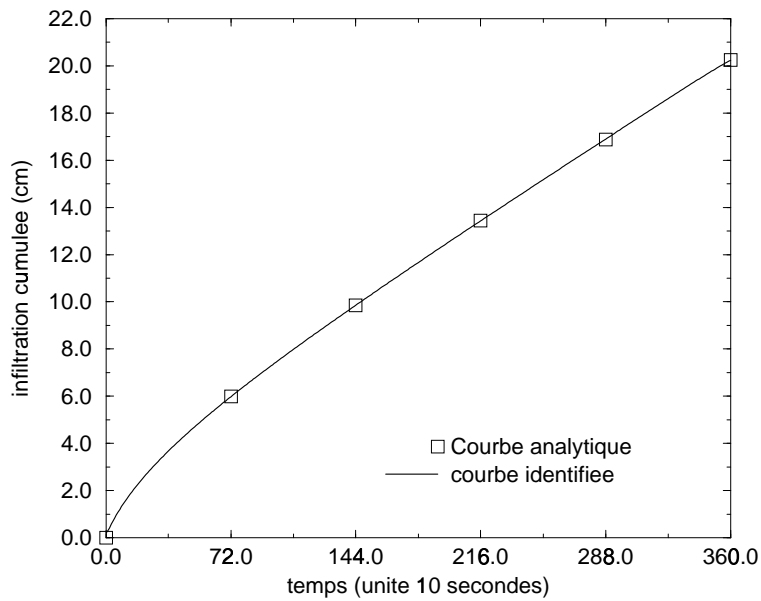


FIG. 2.8 – Infiltrations cumulées simulée et identifiée : *données discrètes toutes les 720 secondes*)

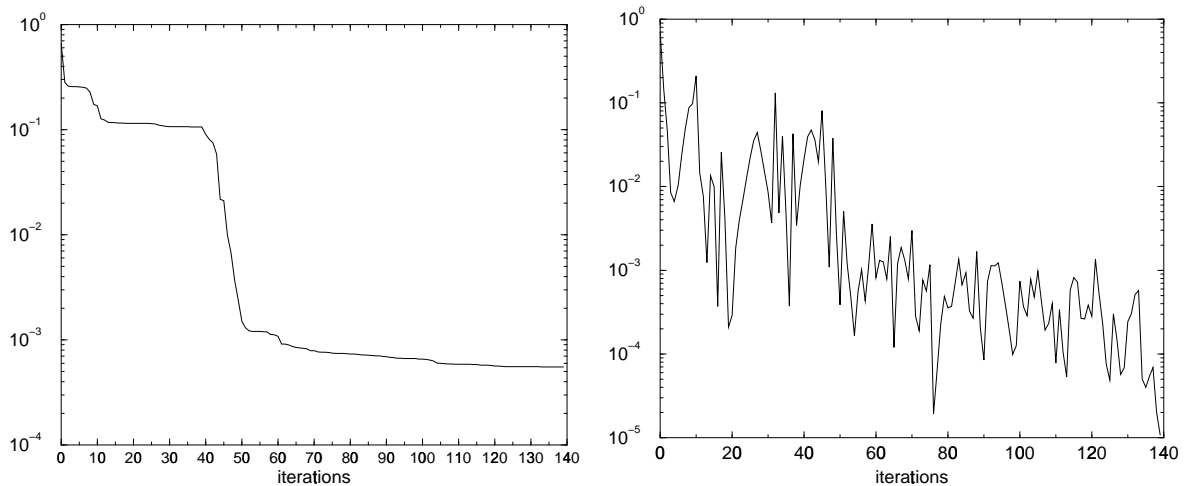


FIG. 2.9 – Variations de $\frac{J_k}{J_0}$ à gauche, et de $\frac{\|\nabla J_k\|}{\|\nabla J_0\|}$ à droite au cours des itérations : *données analytiques distribuées toutes les 720 secondes*

Données de terrain

Les données de terrain que nous utilisons sont récoltées par la méthode décrite dans [103] sur un sable de Grenoble. Nous disposons donc d'un jeu de données constitué de 6 points obtenus aux instants : 250, 802, 1484, 2172, 2954, et 3720 secondes

Pour ces données nous avons trouvé les résultats suivants :

	Valeur de référence	identifiés
K_s	4.28×10^{-3}	1.7793×10^{-3}
h_g	-16.40	-15.8999
θ_s	0.312	0.2879
η	6.73	4.9730
n	2.79	2.3412
θ_{ini}	8.16×10^{-2}	7.4897×10^{-2}
θ_{surf}	0.312	0.2897
θ_{fond}	8.16×10^{-2}	0.2996

TAB. 2.6 – Paramètres identifiés : *données de terrain*

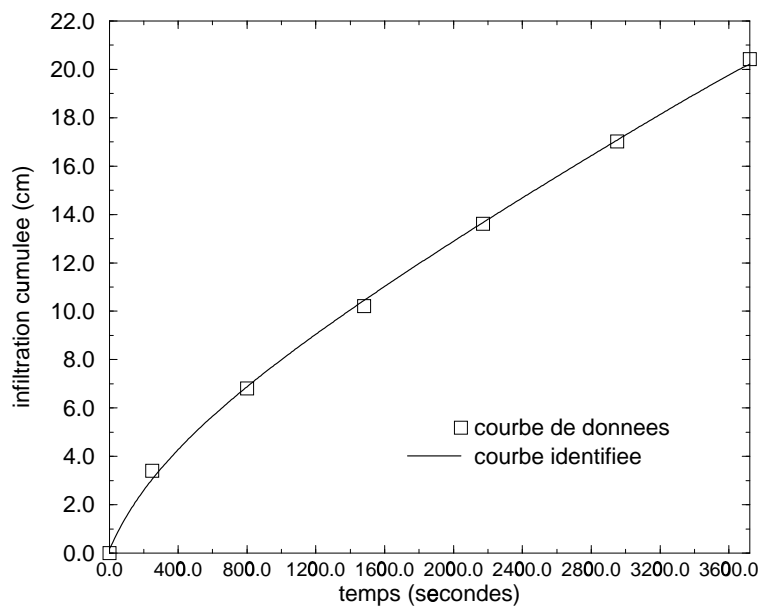


FIG. 2.10 – Infiltrations cumulées simulée et identifiée : *données de terrain*

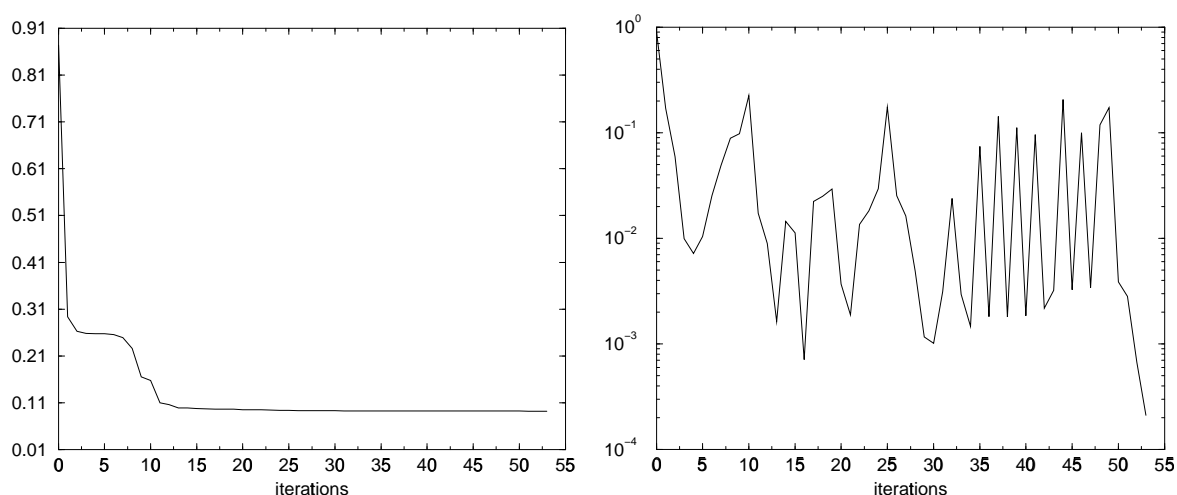


FIG. 2.11 – Variations de $\frac{J_k}{J_0}$ à gauche, et de $\frac{\|\nabla J_k\|}{\|\nabla J_0\|}$ à droite au cours des itérations : données des terrain

Conclusion

Sur les figures (2.3, 2.5, 2.7, 2.9, 2.11), on observe une nette décroissance des valeurs relatives de la fonctionnelle coût et de la norme de son gradient. L'in vraisemblance de certains paramètres identifiés (voir tableaux 2.2, 2.3, 2.4, 2.5, 2.6) par rapport aux valeurs de référence se justifie par les non-linéarités apparaissant dans la fonctionnelle à minimiser. Ceci a pour conséquence, la non-unicité de la solution de notre problème de contrôle optimal et justifie le parfait comportement des infiltrations cumulées identifiées par rapport aux infiltrations de référence (voir figures 2.2, 2.4, 2.6, 2.8, 2.10). Nous allons dans la suite, refaire d'autres expériences numériques en ajoutant un terme de régularisation à la fonction coût et ensuite, tester un préconditionnement diagonal.

2.4.7 Expériences avec pénalisation : $\lambda = 5 \times 10^{-1}$

Nous utilisons ici, les paramètres hydrodynamiques qui nous ont servi à réaliser le test de précision du gradient comme observation du paramètre de contrôle.

Les résultats de ces tests pour les données analytiques continues, discrètes toutes les 60 secondes, discrètes toutes les 300 secondes et discrètes toutes les 720 secondes sont résumés dans le tableau (2.7).

	Référence	Identifié 1	Identifié 2	Identifié 3	Identifié 4
K_s	4.28×10^{-3}	4.1857×10^{-3}	5.3133×10^{-3}	4.3175×10^{-3}	6.6141×10^{-3}
h_g	-16.40	-15.9382	-15.9383	-15.9803	-15.9392
θ_s	0.3124	0.2682	0.3380	0.3361	0.2908
η	6.73	4.9800	4.9793	5.8477	4.9790
n	2.79	5.3973	2.5739	2.8956	3.0985
θ_{ini}	8.16×10^{-2}	6.7109×10^{-2}	9.8996×10^{-2}	1.16×10^{-2}	5.7139×10^{-2}
θ_{surf}	0.312	0.2684	0.3280	0.3355	0.2669
θ_{fond}	8.16×10^{-2}	0.2679	0.13779	0.2606×10^{-2}	0.2551

TAB. 2.7 – Tableau des paramètres identifiés : 1, 2, 3 et 4 correspondant respectivement aux cas de données analytiques continues, discrètes toutes 60 secondes, toutes les 300 secondes et discrètes toutes les 720 secondes; avec la fonction coût pénalisée

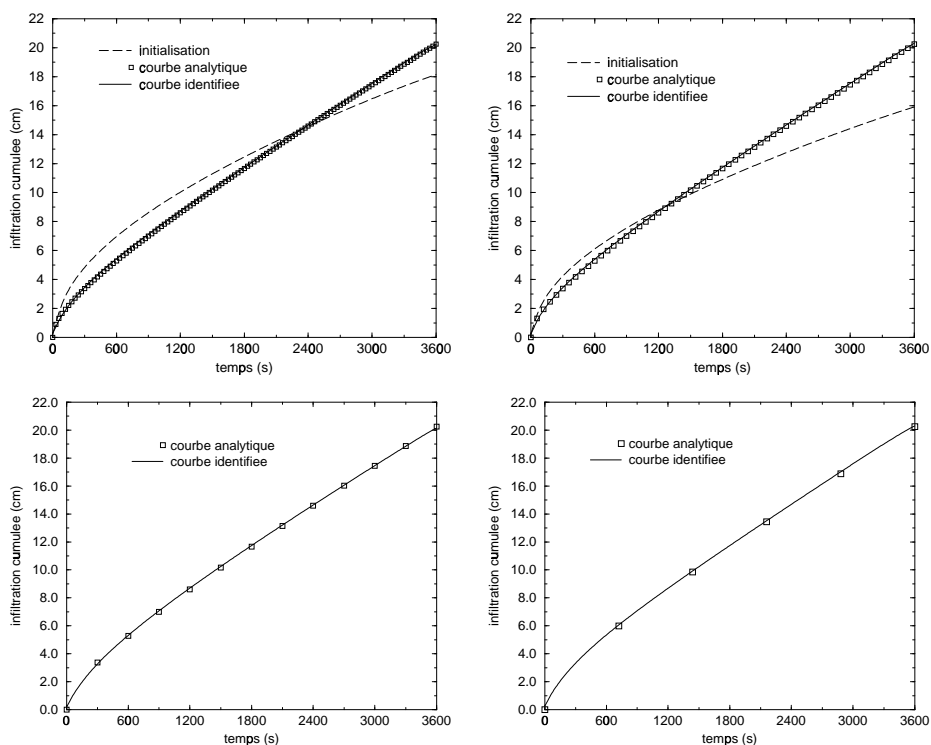


FIG. 2.12 – Infiltrations cumulées simulée et identifiée : au dessus à gauche données analytiques continues, à droite données discrètes toutes les 60 secondes; au dessous à gauche toutes les 300 secondes et à droite toutes les 720 secondes.

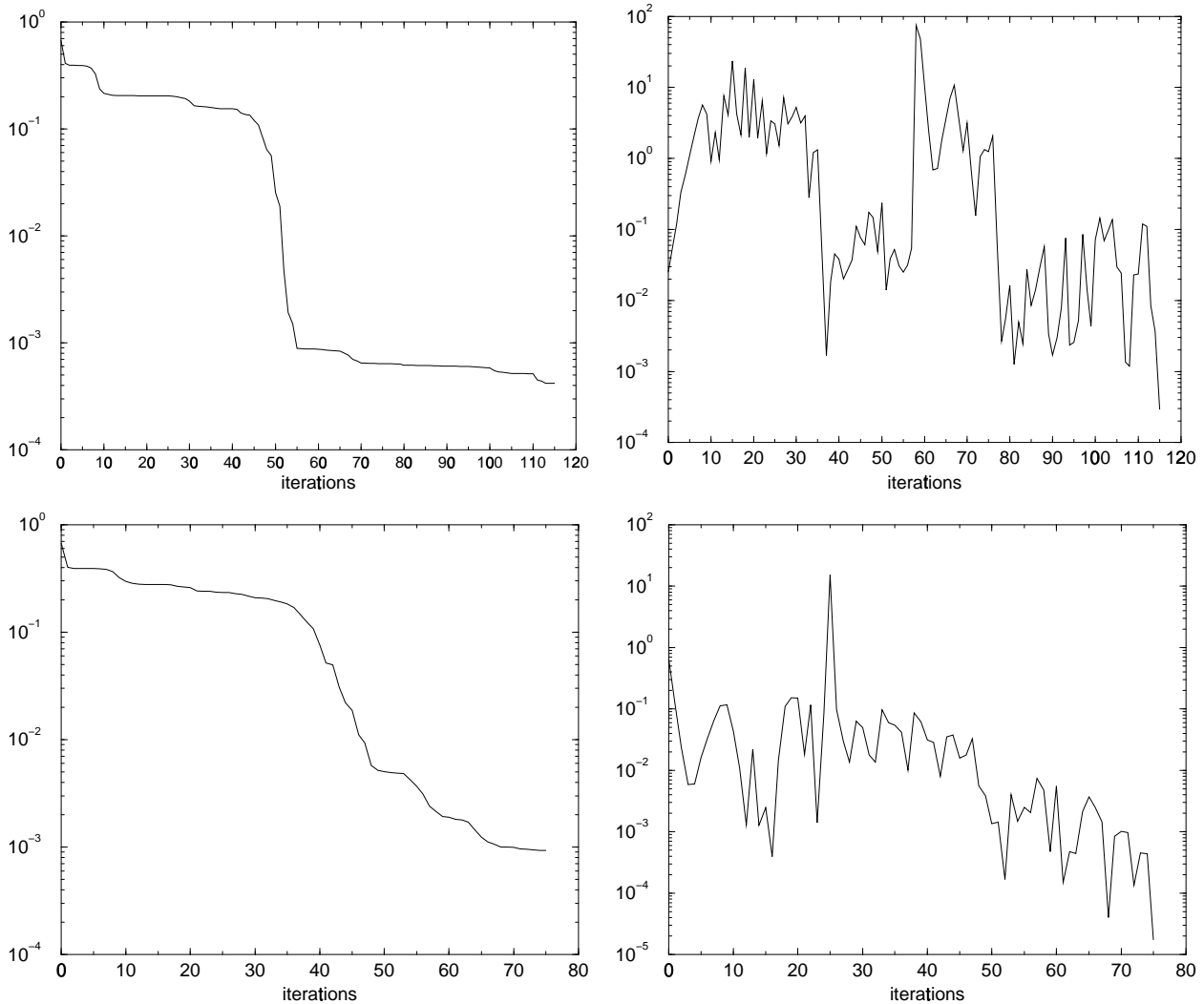


FIG. 2.13 – Variations de $\frac{J_k}{J_0}$ à gauche, et de $\frac{\|\nabla J_k\|}{\|\nabla J_0\|}$ à droite au cours des itérations : au dessus données analytiques continues, au dessous données analytiques discrètes toutes les 60 secondes.

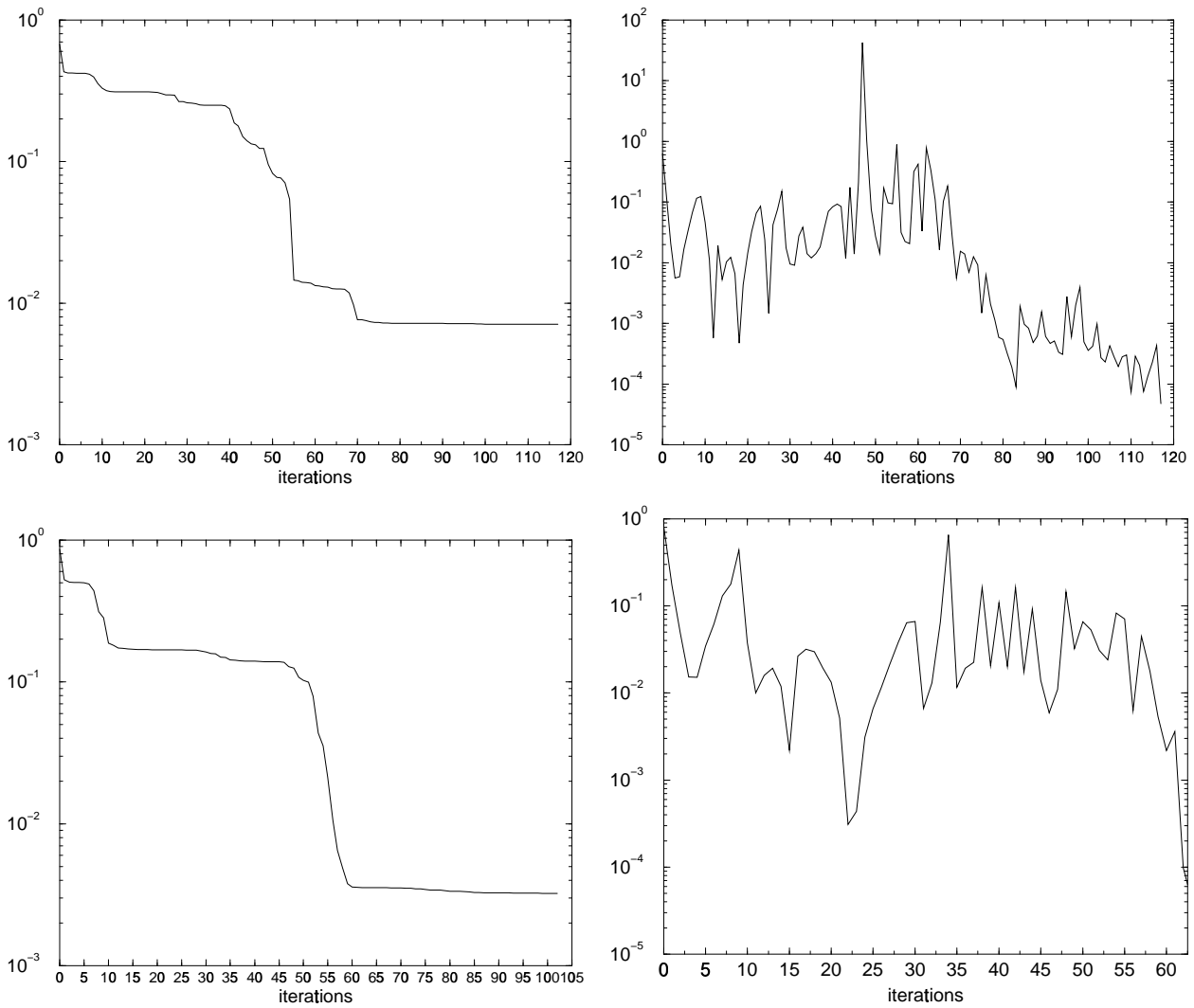


FIG. 2.14 – Variations de $\frac{J_k}{J_0}$ à gauche, et de $\frac{\|\nabla J_k\|}{\|\nabla J_0\|}$ à droite au cours des itérations : au dessus données analytiques discrètes toutes 300 secondes, au dessous données analytiques discrètes toutes les 720 secondes.

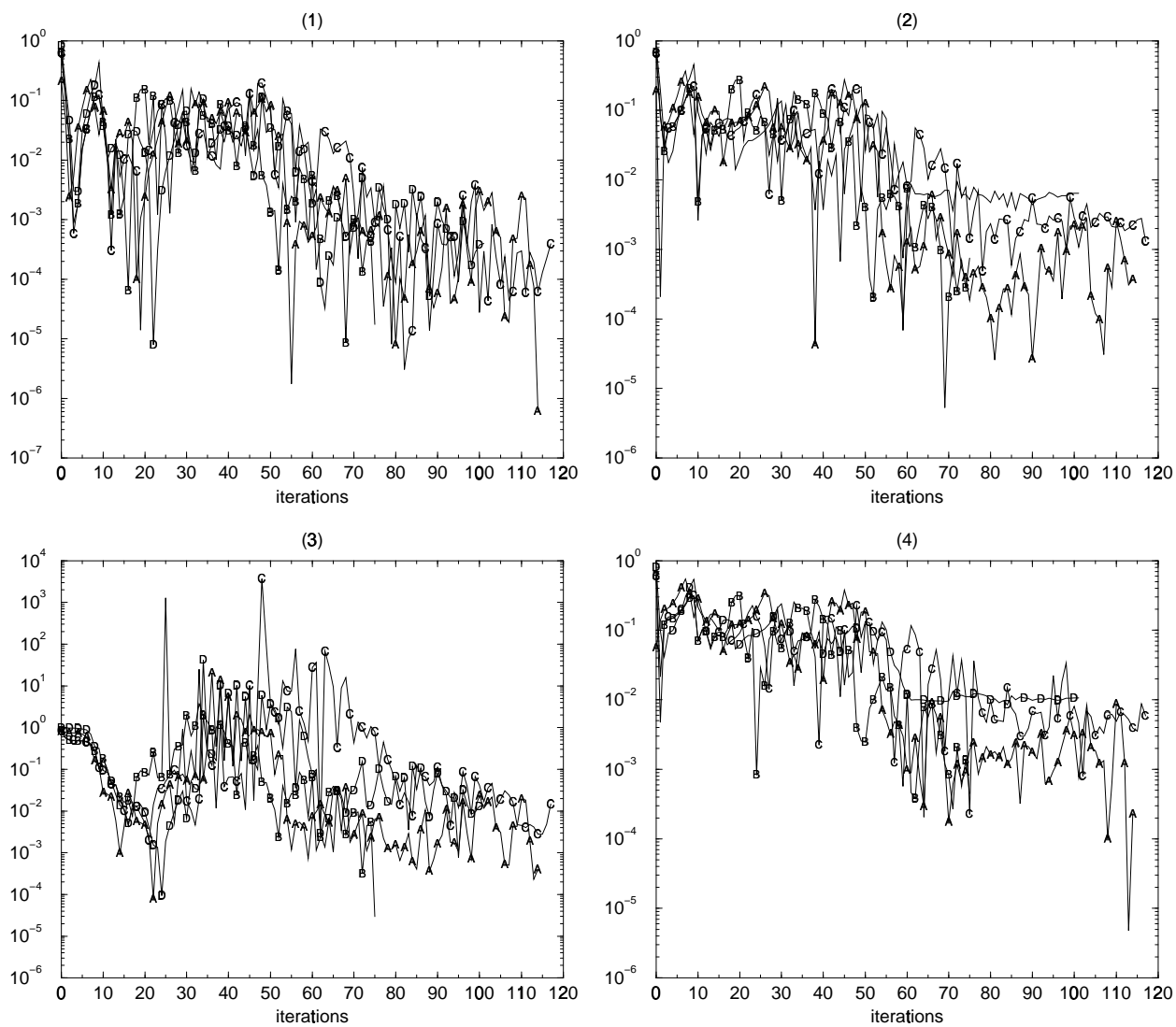


FIG. 2.15 – Evolution des composantes du gradient $|\nabla J_k|/|\nabla J_0|$ au cours des itérations. Les légendes A, B, C, D correspondent respectivement aux données analytiques continues, discrètes toutes les 60 secondes, discrètes toutes les 300 secondes et discrètes toutes les 720 secondes

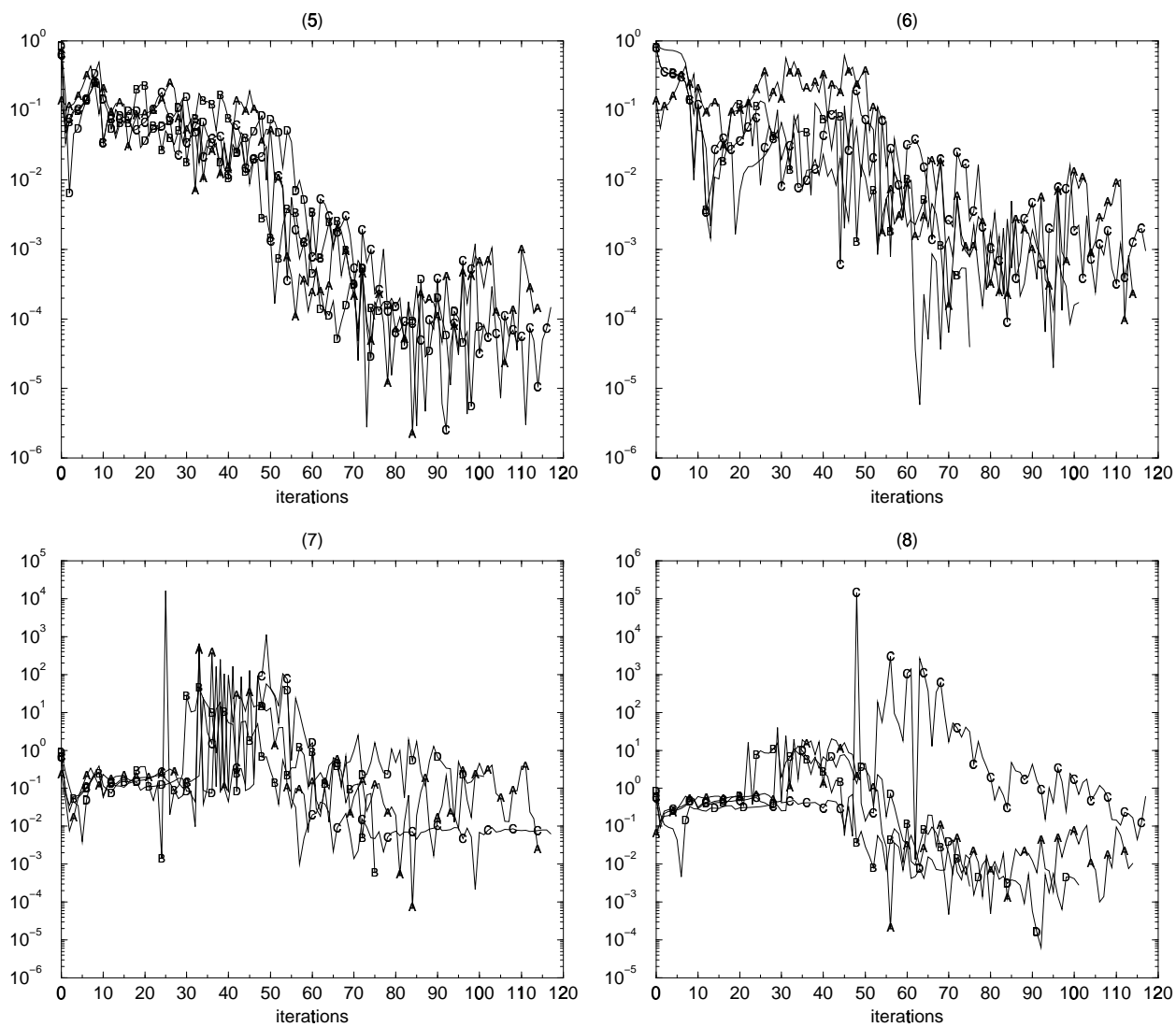


FIG. 2.16 – Evolution des composantes du gradient $|\nabla J_k|/|\nabla J_0|$ au cours des itérations. Les légendes A, B, C, D correspondent respectivement aux données analytiques continues, discrètes toutes les 60 secondes, discrètes toutes les 300 secondes et discrètes toutes les 720 secondes

Données de terrain

	Valeur de référence	identifiés
K_s	4.28×10^{-3}	3.5621×10^{-3}
h_g	-16.40	-15.8999
θ_s	0.312	0.2879
η	6.73	4.9733
n	2.79	3.3007
θ_{ini}	8.16×10^{-2}	2.1785×10^{-2}
θ_{surf}	0.312	0.2904
θ_{fond}	8.16×10^{-2}	0.2959

TAB. 2.8 – Paramètres identifiés : données de terrain : fonction coût pénalisée

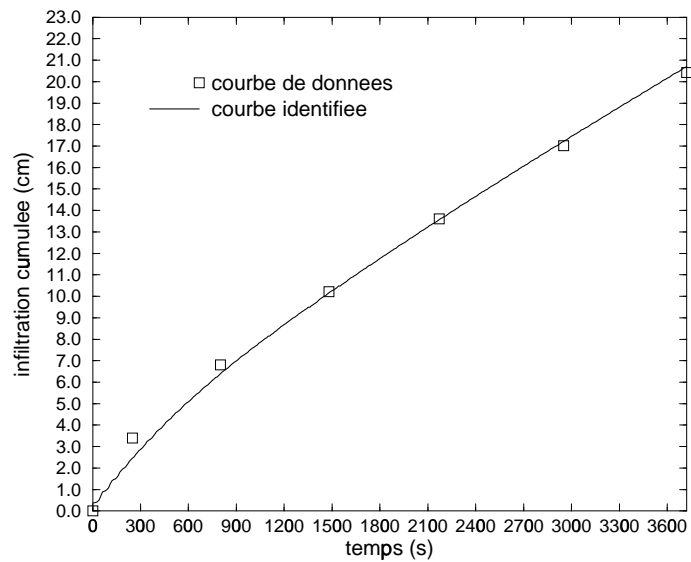


FIG. 2.17 – Infiltrations cumulées simulée et identifiée : données de terrain (fonction coût régularisée)

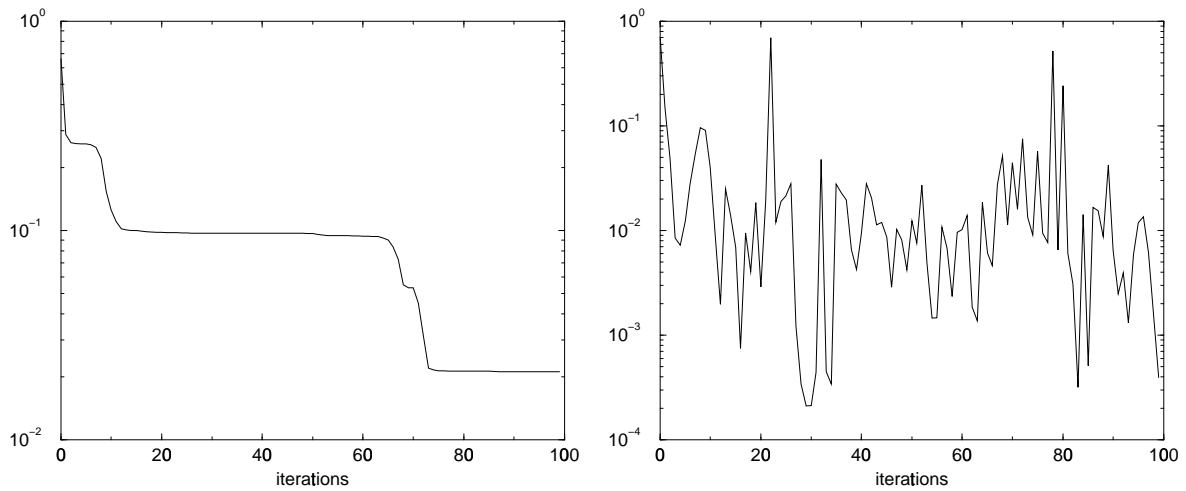


FIG. 2.18 – Variations $\frac{J_k}{J_0}$ à gauche, et de $\frac{\|\nabla J_k\|}{\|\nabla J_0\|}$ à droite au cours des itérations (données de terrain)

Remarque 2.5 *Le choix des différentes initialisations de l'optimisation s'est fait de manière aléatoire. On se rend compte à travers la figure (2.19), que ce choix est très délicat et prend un temps très considérable dans le processus d'optimisation. Nous avons essayé au fur et à mesure que les données d'infiltration cumulées simulées diminuaient, des initialisations pour lesquelles l'infiltration cumulée au bout de 1 heure est supérieure à 15cm, l'optimisation ne parvient pas à aller au delà de 20 itérations et le résultat n'est guère appréciable. L'allure de la fonction coût (c.f. graphes 2.20) peut être une des justifications.*

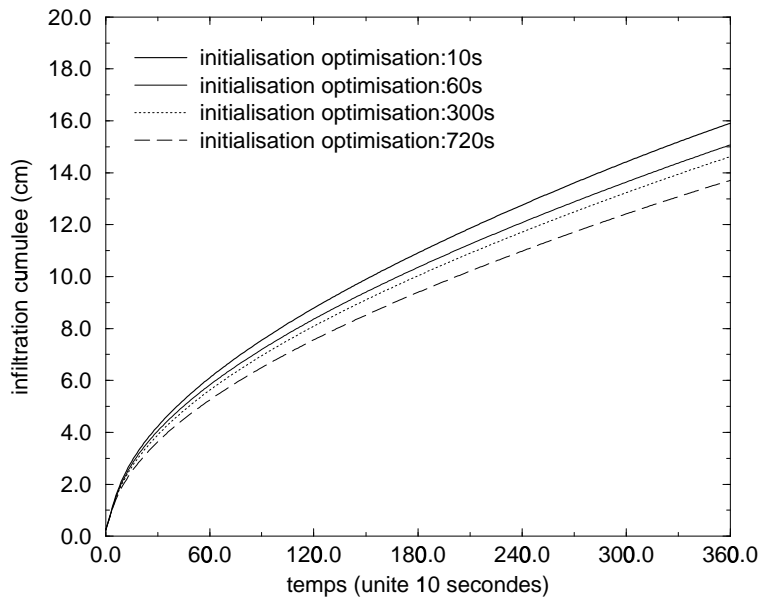


FIG. 2.19 – Choix du *first guess* pour l'optimisation

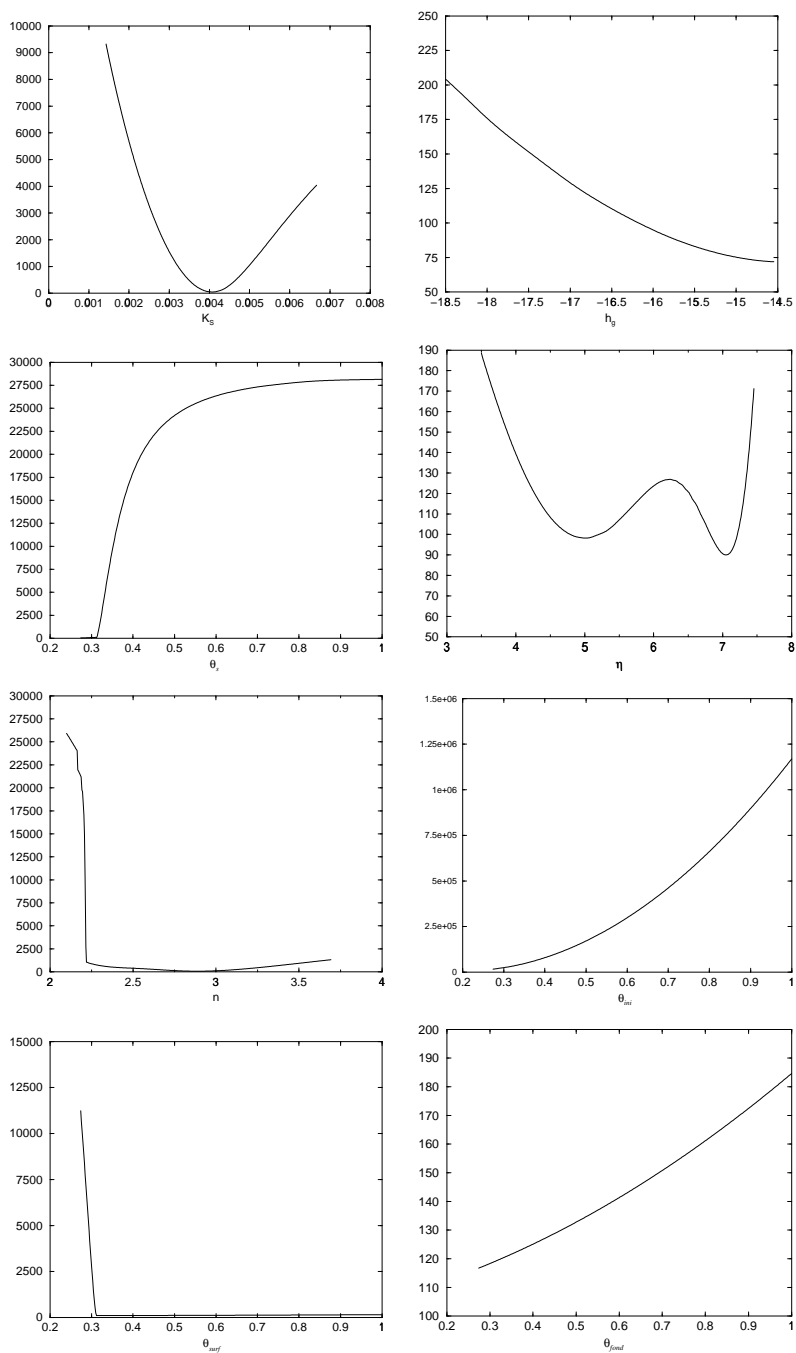


FIG. 2.20 – Coupe de la fonction coût $J(K_s, h_g, \theta_s, \eta, n, \theta_{ini}, \theta_{surf}, \theta_{fond})$ au voisinage de vecteur de paramètres de référence avec données analytiques discrètes toutes les 300 secondes

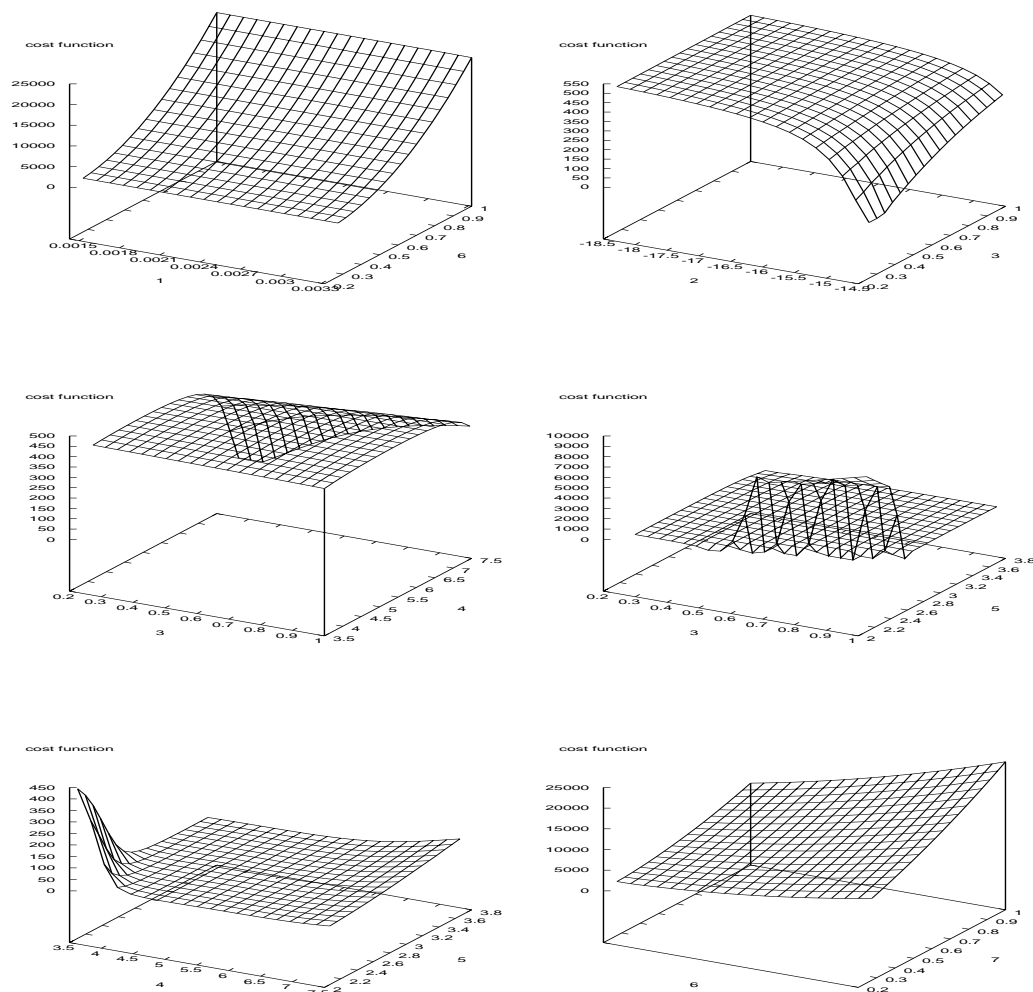


FIG. 2.21 – Représentation en dimension 3 de la fonction coût : $J(K_s, \cdot, \cdot, \cdot, \cdot, \theta_{ini}, \cdot, \cdot)$, $J(\cdot, hg, \theta_s, \cdot, \cdot, \cdot, \cdot, \cdot)$, $J(\cdot, \cdot, \theta_s, \eta, \cdot, \cdot, \cdot, \cdot)$, $J(\cdot, \cdot, \theta_s, \cdot, n, \cdot, \cdot, \cdot)$, $J(\cdot, \cdot, \cdot, \eta, n, \cdot, \cdot, \cdot)$, $J(\cdot, \cdot, \cdot, \cdot, \cdot, \theta_s, \theta_{surf}, \cdot)$ au voisinage de l'optimum : données de terrain

2.4.8 Commentaires

Les tableaux des paramètres identifiés (2.2),(2.3), (2.4),(2.5),(2.6), (2.8), (2.7), nous montrent que le processus d'identification nous fournit des paramètres assez proches des valeurs réelles. La conductivité hydraulique qui est l'un des paramètres les plus significatifs car décrivant la dynamique des mouvements de l'eau dans le sol, est au cours de nos différentes expériences de minimisation bien reconstituée. Nous avons également la condition initiale qui est assez bien reconstruite, c'est aussi d'une importance certaine car sur les sites où l'on réalise généralement la campagne de données, on ne dispose pas une véritable information sur la teneur en eau initiale (i.e θ_{ini}). Par ailleurs c'est l'un des paramètres le plus sensible (entre autres K_s , θ_s , θ_{surf} et θ_{fond}) qui semble bien identifié (voire courbes des figures 2.15 et 2.16)

L'ajout sur la fonctionnelle coût des termes de pénalisation, ne change pas significativement les résultats. Le choix des paramètres de pénalisation (λ et l'observation du paramètre de contrôle) n'est pas toujours aisé ; la valeur de λ choisie ici nous a permis de conserver sensiblement un nombre d'itérations identique à celui des premières expériences (sans pénalisation).

Pour les données de terrain, les infiltrations identifiées et observées coïncident parfaitement d'après les figures (2.10) et (2.17). Ceci traduit le fait que le vecteur de paramètres optimal dans la mesure du possible, ajuste au mieux les infiltrations cumulées.

La forme relativement plate de la fonction coût, au voisinage de l'optimum pour les données de terrain est facilement discernable en traçant les courbures de la fonction coût suivant certaines directions du paramètre (Figure 2.21).

Cependant, les écarts qu'on peut constater sont à notre avis de plusieurs origines :

- Le problème est fortement non-linéaire : non seulement le modèle (c'est-à-dire les équations) mais en plus la dépendance de la fonction coût par rapport aux paramètres. La fonctionnelle à minimiser n'est évidemment pas quadratique, et donc on ne peut trouver que de minima locaux, qui à leur tour dépendent du point de départ de la minimisation. Les écarts qui apparaissent dans les valeurs identifiées résident aussi dans le fait qu'il n'y a pas de solution unique à notre problème de contrôle optimal.
- Il existe une corrélation principalement entre K_s et θ_s d'une part et entre η et n d'autre part. Et ces paramètres ont tous été traités comme des paramètres indépendants les uns des autres. Or la variation d'un des paramètres affecte les autres. Les résultats semblent ressortir cette réalité de façon automatique.
- Le code numérique fournit une courbe d'identification cumulée légèrement différente de la courbe analytique, pour le même vecteur de paramètres (troncature, discrétisation). L'identification utilisant ce code produira donc de ce fait des paramètres légèrement différents des paramètres exacts.

Les variables de contrôle de notre problème de contrôle optimal ont des ordres de grandeurs très disparates. Une procédure couramment utilisée en optimisation consiste à préconditionner le problème, la meilleure approche est d'utiliser la matrice de covariance. Ne disposant pas de cette matrice de covariance, nous allons adimensionnaliser le problème de façon que les résultats soient indépendants du système d'unité. Ce qui revient à préconditionner le problème diagonalement. Nous allons nous servir des ordres de grandeurs des différentes variables de contrôle. Ainsi, nous les définirons de la façon suivante :

$$\begin{aligned} & K_s/5 \times 10^{-3}, \quad h_g/20, \quad \theta_s/0.3, \quad \eta/7, \\ & n/3, \quad \theta_{ini}/8 \times 10^{-3}, \quad \theta_{surf}/0.3, \quad \theta_{fond}/8 \times 10^{-3}. \end{aligned}$$

Cette redéfinition des variables de contrôle doit être prise en compte sur les différentes composantes du gradient de la fonction coût avant d'entamer la phase de minimisation. Les résultats suivant les différentes distributions temporelles des observations sont résumés dans le tableau 2.9.

	Référence	Identifié 1	Identifié 2	Identifié 3	Identifié 4
K_s	4.28×10^{-3}	3.9496×10^{-3}	2.5799×10^{-3}	1.989×10^{-3}	3.5797×10^{-3}
h_g	-16.40	-15.9400	-15.9401	-15.9401	-15.9104
θ_s	0.3124	0.2293	0.2271	0.2271	0.2157
η	6.73	5.472	4.9727	4.9727	4.9721
n	2.79	2.7531	2.3606	2.3606	2.3982
θ_{ini}	8.16×10^{-2}	7.5780×10^{-2}	6.500×10^{-2}	7.200×10^{-2}	7.560×10^{-2}
θ_{surf}	0.312	0.3615	0.3733	0.37335	0.4291
θ_{fond}	8.16×10^{-2}	0.2314	0.2193	0.2193	0.1528

TAB. 2.9 – Tableau des paramètres identifiés avec les variables adimensionnelles : 1, 2, 3 et 4 correspondant respectivement aux cas de données analytiques continues, discrètes toutes 60 secondes, toutes les 300 secondes et discrètes toutes les 720 secondes ; avec la fonction coût pénalisée ($\lambda = 5.10^{-1}$)

Ce préconditionnement diagonale n'améliore pas les résultats. Pour espérer une amélioration significative, la matrice de préconditionnement devrait être la matrice de covariance. Malheureusement, cette matrice est très difficilement accessible. Une autre piste à explorer se trouve dans les études au second ordre [104, 43].

2.5 Conclusion

Ce chapitre montre que les méthodes d'assimilation variationnelle de données largement utilisées pour les modèles météorologique et océanographique peuvent être appliquées aux problèmes d'hydrologie, pour des problèmes d'identification des paramètres hydrodynamiques d'un modèle d'écoulement souterrain en zone non-saturée qui ne sont pas toujours accessibles par les mesures expérimentales.

L'étape ultime après cette phase d'identification est de réaliser un travail *a posteriori*

afin de quantifier le processus d'identification. Cette étape, passe forcément par une analyse de sensibilité de la solution du problème de contrôle par rapport aux observations. En effet les observations que nous avons utilisées pour nos expériences numériques sont supposées parfaites c'est-à-dire sans bruits ce qui n'est pas le cas dans la réalité. Cette phase se fait en utilisant les équations adjointes au second ordre [104, 43].

Chapitre 3

Études au second ordre

Plan du chapitre

3.1	Introduction	74
3.2	Rappels sur l'assimilation variationnelle de données : formulation générale	75
3.2.1	Quelques notions de calcul différentiel	76
3.3	Calcul du produit Hessien \times vecteur	78
3.3.1	Système d'optimalité	78
3.3.2	Evaluation du Hessien de la fonctionnelle coût	78
3.3.3	Symétrie du Hessien	81
3.4	Analyse de sensibilité	83
3.4.1	Formalisme général	83
3.4.2	Analyse directe de sensibilité	84
3.5	Sensibilité du contrôle optimal par rapport à un bruit sur les observations	89
3.5.1	Analyse de sensibilité par rapport aux observations : calcul pratique	92
3.6	Application au modèle d'écoulement en zone non-saturée	93
3.6.1	Produit du Hessien de la fonction coût en U^0 par un vecteur	94
3.6.2	Analyse de sensibilité : critères fonctionnels	95
3.7	Résultats numériques	96
3.7.1	Sensibilité des critères fonctionnels	96
3.7.2	Sensibilité du vecteur de paramètres optimal	102
3.8	Sensibilité par rapport à la configuration temporelle des observations	105
3.9	Rôle du Hessien en assimilation variationnelle des données	107
3.9.1	Approche statistique	107
3.9.2	Rôle du Hessien en optimisation	109
3.9.3	Spectre du Hessien et convergence	110
3.10	Conditionnement du Hessien	111
3.10.1	Consistance	111
3.11	Diagonalisation du Hessien par la méthode de Lanczos	112

3.12 Expériences numériques	115
3.12.1 Autres expériences numériques	121
3.13 Conclusion et perspectives	128

3.1 Introduction

Après avoir résolu le problème d'identification, les questions naturelles à se poser sont les suivantes :

- Quel est la part de l'apport de la précision des données observées dans la qualité de la prévision ?
- Quelles sont les données qui sont «importantes» à observer en priorité ?
- Quel est l'effet de la régularisation sur le paramètre identifié ?
- Quel est le «bon choix» de l'opérateur de projection de l'espace d'état dans l'espace des observations produisant une «meilleure» identification ?
- En connaissant les propriétés de l'erreur d'observation (par exemple sa loi de probabilité de distribution) : est-ce-que l'on peut déterminer les propriétés de l'erreur de l'identification ?

Ces questions, dont on devine les enjeux importants, ont toutes un point commun : elles soulèvent le problème de la sensibilité du vecteur du contrôle optimal par rapport aux paramètres d'entrée du problème. Qui dit *sensibilité*, dit *calcul de la dérivée* (ou de la variation). On verra tout au long de ce chapitre que la dérivée du vecteur de contrôle optimal par rapport aux observations s'obtient par inversion du Hessien de la fonction coût. D'où la nécessité, dans une étude a posteriori d'un problème d'identification, de la possibilité d'inverser numériquement le Hessien de la fonction coût. Étant donné l'importance du Hessien, nous allons présenté dans ce chapitre, le problème de contrôle utilisant le Hessien (Le Dimet et al [104, 26], Zou et al [107]). Nous verrons dans la suite comment déduire l'analyse de sensibilité utilisant ce Hessien [81, 66]. L'analyse de sensibilité par rapport aux observations en se limitant au premier ordre produit une surestimation de la sensibilité [81]. Les études se limitant au premier ordre peuvent servir entre autres à analyser la sensibilité de la propagation des erreurs dans les modèles (c.f. Ngnepieba et al [80, 25]), cependant, une bonne analyse de sensibilité par rapport aux observations utilisant les équations adjointes nécessite forcément de passer au second ordre car les observations ne sont accessibles qu'à travers le système d'optimalité. Le coût de calcul est certes double, cependant, le Hessien de la fonction coût obtenu donne une meilleure approximation qu'une simple approximation utilisant le linéaire tangent.

3.2 Rappels sur l'assimilation variationnelle de données : formulation générale

Nous commençons tout d'abord par rappeler ce qu'est l'assimilation variationnelle (c.f. chapitre 2).

Soient V , H et \mathcal{K} (espace de paramètres indépendants) deux espaces de Hilbert tels que $V \subset H$ avec injection continue et dense. Considérons un système dont l'état pendant l'intervalle de temps $[0, T]$ est régi par l'équation d'évolution abstraite (3.1) suivante :

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = F(X, K); \\ X|_{t=0} = u. \end{cases} \quad (3.1)$$

Pour ne pas alourdir les notations sans trop restreindre la généralité, nous identifions l'espace dual H' à H et l'espace dual \mathcal{K}' à \mathcal{K} par la représentation de Riez-Fréchet (Brezis [4]). Supposons que la condition initiale $u \in H$, $K \in \mathcal{K}$ et que F soit un opérateur non-linéaire de $V \times \mathcal{K}$ dans V' , indépendant du temps. La solution X de l'équation (3.1) est alors cherchée dans l'espace des fonctions de $L^2(0, T; V)$ dont les dérivées en temps $\frac{dX}{dt}$ appartiennent à $L^2(0, T; V')$.

Notons par $W(0, T; V)$ cet espace de solutions. Comme les éléments de $W(0, T; V)$ sont continus dans H par rapport au temps c'est-à-dire $L^2(0, T; V) \subset \mathcal{C}(0, T; V)$, on cherche alors la solution X telle que :

$$\begin{cases} \left\langle \frac{dX}{dt}, \varphi \right\rangle_{V, V'} = \langle F(X, K), \varphi \rangle_{V, V'} \quad \forall \varphi \in \mathcal{D}(0, T; V); \\ X|_{t=0} = u. \end{cases} \quad (3.2)$$

Pendant ce même temps, des observations (mesures) sont faites sur l'état du système. Nous considérons alors un opérateur d'observation $C \in \mathcal{L}(L^2(0, T; V), \mathcal{O})$ où \mathcal{O} est l'espace des observations. Soit $X_{obs} \in \mathcal{O}$ un vecteur d'observation. Le problème d'assimilation variationnelle qui nous intéresse consiste à identifier le vecteur de paramètres K^* et la condition initiale u^* qui minimisent la fonctionnelle

$$J(u, K) = J(U) = \frac{\lambda_1}{2} \|K - K^0\|_{\mathcal{K}}^2 + \frac{\lambda_2}{2} \|u - u^0\|_V^2 + \frac{1}{2} \int_0^T \|C.X - X_{obs}\|_{\mathcal{O}}^2 dt, \quad (3.3)$$

où X dépend de $U = (u, K)^T$ en tant que solution de l'équation (3.1).

Supposons en outre que V soit séparable. Soit $\{v_1, v_2, \dots, v_j, \dots\}$ une base hilbertienne de V . On peut alors décomposer le vecteur X solution de l'équation abstraite (3.1) dans cette base et on obtient un système d'équations différentielles vérifiées par les composantes de X . Soit $(X_1(t), X_2(t), \dots, X_j(t), \dots)$ les composantes de X , on a :

$$X_j(t) = \langle X(t), v_j \rangle_H, \quad \forall t \in [0, T] \quad (3.4)$$

Comme la solution $X(t)$ est continue de $[0, T]$ dans H , il en est de même pour chaque composante $X_j(t)$. En supposant également que \mathcal{K} admet une base hilbertienne

$\{k_j\}$, on en déduit de façon analogue les composantes de la condition initiale et du paramètre K dans la base $\{v_j\}$ et dans la base $\{k_j\}$ respectivement. Et pour tout $i = 1, 2, \dots$, nous pouvons introduire une fonctionnelle non-linéaire pour $K \in \mathcal{K}$:

$$\begin{aligned} F_j : V \times \mathcal{K} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (\varphi, K) &\longmapsto \langle F(\varphi, K), v_j \rangle_{V, V'}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

et l'opérateur F dans (3.1) peut alors se mettre pour $k \in \mathcal{K}$ sous la forme :

$$F(\varphi, K) = \sum_{j=1}^{\infty} F_j(\varphi, K) \cdot v_j \quad \forall \varphi \in V \quad (3.6)$$

Compte tenu des décompositions ci-dessus, nous pouvons réécrire le système (3.1) sous la forme :

$$\begin{cases} \frac{dX_j}{dt}(t) = F_j(X_j, K) & \text{avec } X(t) = \sum_{j=1}^{\infty} X_j(t) \cdot v_j \\ X_j|_{t=0} = u_j. \end{cases} \quad (3.7)$$

3.2.1 Quelques notions de calcul différentiel

En vue de leurs utilisations dans la suite, nous rappelons quelques notions de calcul différentiel pour les opérateurs [81, 66].

On définit la dérivée partielle de la fonctionnelle F_j par rapport à v par :

$$\frac{\partial F_j}{\partial v_i}(X, K) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{F_j(X + \alpha v_i, K) - F_j(X, K)}{\alpha}$$

et la dérivée partielle seconde :

$$\frac{\partial^2 F_j}{\partial v_l \partial v_i}(X, K) = \frac{\partial}{\partial v_l} \left(\frac{\partial F_j}{\partial v_i}(X, K) \right)$$

On définit de façon analogue les dérivées partielles premières et secondes par rapport à K par :

$$\frac{\partial F_j}{\partial k_i}(X, K), \quad \frac{\partial^2 F_j}{\partial v_i \partial k_l}(X, K) = \frac{\partial}{\partial v_i} \left(\frac{\partial F_j}{\partial k_l}(X, K) \right), \quad \frac{\partial^2 F_j}{\partial k_l \partial k_i}(X, K) = \frac{\partial}{\partial k_l} \left(\frac{\partial F_j}{\partial k_i}(X, K) \right)$$

On dira que F_j est deux fois Fréchet-différentiable en X (resp. en K) s'il admet une représentation de Taylor de la forme :

$$F_j(X + h, K) = F_j(X, K) + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\partial F_j}{\partial v_i}(X, K) \cdot h_i + \sum_{i,k=1}^{\infty} \frac{\partial^2 F_j}{\partial v_k \partial v_i}(X, K) \cdot h_k \cdot h_i + O(\|h\|_V^2) \quad (3.8)$$

(resp. $F_j(X, K + a) = F_j(X, K) + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\partial F_j}{\partial k_i}(X, K) \cdot a_i + \sum_{i,k=1}^{\infty} \frac{\partial^2 F_j}{\partial k_l \partial k_i}(X, K) \cdot a_l \cdot a_i + O(\|a\|_{\mathcal{K}}^2)$)

On dira enfin que F est deux fois Fréchet-différentiable en X (resp. en K) si pour tout j chaque fonctionnelle F_j est deux fois Fréchet-différentiable en X (resp. en K) et de plus, les restes $O(\|h\|_V^2)$ (resp. $O(\|a\|_{\mathcal{K}}^2)$) sont uniformément bornés par rapport j . Dans la suite, on supposera que F est deux fois Fréchet-différentiable en tout point X de V et tout point K de \mathcal{K} . Nous supposerons en plus les dérivées partielles d'ordre deux des fonctionnelles F_j sont continues dans V , autrement dit pour tout i, j, l les applications

$$X \mapsto \frac{\partial^2 F_j}{\partial v_l \partial v_i}(X, K)$$

sont continues de V dans \mathbb{R} .

On peut montrer que cette dernière hypothèse implique que l'on peut commuter l'ordre de dérivation partielle dans chaque dérivée partielle seconde des F_j . On verra dans la suite que cette conséquence impliquera (naturellement) la symétrie du Hessian de la fonction coût J .

Linéarisation et transposition

En notant par $\left[\frac{\partial F}{\partial X}\right]$ l'opérateur Jacobien de F par rapport à X , nous avons, grâce aux dérivées partielles des fonctionnelles F_j , $\left[\frac{\partial F}{\partial X}\right]$ qui peut s'écrire sous la forme :

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial F}{\partial X}\right] : V \times \mathcal{K} &\longrightarrow V' \\ \left(h = \sum_{k=1}^{\infty} h_k \cdot v_k, K\right) &\longmapsto \sum_{j=1}^{\infty} \left(\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\partial F_j}{\partial v_k}(X, K) \cdot h_k\right) \cdot v_j \end{aligned} \quad (3.9)$$

De même, V étant un espace de Hilbert l'opérateur adjoint du linéarisé $\left[\frac{\partial F}{\partial X}\right]$ s'écrit :

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial F}{\partial X}\right]^T : V \times \mathcal{K} &\longrightarrow V' \\ \left(l = \sum_{k=1}^{\infty} l_k \cdot v_k, K\right) &\longmapsto \sum_{j=1}^{\infty} \left(\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\partial F_k}{\partial v_k}(X, K) \cdot l_k\right) \cdot v_j \end{aligned} \quad (3.10)$$

Si de plus $\left[\frac{\partial F}{\partial X}\right] \in \mathcal{L}(V, V')$ (c'est-à-dire si F est Fréchet-différentiable), alors il en est de même pour $\left[\frac{\partial F}{\partial X}\right]^T$; en plus ces deux opérateurs sont adjoints l'un de l'autre dans le sens classique :

$$\left\langle \left[\frac{\partial F}{\partial X}\right] \cdot v, w \right\rangle_{V', V} = \left\langle v, \left[\frac{\partial F}{\partial X}\right]^T \cdot w \right\rangle_{V, V'}$$

Si F est deux fois Fréchet-différentiable nous notons de façon analogue $\left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2}\right]$ l'opérateur linéarisé de $\left[\frac{\partial F}{\partial X}\right]$ au voisinage de X et nous définissons comme ci-dessus sa transposée $\left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2}\right]^T$.

Par ailleurs, nous noterons $\left[\frac{\partial^2 F}{\partial K \partial X}\right]$ l'opérateur linéarisé de $\left[\frac{\partial F}{\partial X}\right]$ au voisinage de K et sa transposée par $\left[\frac{\partial^2 F}{\partial K \partial X}\right]^T$.

3.3 Calcul du produit Hessien \times vecteur

3.3.1 Système d'optimalité

Comme nous l'avons vu au chapitre 2, le vecteur de paramètres optimal (condition initiale et paramètre), $U^* = (K^*, u^*)$ est caractérisé par $\nabla J(U^*) = 0$ ([17, 97, 98]). Or le gradient de la fonction coût J est obtenu par résolution successive de l'équation d'évolution directe et de l'équation adjointe rétrograde et en prenant ensuite les traces de la variable adjointe sur l'espace de contrôle, ce qui se traduit dans le cas qui nous concerne par le système d'optimalité :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dX}{dt} = F(X, K^*), \quad t \in [0, T] \\ X(0) = u^* \\ \frac{dP}{dt} + \left[\frac{\partial F}{\partial X}\right]^T . P = C^T . (C.X - X_{obs}), \quad t \in [0, T] \\ P(T) = 0 \\ \nabla_K J = \lambda_1 (K^* - K^0) - \left[\frac{\partial F}{\partial K}\right]^T . P = 0 \\ \nabla_u J = \lambda_2 (u^* - u^0) - P(0) = 0 \end{array} \right. \quad (3.11)$$

où C^T est l'opérateur adjoint de C :

$$\langle C.X, Y \rangle_{\mathcal{O}} = \langle X, C^T.Y \rangle_{V, V'}. \quad (3.12)$$

3.3.2 Evaluation du Hessien de la fonctionnelle coût

En appliquant une perturbation h , $h = (h_u, h_K)$ sur le vecteur de paramètres U , nous obtenons le système linéaire tangent

$$\begin{cases} \frac{d\widehat{X}}{dt} = \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right] \widehat{X} + \left[\frac{\partial F}{\partial K} \right] h_k \\ \widehat{X}(0) = h_u \end{cases} \quad (3.13)$$

où \widehat{X} est la perturbation sur X . Pour le système adjoint et la condition d'optimalité nous obtenons :

$$\begin{cases} \frac{d\widehat{P}}{dt} + \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2} \cdot \widehat{X} + \frac{\partial^2 F}{\partial K \partial X} h_K \right]^T P + \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T \widehat{P} = C^T C \cdot \widehat{X} \\ \widehat{P}(T) = 0 \\ \widehat{\nabla}_u J = \lambda_2 h_u - \widehat{P}(0) = 0 \\ \widehat{\nabla}_K J = \lambda_1 h_K - \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X \partial K} \cdot \widehat{X} + \frac{\partial^2 F}{\partial^2 K} h_K \right]^T P - \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T \widehat{P} = 0 \end{cases} \quad (3.14)$$

\widehat{P} étant la perturbation sur P . Le Hessien est obtenu en exhibant la dépendance linéaire de $\widehat{\nabla}_u J$ et $\widehat{\nabla}_K J$ par rapport à h .

Introduisons les variables adjointes au second ordre Q et R qui seront définies explicitement par la suite.

Effectuons le produit scalaire de l'équation linéaire tangente (3.13) par Q et de la première équation de (3.14) par R (équations en \widehat{X} et \widehat{P}), nous additionnons les deux quantités en les intégrant en temps de 0 à T pour obtenir :

$$\begin{aligned} & \int_0^T \left[\left\langle \frac{d\widehat{X}}{dt}, Q \right\rangle_{v',v} + \left\langle \frac{d\widehat{P}}{dt}, R \right\rangle_{v',v} \right] dt = \int_0^T \left[\left\langle \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right] \widehat{X} + \left[\frac{\partial F}{\partial K} \right] h_k, Q \right\rangle_{v',v} \right] dt \\ & - \int_0^T \left[\left\langle \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2} \cdot \widehat{X} + \frac{\partial^2 F}{\partial K \partial X} h_K \right]^T P + \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T \widehat{P}, R \right\rangle_{v',v} \right] dt + \int_0^T \langle C^T (C \widehat{X}), R \rangle_{v',v} dt \end{aligned}$$

Après intégration par parties du membre de gauche et en utilisant les opérations de transpositions définies au paragraphe 3.2, on obtient :

$$\begin{aligned} & \langle \widehat{X}(T), Q(T) \rangle_H - \langle \widehat{X}(0), Q(0) \rangle_H + \langle \widehat{P}(T), R(T) \rangle_H - \langle \widehat{P}(0), R(0) \rangle_H = \\ & + \int_0^T \left[\left\langle \widehat{X}, + \frac{dQ}{dt} + \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T Q - \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2} R \right]^T P + C^T C R \right\rangle_{v',v'} \right] dt + \\ & \int_0^T \left[\left\langle \widehat{P}, + \frac{dR}{dt} - \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right] R \right\rangle_{v',v'} \right] dt + \int_0^T \left[\left\langle h_K, + \left[\frac{\partial F}{\partial K} \right]^T Q - \left[\frac{\partial^2 F}{\partial K \partial X} R \right]^T P \right\rangle_{v',v'} \right] dt \end{aligned}$$

Soit H la matrice Hessienne de la fonction coût J , H peut se mettre sous la forme

$$\begin{pmatrix} H_{uu} & H_{uK} \\ H_{Ku} & H_{KK} \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

Ainsi, si nous définissons Q et R comme solution du système adjoint au second ordre (ASO) introduit par Wang et al [104], Le Dimet et al [43] :

$$\begin{cases} \frac{dQ}{dt} + \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T Q - \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2} R \right]^T P = C^T C R, \\ \frac{dR}{dt} - \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right] R = 0, \\ Q(T) = 0, \end{cases} \quad (3.16)$$

alors, il reste

$$-\langle h_u, Q(0) \rangle - \langle \hat{P}(0), R(0) \rangle + \int_0^T \left\langle h_K, \left[\frac{\partial F}{\partial K} \right]^T Q - \left[\frac{\partial^2 F}{\partial K \partial X} R \right]^T P \right\rangle dt = 0$$

Par ailleurs, nous avons, $\widehat{\nabla} J(U, v) = H(U).v = -\hat{P}(0)$ avec $\widehat{\nabla} J(U, v)$ la perturbation induite sur $\nabla J(U)$ par v .

Prenons, $R(0) = v$, nous obtenons alors :

$$H(U).v = -\hat{P}(0) = \lambda_2 v - Q(0) \quad (3.17)$$

Le produit exact du Hessien par un vecteur est donc obtenu par intégration directe de la deuxième équation de (3.16) avec pour condition initiale $R(0) = v$, suivie de l'intégration de façon rétrograde de la première équation. Ensuite, on récupère le produit du Hessien au point U par le vecteur v par la formule (3.17).

Nous pouvons également obtenir la matrice H tout entière en intégrant successivement :

(i)

$$\begin{cases} \frac{dQ}{dt} + \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T Q - \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2} R \right]^T P = C^T C R \\ \frac{dR}{dt} - \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right] R = 0 \end{cases} \quad (3.18)$$

avec la condition initiale $R(0) = e_i$ pour le modèle R et la condition finale $Q(T) = 0$ pour le modèle Q , où e_i est le $i^{\text{ème}}$ vecteur de la base canonique de \mathbb{R}^n ($u \in V \rightsquigarrow \mathbb{R}^n$). Nous obtenons alors

$$H_{uu} e_i = \lambda_2 v_u - Q(0), \quad H_{uK} e_i = \lambda_1 v_K + \int_0^T \left[\frac{\partial F}{\partial K} \right]^T Q - \left[\frac{\partial^2 F}{\partial K \partial X} R \right]^T P dt \quad (3.19)$$

(ii) En intégrant m fois le système différentiel

$$\begin{cases} \frac{dQ}{dt} + \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T Q - \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2} R \right]^T P = C^T C R \\ \frac{dR}{dt} - \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right] R = f_j \end{cases} \quad (3.20)$$

avec la condition initiale $R(0) = 0$ pour le modèle R et la condition finale $Q(T) = 0$ pour le modèle Q , où f_j est le $j^{\text{ème}}$ vecteur de la base canonique de \mathbb{R}^m ($K \in \mathcal{K} \rightsquigarrow \mathbb{R}^m$)

Nous obtenons alors

$$H_{KK} f_j = \lambda_1 v_K + \left[\frac{\partial F}{\partial K} \right]^T Q - \left[\frac{\partial^2 F}{\partial K \partial X} R \right]^T P \quad (3.21)$$

Le système différentiel défini par ces équations est le Modèle Adjoint au Second Ordre (SOA) [104, 43]. La matrice hessienne est obtenue après $n + m$ intégrations de (SOA). L'adjoint au second ordre est facilement obtenu à partir de l'adjoint au premier ordre en y ajoutant certains termes de forçages, en particulier le terme faisant intervenir la dérivée deuxième du second membre du modèle direct F par rapport à X . La détermination de la matrice hessienne est en pratique très coûteuse en particulier quand la taille des paramètres de contrôle est considérable. Néanmoins, la connaissance du produit du Hessien par un vecteur suffit.

3.3.3 Symétrie du Hessien

Le produit du Hessien de la fonction coût (en un point U de l'ensemble des paramètres admissibles) par un vecteur v est donné par la dérivée directionnelle du gradient de la fonction coût en U dans la direction v . On a

$$H(U).v = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\nabla J(U + \alpha v) - \nabla J(U)}{\alpha} \quad (3.22)$$

Pour calculer cette dérivée directionnelle, il suffit de calculer les dérivées directionnelles des variables X et P du système d'optimalité (3.11) dans la direction de la perturbation v sur U .

Une perturbation v du paramètre de contrôle U induit des perturbations des variables \tilde{X} et \tilde{P} . Les perturbations \tilde{X} et \tilde{P} sont obtenues en effectuant la dérivée directionnelle du modèle direct et la dérivée directionnelle du modèle adjoint respectivement. \tilde{X} et \tilde{P} sont solutions du système adjoint au second ordre :

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{X}}{dt} = \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right] \tilde{X} + \left[\frac{\partial F}{\partial K} \right] v_K \\ \tilde{X}(0) = v_u \\ \frac{d\tilde{P}}{dt} + \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2} \cdot \tilde{X} + \frac{\partial^2 F}{\partial K \partial X} v_K \right]^T P + \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T \tilde{P} = C^T (C\tilde{X}) \\ \tilde{P}(T) = 0 \end{cases} \quad (3.23)$$

La résolution de ce système (3.23) permet d'obtenir la dérivée directionnelle $\tilde{\nabla}J(U, v)$ par

$$\begin{cases} \tilde{\nabla}_u J = \lambda_2 v_u - \tilde{P}(0) \\ \tilde{\nabla}_K J = \lambda_1 v_K - \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X \partial K} \cdot \tilde{X} + \frac{\partial^2 F}{\partial^2 K} \cdot v_K \right]^T P - \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T \tilde{P} \end{cases}$$

D'autre part, nous avons par définition

$$H(U).v = \tilde{\nabla}J(U, v). \quad (3.24)$$

Proposition 3.1 *Sous les hypothèses sur la bi-dérivabilité de l'opérateur F définies dans la section 3.2.1, le Hessien H de la fonction coût est symétrique, c'est-à-dire :*

$$\langle H(U).v, w \rangle_{\mathcal{P}} = \langle v, H(U).w \rangle_{\mathcal{P}} \quad \forall v, w \in \mathcal{P}$$

$$\mathcal{P} = \mathcal{H} \times \mathcal{K}.$$

Il est défini positif sous l'hypothèse d'observation complète.

Démonstration

La preuve de la symétrie du Hessien de la fonction se fait en utilisant les hypothèses sur la bi-dérivabilité de l'opérateur F , ainsi que les équations adjointes au second ordre. Une démonstration complète est fournie dans [81, 66], le problème de contrôle se réduisant uniquement à la condition initiale. Cependant cette preuve s'adapte bien à notre considération.

Pour étudier sa positivité, considérons le produit scalaire $\langle H(U)v, v \rangle$ dans V .

Par définition, nous avons de ce qui précède (3.17) :

$$\langle H(U)v, v \rangle = \langle \lambda_2 v - Q(0), v \rangle = \lambda_2 \langle v, v \rangle - \langle Q(0), R(0) \rangle$$

La première équation de (3.16) pouvant être considérée comme l'adjoint au premier ordre du système linéaire tangent (première équation de (3.16)) pour la condition initiale $R(0) = v$, nous avons :

$$\begin{aligned} \langle H(U)v, v \rangle &= \langle \lambda_2 v - \tilde{P}(0), v \rangle = \lambda_2 \langle v, v \rangle - \langle \tilde{P}(0), \tilde{X}(0) \rangle \\ &= \lambda_2 \langle v, v \rangle - \left\langle \tilde{X}, \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2} \cdot \tilde{X} + \frac{\partial^2 F}{\partial K \partial X} v_K \right]^T P - C^T C \tilde{X} \right\rangle \\ &= \lambda_2 \langle v, v \rangle + \langle C \tilde{X}, C \tilde{X} \rangle - \left\langle \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2} \cdot \tilde{X} + \frac{\partial^2 F}{\partial K \partial X} v_K \right] \tilde{X}, P \right\rangle \end{aligned}$$

$$= \lambda_2 \langle v, v \rangle + \langle C\tilde{X}, C\tilde{X} \rangle - \left\langle \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2} \right] \tilde{X}, \tilde{X}, P \right\rangle - \left\langle \left[\frac{\partial^2 F}{\partial K \partial X} \right] v_K \tilde{X}, P \right\rangle.$$

Ainsi, si nous choisissons l'opérateur $C = I$ (opérateur identité), alors si la condition (3.25) ci-dessous est satisfaite,

$$\left\| \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2} (X, K) \right] \right\| \|P\| + \left\| \left[\frac{\partial^2 F}{\partial K \partial X} (X, K) \right] \right\| \|P\| \leq 1, \quad (3.25)$$

le Hessien de la fonction coût est défini positif pour $\lambda_2 > 0$:

$$\langle Hv, v \rangle \geq \lambda_2 \langle v, v \rangle, \quad (3.26)$$

Remarque 3.1 *Le caractère défini positif du Hessien de la fonction coût ne se pose pas s'il est pris à l'optimum (c'est-à-dire en U^*). En effet, ce n'est rien d'autre que la caractérisation de l'unicité (du moins locale) de la solution du problème de contrôle optimal.*

On peut aussi calculer le produit du Hessien par un vecteur en utilisant les différences finies entre deux valeurs du gradient. Le coût du calcul serait équivalent, mais il n'existe pas de méthode permettant de déterminer la distance optimale entre les deux points du calcul du gradient.

3.4 Analyse de sensibilité

Dans cette section, on va se servir de l'étude entreprise sur le Hessien de la fonction (que l'on prendra à l'optimum) pour réaliser l'analyse de sensibilité qui est incontestablement une phase à entreprendre à la suite du processus d'identification. Nous verrons tout au long de cette section le lien étroit qui existe entre le Hessien de la fonction coût et l'analyse de sensibilité que ce soit par rapport à un bruit sur les observations, la caractérisation de la sensibilité du contrôle optimal, ou sur des critères fonctionnels.

Nous omettons dans cette partie la théorie générale de l'analyse de sensibilité utilisant les équations adjointes. En effet un condensé complet est fourni dans la thèse de Ngodock [81]. Nous suivrons tout au long de cet exposé, la démarche nouvelle d'analyse de sensibilité utilisant les équations adjointes décrits dans [81].

3.4.1 Formalisme général

Pour introduire le formalisme général de l'analyse de sensibilité décrit dans [81], nous supposons que le modèle a la formulation générale suivante :

$$\mathcal{F}(\mathcal{X}, \mathcal{K}) = 0, \quad (3.27)$$

où \mathcal{X} est la variable décrivant l'état du système (atmosphère, océan, hydrologie ...), \mathcal{X} peut éventuellement être fonction du temps et de l'espace. \mathcal{K} est l'un des paramètres

de contrôle du modèle. (condition initiale et/ou limites, paramètres classiques, ou une combinaison de ces différents paramètres)

Pour les modèles géophysiques, \mathcal{F} est un opérateur différentiel non linéaire. Dans les calculs, \mathcal{F} devient un opérateur de dimension finie.

Pour des raisons de simplicités, nous supposons que pour \mathcal{K} fixé, l'équation (3.27) possède une unique solution $\mathcal{X}(\mathcal{K})$.

Soit \mathcal{G} une fonction scalaire donnée fonction de \mathcal{X} . Cette fonction sera appelée *fonction réponse* (\mathcal{G} peut aussi être une fonction de \mathcal{X} et \mathcal{K}).

Par définition, la *sensibilité* de \mathcal{G} par rapport à \mathcal{K} est le gradient de \mathcal{G} par rapport à \mathcal{X} . Dans le but d'estimer ce gradient, pour une perturbation k sur \mathcal{K} la dérivée directionnelle de (3.27) nous donne :

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{X}} \cdot \widehat{\mathcal{X}} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{K}} \cdot k = 0. \quad (3.28)$$

$\widehat{\mathcal{X}}$ est la dérivée directionnelle de \mathcal{X} dans la direction de perturbation k . La dérivée directionnelle de la fonction réponse dans la direction de perturbation k est donnée par :

$$\widehat{\mathcal{G}} = \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathcal{X}} \cdot \widehat{\mathcal{X}} \quad (3.29)$$

3.4.2 Analyse directe de sensibilité

L'analyse de sensibilité empirique ou directe consiste à résoudre (3.28) pour une perturbation k donnée pour obtenir $\widehat{\mathcal{X}}$ et l'insérer dans (3.29) afin d'en déduire $\widehat{\mathcal{G}}$.

Dans le cas des paramètres réels, c'est-à-dire $\widehat{\mathcal{K}} \in \mathbb{R}^l$, $l \geq 1$, nous pouvons avoir besoin de calculer séparément la sensibilité de $\widehat{\mathcal{G}}$ pour chaque paramètre $\widehat{\mathcal{K}}_i$ $i = 1, \dots, l$. Ceci demande l fois la résolution du système (3.28) avec la perturbation $k = (0, 0, \dots, k_i, 0, \dots, 0)$ où k_i est la perturbation sur la $i^{\text{ème}}$ composante de $\widehat{\mathcal{K}}$ du vecteur $\widehat{\mathcal{K}}$.

Cette approche, d'évaluation de la sensibilité est très coûteuse si le nombre de paramètres est élevé, tel est le cas dans la pratique. L'analyse empirique de sensibilité suppose de façon implicite que le modèle linéaire tangent (3.28) est valable au voisinage de la solution autour de laquelle les dérivées sont évaluées. Cette hypothèse est vérifiée pour les modèles linéaires. Cependant pour les modèles non-linéaires, nous n'avons aucune certitude que, pour une perturbation des paramètres, l'approximation du modèle linéaire tangent reste encore valable. Dans le but d'éviter ces problèmes, notre approche d'analyse de sensibilité sera basée sur les équations adjointes.

Analyse de sensibilité en utilisant les équations adjointes

Historique

L'utilisation des équations adjointes pour l'analyse de sensibilité date de 1940. Nous pouvons citer les travaux de Wigner [105] en 1945, dérivés de la théorie des perturbations. La première utilisation des équations adjointes pour l'analyse de sensibilité sur un

modèle atmosphérique simple fut réalisée par Marchuk (1974). Depuis cette période, l'analyse de sensibilité utilisant les équations adjointes a été faite par plusieurs auteurs. Dans le domaine des sciences atmosphériques nous pouvons citer par exemple les travaux de Cacuci et al [6] en 1983, Zou et al en 1993 [107], Ngodock [81, 26].

L'idée de base dans l'utilisation des équations adjointes pour l'analyse de sensibilité est d'exhiber la dépendance linéaire de $\widehat{\mathcal{G}}$ par rapport à k dans (3.29).

En introduisant la variable adjointe $\widehat{\mathcal{P}}$ de $\widehat{\mathcal{X}}$, qui sera définie plus tard, on effectue le produit scalaire de (3.28) par \mathcal{P} , et on transpose les expressions ce qui donne :

$$\left\langle \widehat{\mathcal{X}}, \left[\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{X}} \right]^T \cdot \mathcal{P} \right\rangle + \left\langle k, \left[\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{K}} \right]^T \cdot \mathcal{P} \right\rangle = 0. \quad (3.30)$$

Par définition, nous avons :

$$\widehat{\mathcal{G}} = \left\langle \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathcal{X}}, \widehat{\mathcal{X}} \right\rangle = \langle \nabla \mathcal{G}, k \rangle. \quad (3.31)$$

Si nous définissons \mathcal{P} comme solution de :

$$\left[\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{X}} \right]^T \cdot \mathcal{P} = \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathcal{X}}, \quad (3.32)$$

alors nous obtenons :

$$\nabla \mathcal{G} = - \left[\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{K}} \right]^T \cdot \mathcal{P} \quad (3.33)$$

Ainsi, pour l'étude de la sensibilité, on procède de la façon suivante :

- (i) Résoudre le modèle direct (3.27) pour une valeur du paramètre proche du voisinage où l'on désire effectuer l'analyse de sensibilité,
- (ii) résoudre le modèle adjoint (3.32) pour la détermination de la variable \mathcal{P} ,
- (iii) ensuite à partir de (3.33), la sensibilité par rapport à \mathcal{K} est calculée. La résolution du modèle adjoint permet d'évaluer la sensibilité du modèle par rapport à toute perturbation. Cette méthode requiert uniquement une résolution du modèle direct et une résolution du modèle adjoint.

Analyse de sensibilité en présence d'observations

Pour l'étude de sensibilité en présence des données, nous utilisons l'approche proposée dans [81].

Soit K un vecteur de paramètre du modèle lié par l'équation différentielle suivante :

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = F(X, K) \\ X(0) = u \end{cases} \quad (3.34)$$

La condition initiale et le paramètre K peuvent être issus d'une procédure variationnelle décrite au chapitre 2.

Soit K_{ad} l'ensemble de toutes les valeurs admissibles du paramètre K . Quand K parcourt l'ensemble K_{ad} , u parcourt un ensemble U_{ad} de toutes les conditions initiales admissibles. Une perturbation sur K induira de ce fait une perturbation sur u . Dans le but de prendre en compte la dépendance sur les perturbations nous allons considérer les expressions suivantes afin de mener à bien l'étude de sensibilité :

$$\mathcal{X} = \begin{pmatrix} X \\ P \end{pmatrix} \quad (3.35)$$

$$\mathcal{F}(\mathcal{X}, \mathcal{K}) = \begin{pmatrix} \frac{dX}{dt} - F(X, K) \\ \frac{dP}{dt} + \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T .P - C^T(CX - X_{obs}) \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

Ce qui signifie ainsi que, dans le contexte de l'assimilation variationnelle de données, le concept de modèle est étendu au système d'optimalité. Les observations X_{obs} doivent être une entrée du modèle et seront par la suite de notre étude considérées comme paramètres pour une analyse de sensibilité par rapport aux observations. Il est donc de ce fait possible de poser $\mathcal{K} = K$ ou $\mathcal{K} = X_{obs}$, ou $\mathcal{K} = (K, X_{obs})$ pour une étude plus générale. Dans ce qui suite nous allons considérer le cas $\mathcal{K} = K$, et nous verrons comment en déduire le cas $\mathcal{K} = X_{obs}$.

Dans le but d'estimer la sensibilité par rapport au paramètre k , appliquons une perturbation dans la direction k sur le paramètre K . Les dérivées directionnelles \widehat{X} de X et \widehat{P} de P dans la direction k sont obtenues comme solution du système couplé :

$$\begin{cases} \frac{d\widehat{X}}{dt} = \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X, K) \right] \widehat{X} + \left[\frac{\partial F}{\partial K}(X, K) \right] k \\ \widehat{X}(0) = \widehat{u} \\ \frac{d\widehat{P}}{dt} + \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2}(X, K) \widehat{X} \right]^T .P + \left[\frac{\partial^2 F}{\partial K \partial X}(X, K) k \right]^T .P + \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X, K) \right]^T .\widehat{P} = C^T C \widehat{X} \\ \widehat{P}(T) = 0 \\ \widehat{P}(0) = 0 \end{cases} \quad (3.37)$$

Soit $\mathcal{P} = \begin{pmatrix} Q \\ R \end{pmatrix}$ la variable adjointe de $\mathcal{X} = \begin{pmatrix} X \\ P \end{pmatrix}$. Nous effectuons le produit scalaire de la première équation de (3.37) par Q et de la deuxième équation par R et nous intégrons par parties entre les instants 0 et T . Nous trouvons :

$$\int_0^T \left[\left\langle \widehat{X}, -\frac{dQ}{dt} - \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X, K) \right]^T Q + \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2}(X, K) R \right]^T P - C^T C R \right\rangle_{v, v'} \right] dt + \int_0^T \left[\left\langle \widehat{P}, -\frac{dR}{dt} + \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X, K) \right] R \right\rangle_{v, v'} + \left\langle \left[-\frac{\partial F}{\partial K}(X, K) \right] k, Q \right\rangle_{v, v'} \right] dt$$

$$\begin{aligned}
 & + \int_0^T \left\langle \left[\frac{\partial^2 F}{\partial K \partial X}(X, K) \cdot R \right]^T \cdot P, k \right\rangle_{V, V'} dt + \\
 & + \langle \widehat{X}(T), Q(T) \rangle_H - \langle \widehat{X}(0), Q(0) \rangle_H + \langle \widehat{P}(T), R(T) \rangle_H - \langle \widehat{P}(0), R(0) \rangle_H = 0
 \end{aligned}$$

Si nous considérons une fonction réponse sous la forme intégrale suivante :

$$\mathcal{G} = \int_0^T G(X) dt \quad (3.38)$$

où G est une fonction scalaire, alors si Q et R sont définies comme solutions de :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dQ}{dt} + \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X, K) \right]^T \cdot Q - \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2}(X, K) \cdot R \right]^T \cdot P + C^T \cdot C \cdot R = \left[\frac{\partial G}{\partial X} \right], \\ \frac{dR}{dt} - \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X, K) \right] \cdot R = 0, \\ Q(T) = 0, \\ Q(0) = 0, \end{array} \right. \quad (3.39)$$

le gradient de la fonction réponse est donné par :

$$\nabla \mathcal{G} = \int_0^T \left(\left[\frac{\partial F}{\partial K}(X, K) \right]^T \cdot Q - \left[\frac{\partial^2 F}{\partial K \partial X}(X, K) \cdot R \right]^T \cdot P \right) dt \quad (3.40)$$

Remarque 3.2 (i) Nous obtenons ainsi un système couplé de 2 équations différentielles. La seconde n'est rien d'autre que le modèle linéaire tangent. La première équation possède simultanément une condition initiale $Q(0) = 0$ et une finale $Q(T) = 0$. La condition initiale $Q(0) = 0$ est choisie pour annuler la dépendance par rapport à la variation du paramètre de contrôle optimal. La seconde équation ne possède ni de condition initiale ni de conditions aux limites.

(ii) Si $\mathcal{G} = J$ la fonction coût, il est évident que $R = 0$ est une solution et $Q = P$ est le modèle adjoint (au premier ordre). Si $\mathcal{G} \neq J$ alors $R = 0$ est toujours solution de la seconde équation. Formellement, nous obtenons une équation similaire à l'équation adjointe avec un second membre différent. Il n'y a aucune raison d'avoir $Q = 0$ après intégration de cette équation, ainsi la sensibilité ne peut pas être déduite de ce «pseudo-adjoint» dans la pratique courante de l'analyse de sensibilité.

Analyse de sensibilité par rapport aux observations

La faiblesse de cette méthode qui consiste à utiliser ce «pseudo-adjoint» est mise en relief quand on effectue une analyse de sensibilité par rapport aux observations. Ceci résulte du fait que les observations ne sont pas contenues explicitement dans le modèle direct mais sont plutôt explicites dans le système d'optimalité. Ainsi on peut considérer les observations comme paramètres et se poser la question de savoir qu'elle sera l'influence d'une perturbation sur les observations sur les champs identifiés.

En posant $\mathcal{K} = X_{obs}$ nous sommes à même de répondre à cette question, c'est-à-dire d'évaluer la sensibilité de la fonction réponse par rapport à une perturbation sur les observations.

Pour une fonction réponse \mathcal{G} fonction de X , et implicitement fonction des observations X_{obs} , une étude analogue à ce qui précède, permet de trouver une formule analogue à (3.40) exprimant la sensibilité de la fonction réponse par rapport aux observations :

$$\nabla \mathcal{G} = -C.R = - \int_0^T C.R(t) dt \quad (3.41)$$

Calcul pratique de la sensibilité

Nous allons dans ce qui suit proposer une méthode (algorithme) pour résoudre le système (3.39) pour des hypothèses garantissant l'existence et l'unicité de la solution et ensuite calculer la sensibilité donnée par (3.40) ou (3.41).

- (i) Choisir une condition initiale v pour la deuxième équation de (3.39) : $R(0) = v$
- (ii) Intégrer cette deuxième équation de façon directe
- (iii) Intégrer de façon rétrograde la première équation de (3.39)

Ainsi nous obtenons $Q(0)$ comme une fonction de v : $Q(0) = Q(0, v)$. Le problème revient donc à choisir v^* de sorte que $Q(0, v^*) = 0$.

En se fixant un vecteur v et en posant $R(0) = v$. Nous cherchons v^* vérifiant $Q(0, v^*) = 0$.

Soit (Q_1, R) solution de :

$$\begin{cases} \frac{dQ_1}{dt} + \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T \cdot Q_1 - \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2} \cdot R \right]^T \cdot Q_1 = C^T C R \\ \frac{dR}{dt} - \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right] \cdot R = 0 \\ R(0) = v \\ Q_1(T) = 0 \end{cases} \quad (3.42)$$

et Q_2 solution de :

$$\begin{cases} \frac{dQ_2}{dt} + \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T \cdot Q_2 = \left[\frac{\partial G}{\partial X} \right] \\ Q_2(T) = 0 \end{cases} \quad (3.43)$$

En utilisant la linéarité de la première équation de (3.39) nous pouvons écrire :

$$Q = Q_1 + Q_2 \quad (3.44)$$

Q_1, Q_2, R sont définis de façon unique et on a :

$$Q(0) = Q_1(0) + Q_2(0) \quad (3.45)$$

Nous remarquons que le système (3.42) est l'adjoint au second ordre étudié précédemment (voir section 3.3) et on a

$$Q_1(0) = H.v \quad (3.46)$$

où nous rappelons que H est la matrice hessienne de la fonction coût par rapport aux paramètres de contrôle du modèle direct. Ainsi, il résulte de (3.45) et (3.46) que nous avons :

$$Q(0) = H.v + Q_2(0) \quad (3.47)$$

Toujours d'après l'étude qui a été faite précédemment sur l'ASO (à la section 3.3) et à la remarque de la section 3.3.3 , nous avons H qui est symétrique et défini positif, donc est H inversible et par conséquent il existe un unique v^* tel que $Q(0) = 0$.

Remarque 3.3 (a) *L'évaluation complète de la matrice H et son inversion sont très coûteuses, cependant le produit exact du Hessien par un vecteur est fourni à travers l'(ASO) pour n'importe quelle valeur de v . Ainsi, v^* peut aussi être caractérisé comme solution de :*

$$f(v^*) = \underset{v \in \mathcal{P}}{\text{Min}} f(v) \quad (3.48)$$

où \mathcal{P} est l'ensemble de tous les paramètres admissibles du modèle direct, et f est définie par

$$f(x) = \frac{1}{2} \langle H.x, x \rangle + \langle Q_2(0), x \rangle \quad (3.49)$$

et nous pouvons alors utiliser une méthode de type descente ou gradient conjugué pour la minimisation de f .

(b) *v^* n'est rien d'autre que la sensibilité du paramètre de contrôle optimal par rapport à une perturbation sur les paramètres.*

3.5 Sensibilité du contrôle optimal par rapport à un bruit sur les observations

Dans les développements faits ci-dessus, nous avons calculé la sensibilité d'un critère fonctionnel par rapport aux observations. Mais le but de notre assimilation variationnelle étant de retrouver le vecteur de paramètre optimal U^* ($U^* = (K^*, u^*)$), nous pouvons aussi calculer sa sensibilité par rapport aux observations. Le calcul de la sensibilité de U^* se fait de façon légèrement différente de ce qui a été développé ci-dessus. Pour calculer cette sensibilité, nous nous servons d'hypothèses sur le Hessien.

Hypothèses

Soit X_{obs} un vecteur d'observation fixé. Nous nous donnons les deux hypothèses suivantes :

H1) Il existe un voisinage \mathcal{Z} autour de X_{obs} tel que : $\forall Z \in \mathcal{Z}$, le problème de minimisation

$$J_Z(K_Z^*) = \underset{K \in \mathcal{K}_{ad}}{\text{Min}} J_Z(K) \quad (3.50)$$

admette une solution unique U_Z^* , avec J_Z la fonctionnelle d'écart à l'observation Z :

$$J_Z(U) = \frac{1}{2} \|\eta(U) - Z\|_{\mathcal{H}}^2 \quad (3.51)$$

où η représente la composée de l'opérateur d'observation et du modèle dynamique.

H2) Le Hessien de la fonction coût $J_{X_{obs}}$ calculé au point optimal $U = U_{X_{obs}}^*$ est continu et coercif, c'est-à-dire

$$H \stackrel{def}{=} \text{Hess} J_{X_{obs}}(U_{X_{obs}}^*) \quad (3.52)$$

alors il existe C et $\alpha > 0$ tel que

$$\begin{aligned} \|H.X\| &\leq C\|X\| \\ \langle H.X, X \rangle &\geq \alpha\|X\|^2 \quad \forall X \in \mathcal{K}_{ad} \end{aligned}$$

Nous énonçons alors le résultat suivant :

Théorème 3.1 *Sous les hypothèses **H1)** et **H2)**, l'application*

$$\begin{aligned} M : \mathcal{Z} &\longrightarrow \mathcal{K}_{ad} \\ Z &\longmapsto U_Z^* \end{aligned} \quad (3.53)$$

où K_Z^* est la solution du problème de minimisation (3.50), est Gâteaux différentiable au point X_{obs} et sa dérivée est donnée par :

$$\left[\frac{\partial M}{\partial Z}(X_{obs}) \right] \delta Z = H^{-1} \cdot [\eta']^T \cdot \delta Z \quad \forall \delta Z \quad (3.54)$$

où δZ est un accroissement de l'observation Z , $[\eta']^T$ représente l'opérateur adjoint du linéarisé de l'opérateur η , la linéarisation étant faite autour du point $U_{X_{obs}}^* = M(X_{obs})$.

Démonstration

Soit $V = \mathcal{K}_{ad}$ l'espace des paramètres admissibles, et \mathcal{H} l'espace des observations Z . Supposons que V et \mathcal{H} soient des espaces de Hilbert. Pour des raisons de simplicité, nous identifions V à son dual V' .

On considère l'application G qui à tout couple (U, Z) associe le vecteur gradient de la fonction coût calculé au point K avec l'observation Z :

$$\begin{aligned} G : V \times \mathcal{H} &\longrightarrow V' = V \\ (U, Z) &\longmapsto \vec{\nabla} J_Z(U) \end{aligned} \quad (3.55)$$

Compte tenu de (3.51) , G peut s'écrire sous la forme explicite :

$$G(U, Z) = [\eta'(U)]^T \cdot (\eta(U) - Z) \quad (3.56)$$

Si $U = M(Z)$ c'est-à-dire si U est le vecteur de paramètre optimal correspondant à l'observation Z , la condition nécessaire d'optimalité nous assure que le gradient de J_Z calculé au point U s'annule; c'est-à-dire

$$G(M(Z), Z) = 0 \quad \forall Z \in \mathcal{Z} \quad (3.57)$$

ce qui permet de définir une nouvelle application

$$\begin{aligned} \tilde{G} : \mathcal{H} &\longrightarrow V \\ Z &\longmapsto G(M(Z), Z) \end{aligned} \quad (3.58)$$

et on a alors

$$\tilde{G}(Z) \equiv 0 \quad \forall Z \in \mathcal{Z}$$

Calculons les dérivées partielles $\frac{\partial G}{\partial U} \in \mathcal{L}(V, V)$ et $\frac{\partial G}{\partial Z} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}, V)$. Soit δU (resp. δZ) un accroissement quelconque de U (resp. Z). D'après la définition de l'application G (3.53), on a :

$$\frac{\partial G}{\partial U} \delta U = \frac{\partial}{\partial U} \left(\vec{\nabla} J_Z(U) \right) \cdot \delta U = Hess J_Z(U) \cdot \delta U \quad (3.59)$$

et d'après (3.56), on a :

$$\frac{\partial G}{\partial Z} \delta Z = [\eta'(U)]^T \cdot \delta Z \quad (3.60)$$

La dérivée $\frac{\partial G}{\partial U}$ calculée au point X_{obs} est donc H . Compte tenu de l'hypothèse **H2**) et grâce au théorème des fonctions implicites, nous en déduisons que M est différentiable en X_{obs} . Sa dérivée s'obtient en différentiant (3.57) et en utilisant (3.58), (3.60) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{G}}{\partial Z} \delta Z &= 0 \\ \frac{\partial G}{\partial U} \frac{\partial M}{\partial Z} \delta Z + \frac{\partial G}{\partial Z} \delta Z &= 0 \\ H \cdot \frac{\partial M}{\partial Z} \delta Z - [\eta'(U)]^T \delta Z &= 0 \end{aligned}$$

d'où le résultat :

$$\frac{\partial M}{\partial Z} \delta Z = H^{-1} \cdot [\eta'(U)]^T \delta Z \quad \forall \delta Z$$

Remarque

Dans le cas où le modèle η est linéaire, le Hessien H s'écrit :

$$H = \eta^T \cdot \eta$$

Supposons que le vecteur d'observation X_{obs} soit connu avec une incertitude τ

$$X_{obs} = X_{ref} + \tau$$

où τ est supposé être un bruit Gaussien (par exemple), de matrice de variance-covariance $\sum_{\tau} = E(\tau.\tau^T)$. L'erreur de l'identification ξ est aussi une Gaussienne de matrice de variance-covariance

$$\sum_{\xi} = H^{-1}.\eta^T.\sum_{\tau}.\eta.H^{-1}.$$

Si les observations sont décorréelées entre elles et si chacune d'elles est de même variance σ^2 , en d'autres termes si la matrice de variance-covariance est $\sum_{\tau} = \sigma^2 Id$, alors on a :

$$\sum_{\tau} \sigma^2 H^{-1}.$$

Dans la $k^{\text{ième}}$ direction propre \vec{w}_k du Hessien, correspondant à la valeur propre $\mu_k > 0$, la variance de l'erreur d'identification est $\frac{\sigma^2}{\mu_k}$. Cette variance est d'autant plus petite que μ_k est grand. Ainsi donc, l'identification dans les directions propres correspondant aux plus grandes valeurs propres du Hessien est très peu affectée par les erreurs d'observations, elle est par contre beaucoup affectée dans les directions propres correspondant aux plus petites valeurs propres du Hessien.

3.5.1 Analyse de sensibilité par rapport aux observations : calcul pratique

Pour évaluer la sensibilité du vecteur de paramètres optimal par rapport aux observations, nous allons perturber le vecteur d'observation X_{obs} dans la direction de perturbation h^{obs} . Si $K_{obs}^* = M(X_{obs})$ et $W^* = M(X_{obs} + h^{obs})$, alors la sensibilité du vecteur de paramètres optimal dans la direction h^{obs} est donnée par :

$$\widetilde{K}^* = M(X_{obs} + h^{obs}) - M(X_{obs}) \quad (3.61)$$

Nous allons exprimer \widetilde{K}^* en fonction de h^{obs} . Puisque X_{obs} et $X_{obs} + h^{obs}$ sont solutions du système d'optimalité (3.11) avec pour vecteur d'observation X_{obs} et $X_{obs} + h^{obs}$ respectivement, des calculs algébriques simples montrent qu'une approximation du premier ordre, \widetilde{K}^* , est solution du système :

$$\begin{cases} \frac{dQ}{dt} + \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T . Q - \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2} . R \right]^T . Q = C^T (C R - h^{obs}) \\ \frac{dR}{dt} - \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right] . R = 0 \\ R(0) = \widetilde{K}^* \\ Q(T) = 0 \\ Q(0) = 0 \end{cases} \quad (3.62)$$

Le système (3.62) étant linéaire non homogène en R et Q nous pouvons l'écrire :

$$Q = Q_1 + Q_2 \quad (3.63)$$

où le couple (R, Q_1) est solution de :

$$\begin{cases} \frac{dQ_1}{dt} + \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T \cdot Q_1 - \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2} \cdot R \right]^T \cdot Q_1 = C^T C R \\ \frac{dR}{dt} - \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right] \cdot R = 0 \\ R(0) = \widetilde{K}^* \\ Q_1(T) = 0 \end{cases} \quad (3.64)$$

et Q_2 solution de :

$$\begin{cases} \frac{dQ_2}{dt} + \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T \cdot Q_2 = -C^T h^{obs} \\ Q_2(T) = 0 \end{cases} \quad (3.65)$$

Le système (3.64) est identique à (3.42) et comme nous l'avons vu déjà ci-dessus, il s'en suit que

$$Q_1(0) = H \cdot \widetilde{K}^* \quad (3.66)$$

et nous pouvons caractériser \widetilde{K}^* par la condition d'optimalité

$$Q(0) = 0$$

c'est-à-dire

$$H \cdot \widetilde{K}^* + Q_2(0) = 0$$

où $Q_2(0)$ est la perturbation induite sur le gradient de la fonction coût par la perturbation h^{obs} sur les observations. Il résulte de l'étude qui a été faite précédemment que la matrice hessienne H est symétrique et définie positive et donc inversible, donc il existe une solution unique \widetilde{K}^* pour le système (3.62).

Remarque

Nous obtenons d'après ce qui précède $\widetilde{K}^* = -H^{-1} \cdot Q_2(0)$. Le calcul pratique de \widetilde{K}^* est fait par minimisation de la fonctionnelle

$$f(x) = \frac{1}{2} \langle Hx, x \rangle + \langle Q_2(0), x \rangle$$

par une méthode de type descente ou gradient conjugué.

3.6 Application au modèle d'écoulement en zone non-saturée

Pour le modèle d'infiltration en zone non-saturée, formulé en terme de pression en eau qui a été défini au chapitre 1, que nous rappelons ci-dessous :

$$\begin{cases} C(h) \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \right], \\ h(0, z) = h_{ini}(z), \\ h(t, 0) = h_{surf}(t), \\ h(t, Z) = h_{fond}(t), \end{cases}$$

nous considérons la forme discrétisée définie au chapitre 2.

Ci-dessous, nous montrons comment évaluer le produit du Hessien \times vecteur puis déduire l'analyse de sensibilité.

3.6.1 Produit du Hessien de la fonction coût en U^0 par un vecteur

Soit $U^0 = (K^0, u^0)$ un vecteur de paramètres choisi pour intégrer notre modèle. Pour calculer le produit du Hessien en U^0 par un vecteur \widehat{U}^0 selon la démarche proposée ci-dessus, il faut résoudre successivement :

1. Modèle h (non-linéaire) (le vecteur d'inconnues est h)

$$\begin{cases} A(h^{j-1}, K^0) \cdot h^j = F(h^{j-1}, K^0) & , \quad j = 1, \dots, M \\ h^0 = h_{ini} = u^0 \end{cases} \quad (3.67)$$

2. Modèle adjoint P (le vecteur d'inconnues est P)

$$\begin{cases} A(h^{j-1}, K^0) \cdot P^j = \mathcal{F}(h^j, K^0) \cdot P^{j+1} - \mathcal{A}(h^j, K^0) \cdot P^{j+1} \\ \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad + \mathcal{D}^j, & (j = (M-1), \dots, 1) \\ P^M = 0 \end{cases} \quad (3.68)$$

3. Modèle R (linéaire tangent) (le vecteur d'inconnues est R)

$$\begin{cases} A(h^{j-1}, K^0) \cdot R^j = \left(\left[\frac{\partial F}{\partial h}(h^{j-1}, K^0) \cdot R^{j-1} \right] - \left[\frac{\partial A}{\partial h}(h^{j-1}, K^0) \cdot R^{j-1} \cdot h^j \right] \right) \\ \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad + \left(\left[\frac{\partial F}{\partial K}(h^{j-1}, K^0) \cdot \widehat{K}^0 \right] - \left[\frac{\partial A}{\partial K}(h^{j-1}, K^0) \cdot \widehat{K}^0 \right] \cdot h^j \right) \\ R^0 = \widehat{u}^0 \end{cases} \quad (j = 1, \dots, M1) \quad (3.69)$$

4. Modèle adjoint au second ordre : (le vecteur d'inconnues est Q)

$$\begin{cases} A(h^{j-1}, K) \cdot Q^j = - \left(\left[\frac{\partial A}{\partial h}(h^{j-1}, K^0) \cdot R^{j-1} \right] \cdot P^j + \left[\frac{\partial A}{\partial K}(h^{j-1}, K^0) \cdot \widehat{K}^0 \right] \cdot P^j \right) \\ \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad + \mathcal{F}(h^j, K^0) \cdot Q^{j+1} - \mathcal{A}(h^j, K^0) \cdot Q^{j+1} \\ \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad + \left(\left[\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial h}(h^j, K^0) \cdot R^j \right] \cdot P^{j+1} + \left[\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial K}(h^j, K^0) \cdot \widehat{K}^0 \right] \cdot P^{j+1} \right) \\ \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad + \left(\left[\frac{\partial \mathcal{A}}{\partial h}(h^j, K^0) \cdot R^j \right] \cdot P^{j+1} - \left[\frac{\partial \mathcal{A}}{\partial K}(h^j, K^0) \cdot \widehat{K}^0 \right] \cdot P^{j+1} \right) \\ \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad - \left(\left[\frac{\partial \mathcal{D}}{\partial h} \cdot R^j \right] + \left[\frac{\partial \mathcal{D}}{\partial K} \cdot \widehat{K}^0 \right] \right) \\ Q^M = 0 \end{cases} \quad , \quad (j = (M-1), \dots, 1) \quad (3.70)$$

Le résultat du produit Hessien \times vecteur est récupéré dans $Q(t=0)$
Plus précisément, nous avons :

$$H(U^0) \cdot \tilde{U}^0 = \widetilde{\nabla} J_U$$

où

$$\begin{cases} \widetilde{\nabla}_u J = \lambda_1 u^0 - Q(0) \\ \widetilde{\nabla}_K J = \lambda_2 K^0 - \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X \partial K} \cdot R + \frac{\partial^2 F}{\partial^2 K} \cdot \tilde{K}^0 \right]^T P - \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T Q \end{cases}$$

3.6.2 Analyse de sensibilité : critères fonctionnels

Nous considérons les deux fonctions réponses ci-dessous :

$$EK(h_{obs}) = \frac{\Delta T \Delta Z}{2} \int_0^T \int_0^Z K(h)^2 dz dt,$$

et

$$EC(h_{obs}) = \frac{\Delta T \Delta Z}{2} \int_0^T \int_0^Z C(h)^2 dz dt,$$

pouvant être considérées comme la conductivité hydraulique moyenne EK et le coefficient de capacité capillaire moyen EC respectivement.

Le choix de ces deux critères est guidé par des considérations physiques de notre modèle. En effet, la capacité capillaire et la conductivité hydraulique sont fonctions de la pression h qui à son tour est fonction des observations dans le cas où le paramètre de contrôle est pris à l'optimum. Le but est de pouvoir mesurer la propagation d'un bruit sur les observations sur ces deux grandeurs. Nous avons en résolvant l'équation adjointe au second ordre Q avec comme second membre

$$\left[\frac{\partial K(h)}{\partial h} \right] \text{ ou } \left[\frac{\partial C(h)}{\partial h} \right].$$

Le gradient de ces critères fonctionnels par rapport aux paramètres de contrôle est donné par :

$$\begin{aligned} \nabla_K \mathcal{G} &= \int_0^T \int_0^Z \left(\left[\frac{\partial F}{\partial K}(h^{j-1}, K) \right]^T Q^j - \left[\frac{\partial A}{\partial K}(h^{j-1}, K) \cdot h^j \right]^T Q^j \right) dt dz \\ &+ \int_0^T \int_0^Z \left(\left[\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial K}(h^j, K) \cdot P^{j+1} \right]^T R^j - \left[\frac{\partial \mathcal{A}}{\partial K}(h^j, K) \cdot P^{j+1} \right]^T R^j \right) dt dz \\ &+ \int_0^T \int_0^Z \left(\left[\frac{\partial A}{\partial K}(h^{j-1}, K) \cdot h^j \right]^T R^j + \left[\frac{\partial \mathcal{D}}{\partial K}(h^j, K) \right]^T R^j \right) dt dz \end{aligned}$$

La sensibilité de ces critères fonctionnels par rapport à une perturbation sur les observations (ici représentées par l'infiltration cumulée I_{obs}) est donnée par :

$$\nabla_{I_{obs}} \mathcal{G} = - \left[\frac{\partial I_{cal}}{\partial h}(h^j) \right] \cdot R^j$$

3.7 Résultats numériques

Des expériences numériques ont été réalisées avec le modèle d'écoulement en zone non-saturée décrit au chapitre 1. Nous considérons la formulation en pression.

La discrétisation est faite en utilisant les schémas décrits au chapitre 2. Les pas de discrétisation choisis sont $\Delta t = 10$ secondes et $\Delta z = 1$ centimètre.

On rappelle que les observations (infiltration cumulée) sont générées soit à partir du modèle direct en se servant d'un jeu de paramètres de référence soit à partir d'observations provenant d'un sable de Grenoble.

Les observations (infiltration cumulée simulée), seront considérées suivant plusieurs distributions temporelles (tous les pas de temps, toutes les 60 secondes, toutes les 300 secondes et enfin toutes les 720 secondes).

Pour mener à bien l'étude de sensibilité par rapport aux observations, ces dernières sont bruitées de $\pm 10\%$ et nous avons calculé la sensibilité $\tilde{U}^* = (\tilde{K}^*, \tilde{u}^*)$ du vecteur de paramètre optimal par rapport à ce bruit sur les observations ainsi que celle des deux critères fonctionnels décrit dans le paragraphe 3.6.2.

Ci-dessous, nous présentons premièrement les résultats numériques du calcul de la sensibilité de la conductivité hydraulique moyenne EK et du coefficient de capacité capillaire moyen EC . Ensuite, nous présentons les résultats numériques du calcul de $\tilde{U}^* = (\tilde{K}^*, \tilde{u}^*)$.

3.7.1 Sensibilité des critères fonctionnels

La sensibilité est obtenue en inversant le Hessien de la fonction coût par un algorithme de gradient conjugué, ensuite, on intègre le modèle linéaire tangent avec comme initialisation le résultat de cette inversion afin de décrire l'évolution de sa norme dans le temps.

Pour les critères fonctionnels (fonctions réponses) définis au paragraphe 3.6.2, nous présentons sur les graphes (3.1), (3.2), (3.3), (3.4), (3.5), (3.6), (3.7), (3.8), (3.9), et (3.10), les résultats du calcul de ces sensibilités.

Nous constatons à travers les courbes des graphiques (3.1), (3.2), (3.3), (3.4), (3.5), (3.6), (3.7), (3.8), (3.9), (3.10) que la norme de la sensibilité de la conductivité hydraulique moyenne est supérieure à la norme de la sensibilité du coefficient capillaire moyen. Nous pouvons conclure au vu de ces résultats que la conductivité hydraulique moyenne est plus «sensible» que le coefficient capillaire moyen.

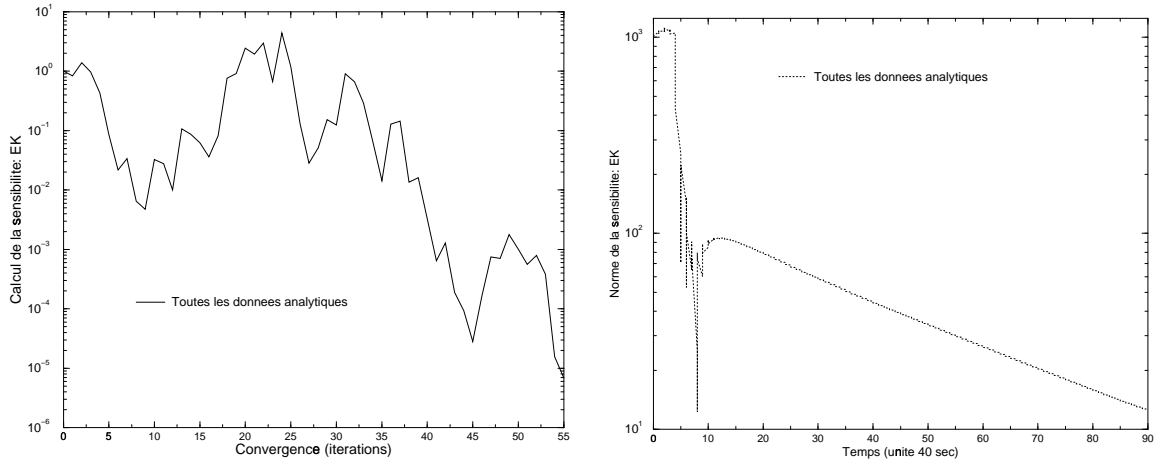


FIG. 3.1 – La figure de gauche représente la convergence du calcul du paramètre optimal du gradient de EK au cours des itérations ; celle de droite montre l'évolution (en fonction du temps) de la norme de la sensibilité de EK : *toutes les données analytiques*

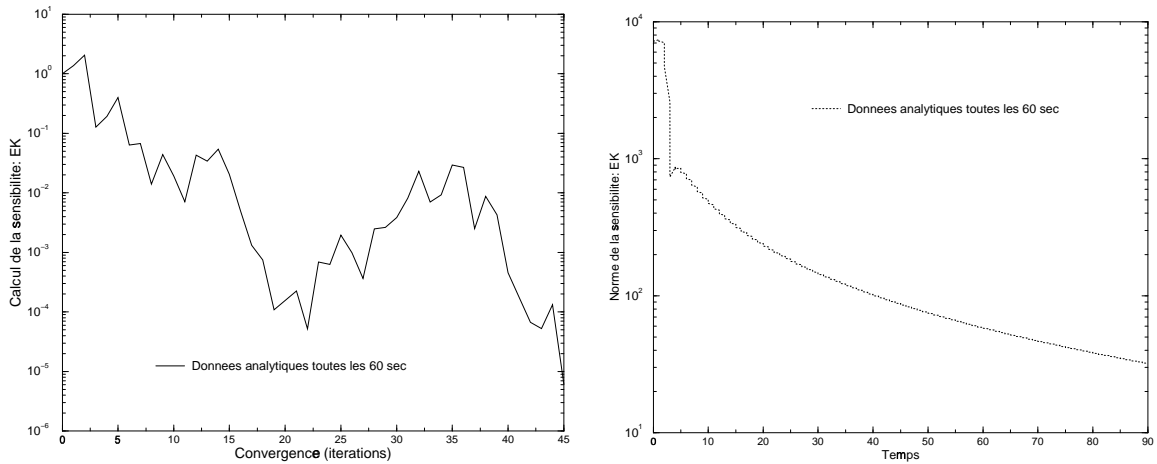


FIG. 3.2 – La figure de gauche représente la convergence du calcul du paramètre optimal du gradient de EK au cours des itérations ; celle de droite montre l'évolution (en fonction du temps) de la norme de la sensibilité de EK : *données analytiques toutes les 60 secondes*

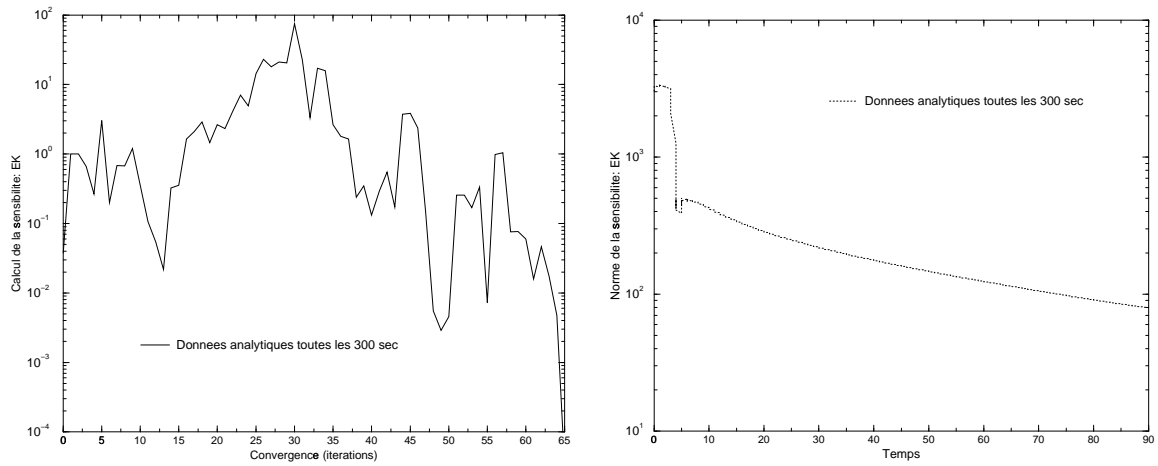


FIG. 3.3 – La figure de gauche représente la convergence du calcul du paramètre optimal du gradient de EK au cours des itérations ; celle de droite montre l'évolution (en fonction du temps) de la norme de la sensibilité de EK : *données analytiques toutes les 300 secondes*

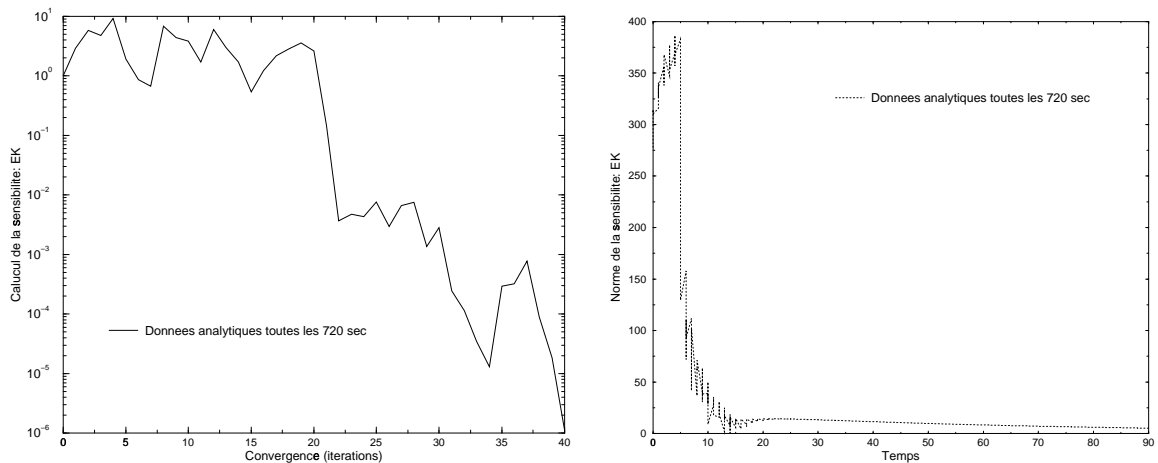


FIG. 3.4 – La figure de gauche représente la convergence du calcul du paramètre optimal du gradient de EK au cours des itérations ; celle de droite montre l'évolution (en fonction du temps) de la norme de la sensibilité de EK : *données analytiques toutes les 720 secondes*

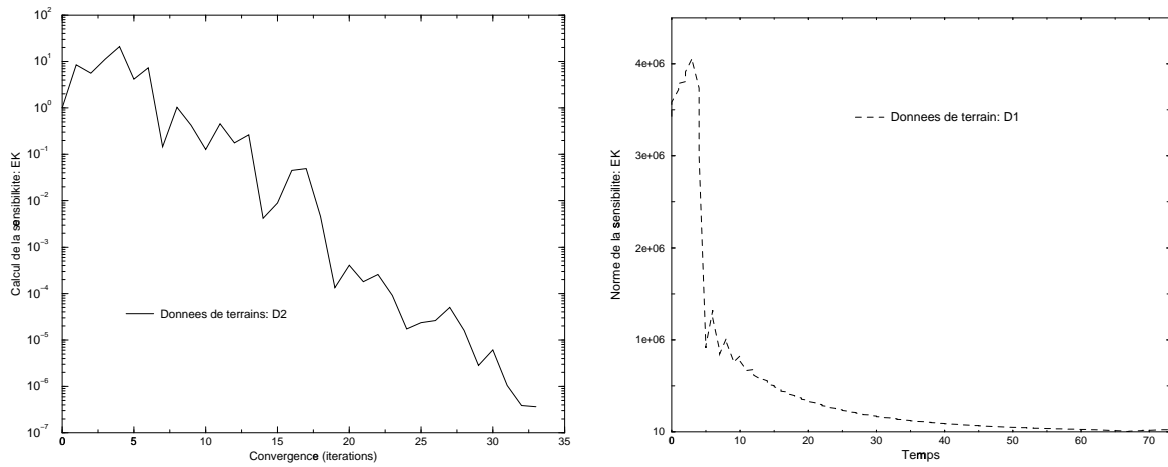


FIG. 3.5 – La figure de gauche représente la convergence du calcul du paramètre optimal du gradient de EK au cours des itérations ; celle de droite montre l'évolution (en fonction du temps) de la norme de la sensibilité de EK : *données de terrain*

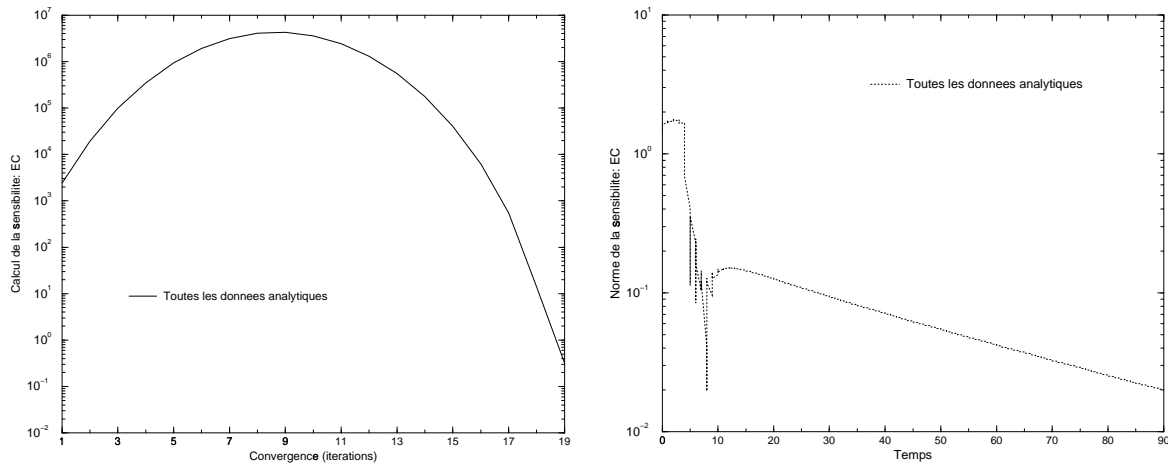


FIG. 3.6 – La figure de gauche représente la convergence du calcul du paramètre optimal du gradient de EC au cours des itérations ; celle de droite montre l'évolution (en fonction du temps) de la norme de la sensibilité de EC : *toutes les données analytiques*

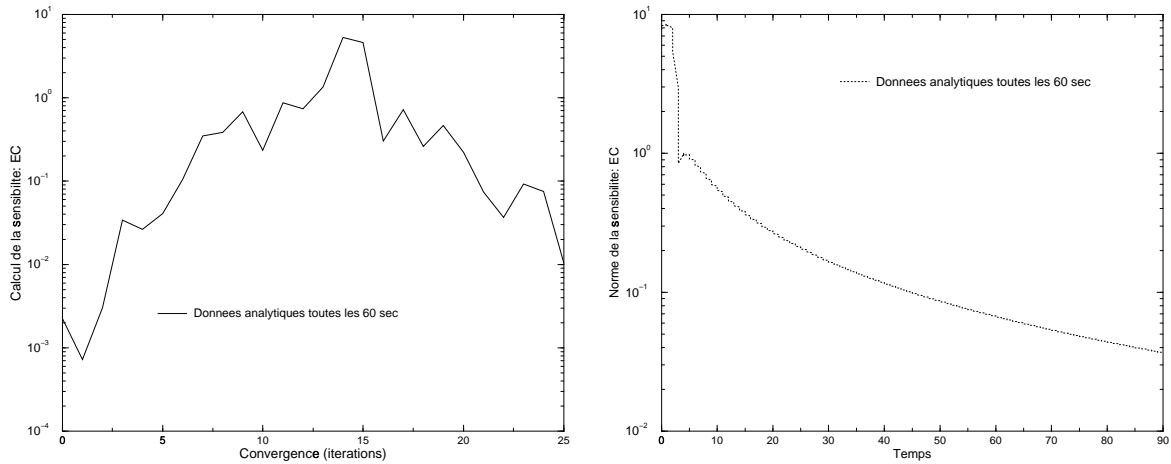


FIG. 3.7 – La figure de gauche représente la convergence du calcul du paramètre optimal du gradient de EC au cours des itérations ; celle de droite montre l'évolution (en fonction du temps) de la norme de la sensibilité de EC : *données analytiques toutes les 60 secondes*

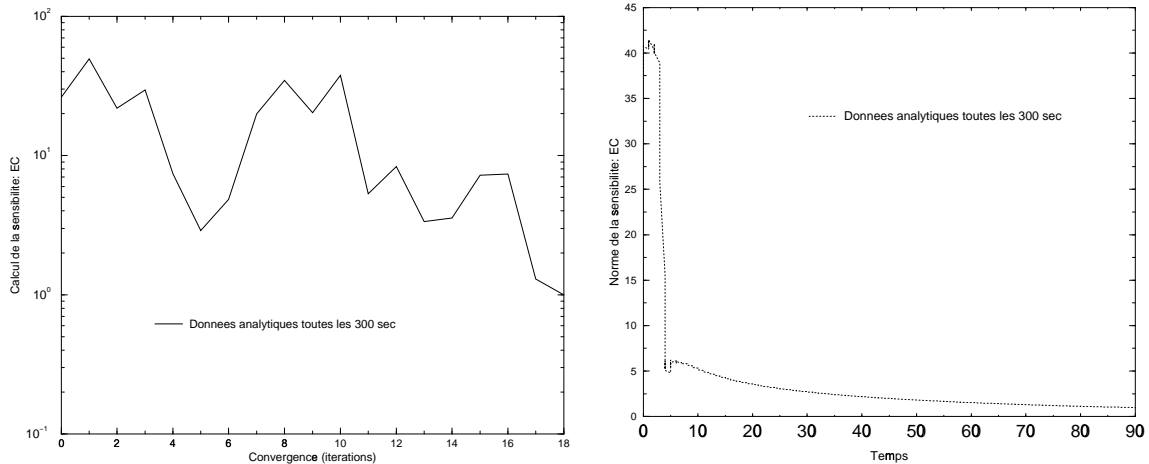


FIG. 3.8 – La figure de gauche représente la convergence du calcul du paramètre optimal du gradient de EC au cours des itérations ; celle de droite montre l'évolution (en fonction du temps) de la norme de la sensibilité de EC : *données analytiques toutes les 300 secondes*

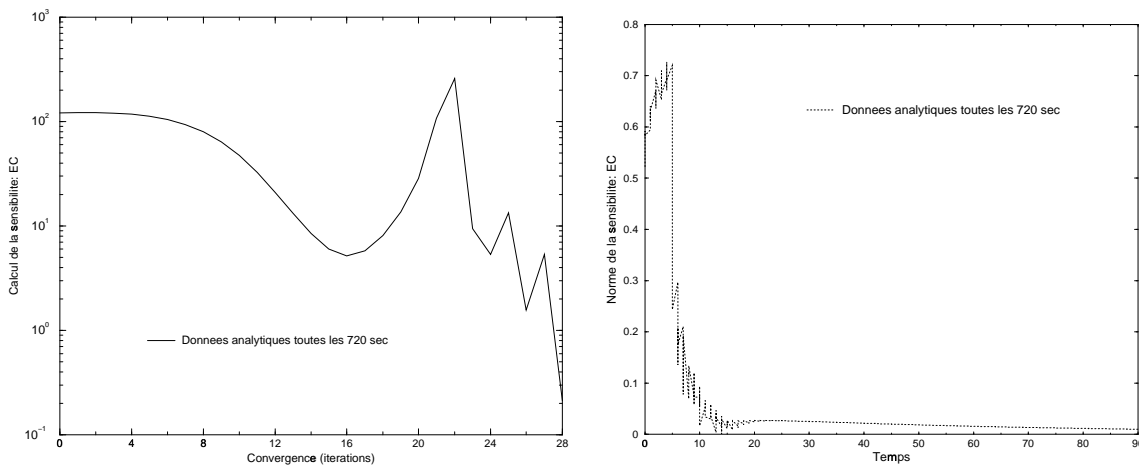


FIG. 3.9 – La figure de gauche représente la convergence du calcul du paramètre optimal du gradient de EC au cours des itérations ; celle de droite montre l'évolution (en fonction du temps) de la norme de la sensibilité de EC : *données analytiques toutes les 720 secondes*

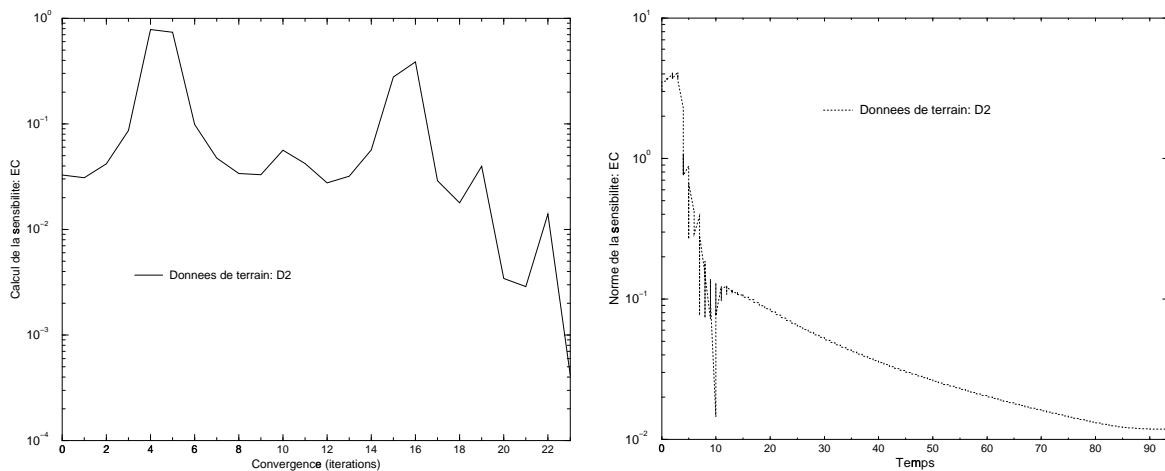


FIG. 3.10 – La figure de gauche représente la convergence du calcul du paramètre optimal du gradient de EC au cours des itérations ; celle de droite montre l'évolution (en fonction du temps) de la norme de la sensibilité de EC : *données de terrain*

3.7.2 Sensibilité du vecteur de paramètres optimal

Pour le calcul des sensibilités ci-dessous (suite à une perturbation de $\pm 10\%$ sur les observations), nous présentons des courbes de taux de convergence de la norme du résidu $H\tilde{U}^* + Q_2(0)$ et de la norme du vecteur de sensibilité \tilde{U}^* . Ces différentes courbes sont obtenues au cours des itérations en divisant la norme du résidu à l'itération j par la norme du résidu au point de départ de la minimisation. Il en est de même pour la norme du vecteur de sensibilité

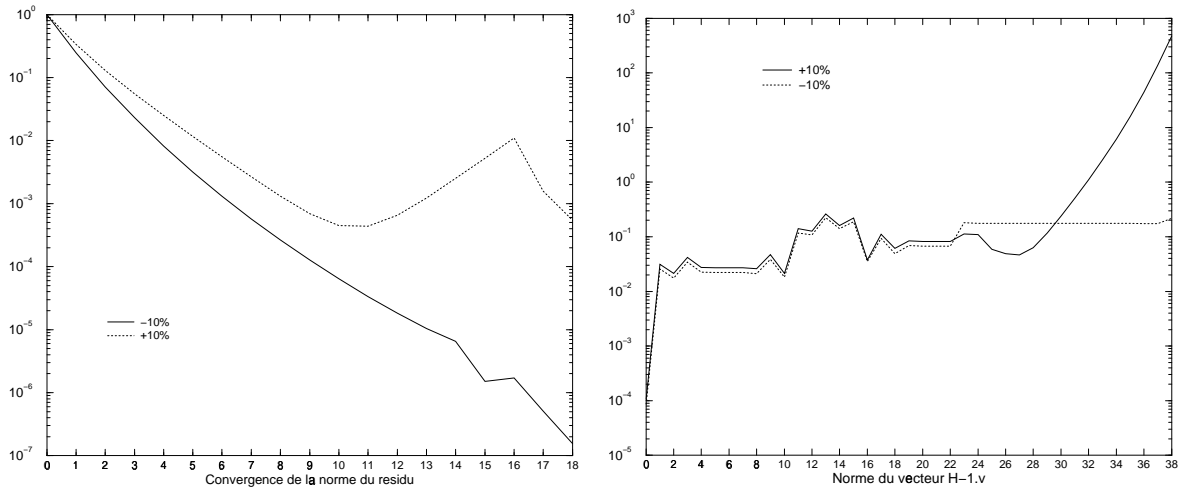


FIG. 3.11 – La figure de gauche représente la convergence de la norme du résidu en fonction des itérations; celle de droite la norme du vecteur la sensibilité : *toutes les données analytiques*

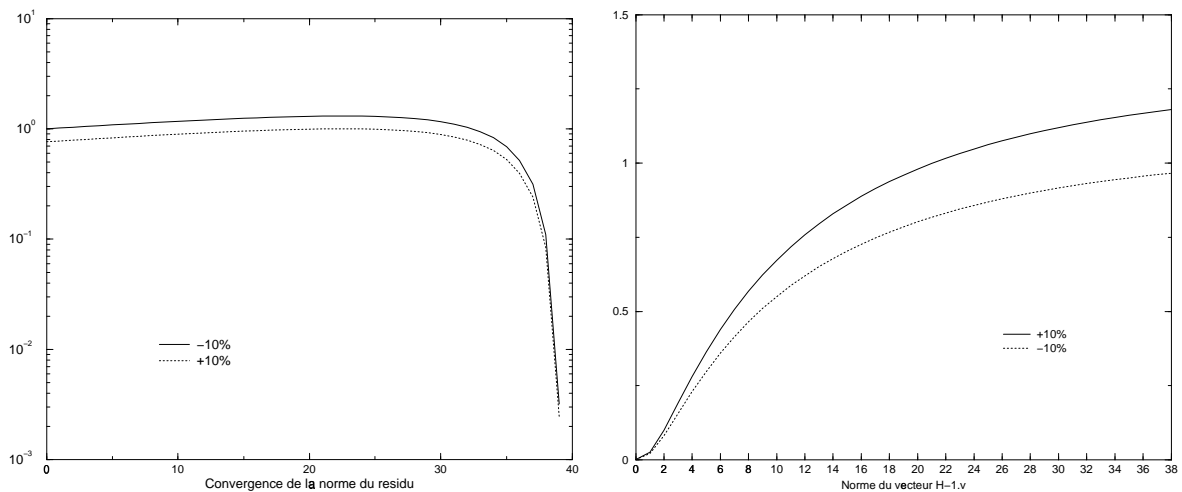


FIG. 3.12 – La figure de gauche représente la convergence de la norme du résidu en fonction des itérations; celle de droite la norme du vecteur la sensibilité : *données analytiques toutes les 60 secondes*

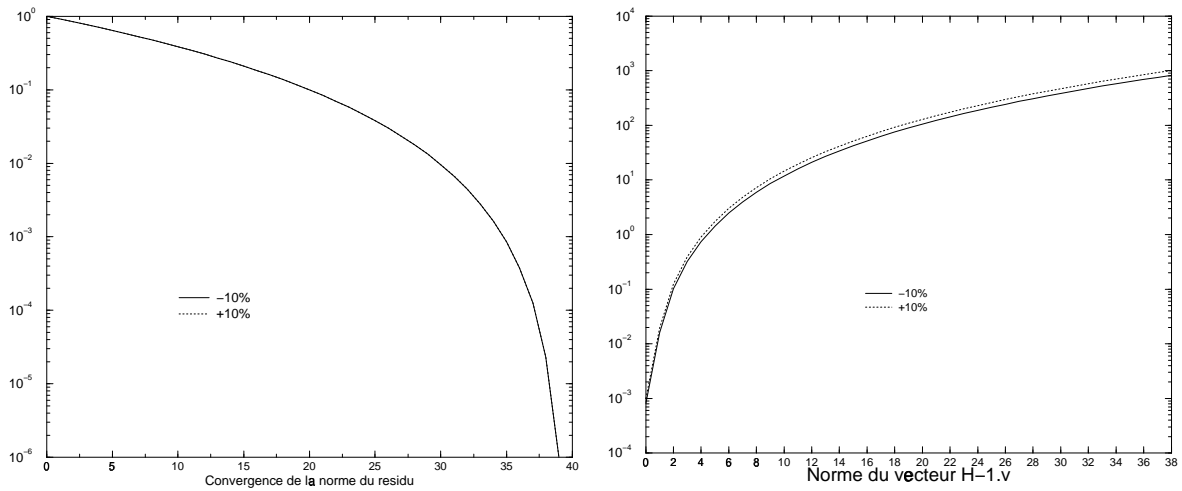


FIG. 3.13 – La figure de gauche représente la convergence de la norme du résidu en fonction des itérations; celle de droite la norme du vecteur la sensibilité : *données analytiques toutes les 300 secondes*

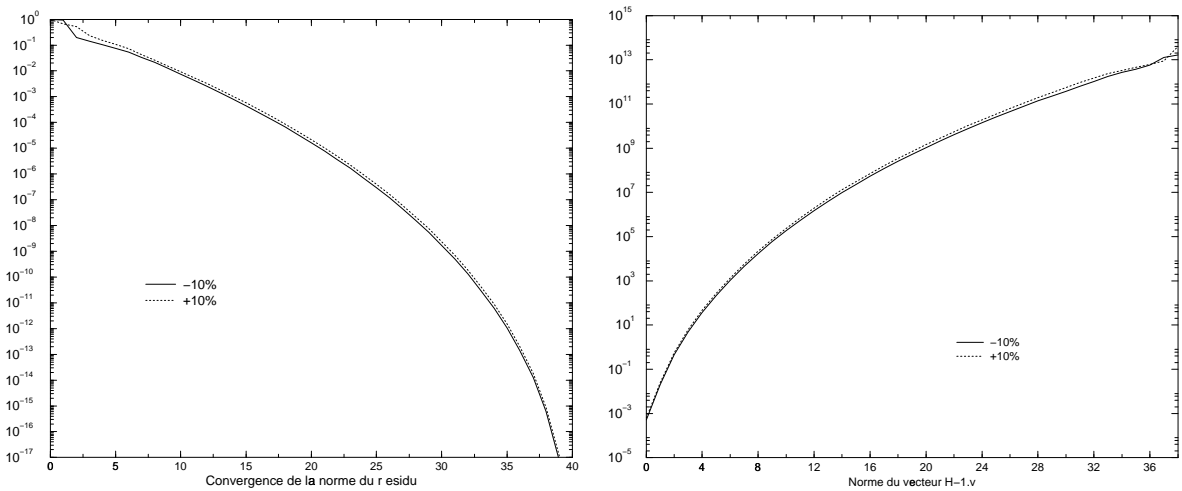


FIG. 3.14 – La figure de gauche représente la convergence de la norme du résidu en fonction des itérations; celle de droite la norme du vecteur la sensibilité : *données analytiques toutes les 720 secondes*

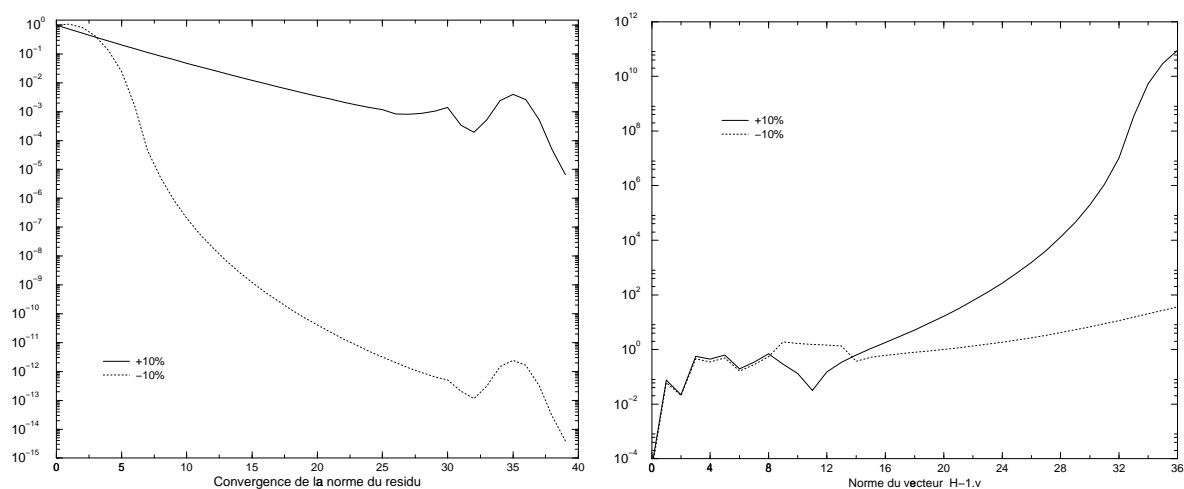


FIG. 3.15 – La figure de gauche représente la convergence de la norme du résidu en fonction des itérations; celle de droite la norme du vecteur la sensibilité : *données de terrain*

Sur les graphiques (3.11), (3.12), (3.13), (3.14) et (3.15) nous remarquons l'influence des erreurs sur les observations sur la «qualité» du résultat de l'identification. Toute fois, nous constatons une très bonne convergence pour les données discrètes toutes les 10 secondes, toutes 720 secondes et pour les données de terrain. Une explication sera fournie au paragraphe 3.10 car se comportement est lié au conditionnement du Hessien de la fonction coût. L'erreur de +10% sur les observations domine à chaque fois celle de -10%. De façon globale on retient qu'une bonne identification nécessite forcément de disposer de données «fiables».

Commentaires

Les paramètres identifiés par l'assimilation variationnelle de données sont bien sensibles aux bruits sur les observations. Cette sensibilité varie en fonction des différentes configurations temporelles de données (figures 3.11, 3.12, 3.13, 3.14) et (3.15) lorsque les observations sont perturbées.

Par ailleurs, pour le coefficient de capacité capillaire moyen et la conductivité hydraulique moyenne, en regardant l'évolution de la norme de leurs sensibilités, on constate la très forte sensibilité aux premières observations (≤ 400 secondes).

La sensibilité étant calculée par inversion du Hessien de la fonction coût, son conditionnement dépend de la distribution temporelle des données.

Ci-dessous, nous nous intéressons à la distribution temporelle des données afin de chercher à quantifier le nombre de données indispensable à une «bonne» identification.

3.8 Sensibilité par rapport à la configuration temporelle des observations

Dans la réalité, en hydrologie et de façon générale en géophysique, la configuration spatio-temporelle des observations dépend des paramètres d'observation à travers l'opérateur C :

$$C : \alpha \in \Lambda \longrightarrow C(\alpha)$$

où $\alpha \in \Lambda$, ensemble des paramètres d'observations admissibles. Pour les modèles hydrologiques, il peut être caractérisé par la phase d'étallonnage des données de terrains. Notre assimilation de données consistant à retrouver le vecteur de paramètre optimal du modèle, nous nous sommes posés la question suivante :

« Comment calculer la sensibilité du vecteur de paramètre optimal par rapport à la configuration temporelle des observations ? »

Soit $\alpha_0 \in \Lambda$ et $C = C(\alpha_0)$.

Nous reprenons le problème d'assimilation variationnelle de données évoqué dans les chapitres précédents, et nous nous intéressons de façon générale à l'opérateur C . L'opérateur C n'apparaît que dans l'expression de la fonction coût.

En posant $w = (K, u)$ cette dernière devient :

$$J(w, \alpha_0) = \frac{\lambda_1}{2} \|u - u^0\|^2 + \frac{\lambda_2}{2} \|K - K^0\|^2 + \frac{1}{2} \int_0^T \|C(\alpha_0) \cdot X - X_{obs}\|^2 dt$$

ce qui change le modèle adjoint dans le système d'optimalité en :

$$\begin{cases} \frac{dP}{dt} = \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X, K) \right]^T \cdot P = [C(\alpha_0)]^T (C(\alpha_0) \cdot X - X_{obs}) \\ P(t = T) = 0 \end{cases} \quad (3.71)$$

Notons par $P(t, w, \alpha_0)$, la solution de (3.71), et définissons une nouvelle variable \bar{P} par

$$\bar{P}(w) = \left(\lambda_1 (u - u^0) - P(0, w, \alpha_0), \lambda_2 (K - K^0) - \left[\frac{\partial F}{\partial K}(X, K) \right]^T \cdot P(t, w, \alpha_0) \right),$$

ensuite faisons les trois hypothèses suivantes :

Hypothèses

H1) Il existe un unique $w^* = (K^*, u^*) \in \mathcal{E}_{ad} = E_{ini} \times \mathcal{K}_{ad}$ tel que : $\bar{P}(w^*) = 0$

H2) l'application

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{ad} \times \Lambda &\longrightarrow \mathcal{E}'_{ad} \\ (w, \alpha) &\longmapsto \bar{P}(w, \alpha) \end{aligned}$$

est de classe C^1

H3) $\frac{\partial \bar{P}}{\partial w}(w, \alpha_0)$ est un isomorphisme de $\mathcal{L}(\mathcal{E}_{ad}, \mathcal{E}'_{ad})$

Nous pouvons alors énoncer la proposition suivante :

Proposition 3.2 *Sous les hypothèses **H1)**, **H2)**, **H3)**, il existe \mathcal{A} (resp \mathcal{V}) voisinage de α_0 (resp w^*) dans Λ (resp \mathcal{E}_{ad}), et une unique application :*

$$\begin{aligned} \epsilon : \mathcal{A} &\longrightarrow \mathcal{E}'_{ad} \\ \alpha &\longmapsto \epsilon(\alpha) \end{aligned}$$

tels que :

- (i) $\bar{P}(w, \alpha) = 0$ pour tout $\alpha \in \mathcal{A}$
- (ii) $\epsilon(\alpha_0) = (K^*, u^*)$
- (iii) ϵ est de classe C^1 et on a :

$$\frac{d\epsilon}{d\alpha}(\alpha_0) = \left[\frac{\partial \bar{P}}{\partial w}(w^*, \alpha_0) \right]^{-1} \cdot \frac{\partial \bar{P}}{\partial \alpha}(w^*, \alpha_0) \quad (3.72)$$

Démonstration :

La démonstration de ce résultat est déduite du théorème des fonctions implicites en se rappelant qu'en fait la définition de la nouvelle variable \bar{P} est inspirée par le système d'optimalité dans lequel nous avons :

$$\lambda_1 u^* - P(0, w, \alpha_0) = 0 \quad \text{et} \quad \lambda_2 K^* - \left[\frac{\partial F}{\partial K}(X, K^*) \right]^T \cdot P(t, w, \alpha_0) = 0.$$

Remarques

- $\frac{d\epsilon}{d\alpha}$ est la sensibilité effective du vecteur de paramètres optimal par rapport aux paramètres d'observations.
- $\frac{\partial \bar{P}}{\partial w}(w^*, \alpha_0) = \frac{\partial^2 J}{\partial^2 w}(w^*, \alpha_0)$ est le Hessien de la fonction coût par rapport à la variable de contrôle (K, u) . Explicitement, ses composantes sont définies par :

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 J}{\partial^2 u}(w^*, \alpha_0) = \lambda_1 u^* - \frac{\partial^2 P}{\partial u^2}(0, K^*, u^*, \alpha_0) , \\ \frac{\partial^2 J}{\partial^2 K}(w^*, \alpha_0) = \lambda_2 K^* - \left[\frac{\partial^2 F}{\partial K^2}(X, K) \right]^T \cdot P(t, w, \alpha_0) - \left[\frac{\partial F}{\partial K}(X, K) \right]^T \cdot \frac{\partial P}{\partial K}(t, w, \alpha_0) , \\ \frac{\partial^2 J}{\partial K \partial u}(w^*, \alpha_0) = -\frac{\partial^2 P}{\partial K \partial u}(0, K^*, u^*, \alpha_0) \end{cases}$$

- Le calcul de cette sensibilité nécessite :
 - le calcul du produit Hessien \times vecteur, et on pourra l'inverser ensuite par des méthodes du type gradient-conjugué.

- la régularité au moins C^1 de l'application $\alpha \rightarrow C(\alpha)$, au cas où c'en est une, pour le calcul du vecteur $\frac{\partial \bar{P}}{\partial w}(0, w^*, \alpha_0)$
- La sensibilité $\frac{d\epsilon}{d\alpha}$ donne une indication sur l'optimisation des paramètres d'observation, les paramètres optimaux étant ceux pour lesquels la sensibilité est maximale. On pourra ainsi établir un critère d'optimalité sur les paramètres d'observation mais malheureusement, l'application $\alpha \rightarrow C(\alpha)$, qui est le nœud central dans cette approche n'est généralement pas accessible (en particulier pour les données altimétriques satellitaires). Pour les modèles hydrologiques, il peut-être caractérisé par la phase d'étallonnage des données de terrains (pression, teneur en eau, infiltration cumulée) par rapport aux instruments de mesures.

La question abordée dans ce paragraphe est similaire au résultat sur le calcul de la sensibilité U^* du vecteur de paramètre optimal par rapport à un bruit sur les observations, abordée à la section 3.5.1. Il est intéressant de voir comment les deux expressions de sensibilité sont semblables :

$$\tilde{K}^* = -H^{-1} \cdot Q_1(0) \quad (3.73)$$

$$\frac{d\epsilon}{d\alpha}(\alpha_0) = -H^{-1} \cdot \frac{\partial P}{\partial \alpha}(0, w^*, \alpha_0) \quad (3.74)$$

En réalité, cette similitude est loin d'être une identité à cause de la différence de la nature entre les deux vecteurs $Q_1(0)$ et $\frac{\partial P}{\partial \alpha}(0, w^*, \alpha_0)$. Le premier est la perturbation produite sur l'état adjoint par une perturbation sur les observations, et le second est la perturbation produite sur l'état adjoint par une perturbation sur les paramètres d'observations. Et il est important de noter qu'une perturbation sur les paramètres d'observations n'induit pas une perturbation sur les observations, mais plutôt un changement de la configuration spatio-temporelle des observations.

3.9 Rôle du Hessien en assimilation variationnelle des données

Vu l'importance du Hessien dans les études de sensibilité et de façon générale en optimisation, nous présentons ci-dessous, son impact dans les problèmes de minimisation dérivés du problème d'assimilation variationnelle de données.

3.9.1 Approche statistique

On cherche à estimer les erreurs d'ajustement sur les paramètres optimaux (résultats de l'assimilation). Le point important dans cette démarche est que le Hessien de la fonction coût peut être identifié à l'inverse de la matrice de covariance des paramètres de contrôle. La matrice de covariance peut être utilisée pour estimer l'incertitude (l'erreur)

sur un résultat quelconque du modèle (dépendant des paramètres) et ainsi, déterminer quels paramètres du modèle sont mal identifiés à partir des données.

Soit x le vecteur de contrôle (paramètres à identifier) d'un modèle, d le vecteur de données et $m(x)$ l'application qui transforme les solutions du modèle (à partir des paramètres x) en vecteur comparable aux données d .

Supposons que les différences entre le modèle et les données

$$\varepsilon = m(x) - d$$

sont des erreurs aléatoires. Notons que ces erreurs ne sont pas simplement dues aux imprécisions des mesures ; dans les modèles météorologiques et océanographiques ou hydrologiques (prélèvement des données de terrain), une large contribution à cette erreur est la représentativité ou l'erreur due à une résolution finie. Si ces erreurs suivent une loi normale de moyenne nulle, alors la fonction coût peut être identifiée à l'argument de la fonction gaussienne :

$$f_E(\varepsilon; O, A) = \left[\frac{\det(A)}{(2\pi)^\delta} \right]^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \varepsilon^T \cdot A \cdot \varepsilon \right], \quad (3.75)$$

A étant l'inverse de la matrice de covariance des erreurs aléatoires et δ la dimension du vecteur d [65, 99].

Considérée comme fonction des paramètres de contrôle, la fonction de distribution (3.75) définit une fonction de vraisemblance :

$$L(x) = \alpha f_E(d - m(x); O, A) \quad (3.76)$$

α étant une constante positive.

La minimisation de la fonction coût équivaut à la minimisation de la fonction de vraisemblance. En normalisant le choix d'un α_0 de sorte que $\int L(x) dx = 1$, la fonction de vraisemblance peut-être regardée comme une densité de probabilité pour les variables de contrôle x . L'optimum correspond au mode de cette distribution, qui équivaut à la distribution moyenne lorsque $m(x)$ est affine et lorsque la distribution des erreurs d'ajustement est supposée gaussienne. Les covariances de cette distribution donnent une mesure de la qualité de l'identification des paramètres à partir des données : Thacker [99]

Lorsque $m(x)$ est affine, la fonction de densité de x est :

$$f_E(x; x^*, H) = \left[\frac{\det(H)}{(2\pi)^\xi} \right]^{\frac{1}{2}} \left[-\frac{1}{2} (x - x^*)^T \cdot H \cdot (x - x^*) \right] \quad (3.77)$$

où $x^* \in \mathbb{R}^\xi$ est l'optimum, et H est le Hessian de la fonction coût :

$$H = \left[\frac{\partial m}{\partial x} \right]^T \cdot A \cdot \left[\frac{\partial m}{\partial x} \right]$$

Ainsi, l'inverse du Hessian peut être identifiée à la matrice de covariance de la densité de probabilité des variables de contrôle, et peut être utilisée pour estimer la variance

d'une fonction quelconque des variables de contrôle. Ceci est analogue à la regression [81].

Si m est non-linéaire l'estimation de l'erreur d'ajustement est plus compliquée. La fonction coût peut avoir plusieurs minima relatifs, auquel cas les variables de contrôle pourraient avoir une grande probabilité d'être localisées dans plusieurs régions disjointes. La forme (l'allure) de la fonction coût dépend du nombre, du type et de la qualité des données. Plus on dispose des données, plus le minimum principal est profond dans la forme de la fonction coût; donc avec suffisamment de *bonnes données*, la fonction coût aurait un unique minimum profond (plus profond que tous les autres), malgré la non-linéarité de m . Dans le voisinage de ce minimum profond, la fonction coût serait quadratique et la densité de probabilité de x serait approximativement gaussienne. Si c'est le cas, alors une bonne approximation de l'inverse de la matrice de covariance de x est donnée par le Hessien de la fonction coût (c.f. Gallant [35]).

En assimilation de données météorologiques, océanographiques ou hydrologiques, il est très peu probable d'avoir autant de données (observations) que de degrés de liberté du modèle. Néanmoins un unique optimum peut être trouver en introduisant soit des pseudo-données représentant une connaissance a priori, soit un terme de régularisation, ce qui change la forme de la fonction coût et aussi de la fonction de vraisemblance. L'expression générale du Hessien est alors :

$$H = \left(\frac{\partial m}{\partial x} \right)^T \cdot A \cdot \left(\frac{\partial m}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial^2 m}{\partial x^2} \right)^T \cdot A \cdot (m(x) - d) \quad (3.78)$$

On remarquera que pour les modèles linéaires, le Hessien est indépendant des variables de contrôle. Par contre, pour les modèles non-linéaires, le Hessien doit être évalué en $x = x^*$ pour une bonne approximation de la matrice de covariances.

Remarque :

L'estimation des erreurs d'ajustement et leurs covariances nécessite le calcul du Hessien et de son inverse. Mais ceci n'est pas toujours possible à cause des coûts de calculs élevés pour les modèles de grande taille. Mais il est possible, par la méthode de l'adjoint au second ordre donnée par Le Dimet et al. [26, 104, 23, 43], de calculer le produit Hessien-vecteur : $H.v$. Et par un algorithme de type gradient conjugué, on peut aussi calculer $H^{-1}.v$ ce qui est nettement plus précis (que les approximations du Hessien faites par différences finies jusqu'à présent) et moins coûteux.

3.9.2 Rôle du Hessien en optimisation

Du point de vue numérique, les problèmes d'assimilation de données sont des problèmes d'optimisation sans contraintes dans les cas les plus simples et leurs résolutions numériques utilisent les algorithmes de descentes. Les informations sur le Hessien sont fondamentales sur plusieurs aspects notamment en optimisation avec ou sans contrainte. Toute méthode de minimisation a pour point de départ, l'assurance de la forme quadratique de la fonctionnelle à minimiser au voisinage de l'optimum.

Pour le problème :

$$\inf_{x \in \mathbb{R}^n} F(x),$$

la condition nécessaire d'existence du minimum est

$$\nabla F(x^*) = 0,$$

où x^* est le point stationnaire. Pour caractériser l'existence du minimum du problème de minimisation de la fonctionnelle F , nous devons avoir certaines informations concernant le Hessien.

3.9.3 Spectre du Hessien et convergence

Les valeurs propres de la matrice hessienne prédisent le comportement et la vitesse de convergence de la minimisation avec ou sans contrainte. En effet supposons que la fonctionnelle à minimiser non-linéaire $F(x)$ vérifie : $\|F(x) - F(x^*)\| < \epsilon_A$ $x \in \mathbb{R}^n$ et nous définissons ainsi x^* comme une solution acceptable.

Si F est deux fois continuellement différentiable, ie si $F \in C^2$ et si x^* est un minimum global alors

$$\nabla F(x^*) = 0$$

et $H(x^*)$ son Hessien au point x^* est défini positif, i.e.,

$$x^{*T} H(x^*) x^* > 0.$$

Le développement de F en séries de Taylor à l'ordre 2 au voisinage de x^* donne :

$$F(x) = F(x^* + hp) = F(x^*) + \frac{1}{2} h^2 p^T H(x^*) p + O(h^2)$$

car $\nabla F(x^*) = 0$ où $\|p\| = 1$ et $h = \|x - x^*\|$.

Pour toute solution acceptable au sens indiqué plus haut, nous obtenons

$$h^2 = \|x - x^*\|^2 \approx \frac{2\epsilon_A}{p^T H(x^*) p}.$$

Toute l'information sur la vitesse de convergence de la minimisation sans contrainte est contenue dans $\|x - x^*\|$ (Gill et al [40]). Si la matrice hessienne $H(x^*)$ est mal conditionnée, alors une erreur sur x variera suivant la direction de perturbation p .

Si p est une combinaison linéaire de vecteurs propres correspondant à la plus grande valeur propre, la taille de $\|x - x^*\|$ sera relativement petite. En revanche si p est une combinaison linéaire de vecteurs propres correspondant à la plus petite valeur propre, la taille de $\|x - x^*\|$ sera relativement grande ce qui traduit une convergence lente.

Pour un problème de minimisation avec contrainte linéaire de type $Ax = b$ où A , est une matrice de type $m \times n$ de plein rang le problème peut être réduit à un problème de minimisation sans contraintes en effectuant une projection sur le sous espace nul associé à la matrice A . Pour plus de précision se référer à Gill et al [40].

3.10 Conditionnement du Hessien

Le conditionnement est défini par le rapport de la plus grande par la plus petite valeur propre, qui sont toutes positives ou nulles dans le cas où la matrice est symétrique et semi-définie positive. C'est le cas du Hessien. Une valeur propre nulle indique que le Hessien est singulier et donc que les paramètres ne peuvent pas être identifiés à partir des données. À cause des erreurs d'arrondi, une valeur propre très petite ne peut être distinguée d'une valeur propre nulle. Un Hessien mal conditionné est presque singulier, c'est-à-dire que certaines combinaisons linéaires des paramètres sont très mal identifiées. Si le Hessien est mal conditionné, ce qui est le cas lorsque certaines combinaisons linéaires des paramètres sont mal identifiées, atteindre le minimum de la fonction coût nécessite beaucoup d'itérations par les algorithmes de descente. Une approche algorithmique pour éviter cela est de préconditionner le processus de minimisation pour accélérer la convergence. Le conditionnement du Hessien joue un rôle très important en assimilation variationnelle de données. Il donne une information à la fois qualitative et quantitative sur :

- l'identification des paramètres : on identifie *bien* tous les paramètres (variables de contrôle) lorsque le Hessien est bien conditionné, et lorsqu'il ne l'est pas, certaines combinaisons linéaires des paramètres, notamment les directions des vecteurs propres correspondant aux plus petites valeurs propres, sont mal identifiées.
- la vitesse de convergence du processus de minimisation.
- la sensibilité des paramètres optimaux par rapport aux observations (voir [81])

Lorsque les données sont suffisantes pour identifier les paramètres du modèle de façon assez précise, le Hessien paraît bien conditionné, et la convergence ne pose pas trop de problèmes, du moins a priori. Néanmoins, des méthodes de descentes plus performantes (quasi-Newton, Newton tronqué) peuvent aider, notamment lorsque la lenteur de la convergence est due aux données inadéquates. En réalité, la source du problème de conditionnement et donc de vitesse de convergence peut se localiser dans le modèle aussi bien que dans les données.

3.10.1 Consistance

La consistance du conditionnement peut être définie par sa dégradation (croissante) en fonction de la dégradation (décroissante) de la densité temporelle des observations. On a :

$$\kappa(H) = \frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}} \quad (3.79)$$

Si H est symétrique et définie positive, nous pouvons écrire :

$$H = L^T.L, \quad (3.80)$$

L pouvant être interprété comme l'opérateur qui à tout vecteur de paramètres de contrôle associe la projection de la solution du modèle direct dans l'espace des observations :

$$L(U) = C.X(U).$$

On a aussi :

$$\lambda_{max} = \underset{\substack{U \in \mathcal{K}_{ad} \\ U \neq 0}}{\text{Max}} \frac{U^T.L^T.L.U}{U^T.U} \tag{3.81}$$

Les valeurs propres maximale et minimale du Hessien varient (décroissantes ou croissantes) en fonction de la dégradation temporelle des observations. Par conséquent, le conditionnement variera par rapport à la dégradation temporelle des observations.

3.11 Diagonalisation du Hessien par la méthode de Lanczos

La méthode de Lanczos est une méthode de recherche du spectre d'une matrice symétrique qui n'est par forcément définie positive. C'est une méthode de type itérative. Son principe repose sur les propriétés de convergence de l'espace de Krylov engendré à partir d'un vecteur initial donné comme pour la méthode de gradient conjugué. Rappelons la définition suivante de l'espace de Krylov associé à une matrice $H \in \mathcal{M}(n, n)$. Soit $x_0 \in \mathbb{R}^n$ donné, x_0 non nul, on définit l'espace de Krylov d'ordre m comme le sous espace vectoriel :

$$\mathcal{K}_m \stackrel{def}{=} \mathcal{L} \langle x_0, H.x_0, H^2.x_0, \dots, H^{m-1}.x_0 \rangle. \tag{3.82}$$

Rappelons aussi que le spectre d'une matrice symétrique H est formé par des valeurs propres, classés en ordre décroissant : $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \lambda_n$ qui sont des quantités sup-inf :

$$\lambda_i = \underset{\substack{V \subset \mathbb{R}^n \\ \dim V = i}}{\text{Sup}} \underset{x \in V}{\text{Inf}} \frac{\langle x, H.x \rangle}{\langle x, x \rangle} \quad i = 1, 2, \dots, n \tag{3.83}$$

La méthode de Lanczos à sa $m^{\text{ième}}$ itération donne le spectre de la projection de Rayleigh de H sur \mathcal{K}_m , c'est-à-dire :

$$\theta_i^m = \underset{\substack{V \subset \mathbb{R}^n \\ \dim V = i}}{\text{Sup}} \underset{x \in V}{\text{Inf}} \frac{\langle x, \text{Proj}_{\mathcal{K}_m}(H.x) \rangle}{\langle x, \text{Proj}_{\mathcal{K}_m}(x) \rangle} \quad i = 1, 2, \dots, m \tag{3.84}$$

Soit $\{q_1, q_2, \dots, q_m\}$ une base orthonormée et qui engendre l'espace de Krylov \mathcal{K}_m d'ordre m et soit Q_m une matrice d'ordre $n \times m$ avec $m \leq n$ dont la $j^{\text{ième}}$ colonne est le vecteur q_j . L'opérateur de projection s'écrit $Q_m.Q_m^T$. Par conséquent l'expression

(3.84) devient :

$$\begin{aligned} \theta_i^m &= \sup_{\substack{V \subset \mathbb{R}^n \\ \dim V = i}} \inf_{x \in V} \frac{\langle Q_m^T \cdot x, Q_m^T \cdot H \cdot x \rangle}{\langle Q_m^T \cdot x, Q_m^T \cdot x \rangle} \\ &= \sup_{\substack{V \subset \mathcal{K}_m \\ \dim V = i}} \inf_{y \in V} \frac{\langle y, H \cdot y \rangle}{\langle y, y \rangle} \quad i = 1, 2, \dots, m \end{aligned} \quad (3.85)$$

L'algorithme de Lanczos repose sur l'existence d'une base $\{q_1, q_2, \dots, q_m\}$ vérifiant en plus la très ingénieuse relation de récurrence :

$$H \cdot q_j = \beta_{j-1} \cdot q_{j-1} + \alpha_j \cdot q_j + \beta_j \cdot q_{j+1} \quad j \geq 1; \text{ et } \alpha_j, \beta_j \in \mathbb{R} \quad (3.86)$$

Les coefficients α_j, β_j sont déterminés par les relations $\alpha_j = \langle H \cdot q_j, q_j \rangle$ et $\beta_j = \langle H \cdot q_j, q_{j+1} \rangle$

L'algorithme de construction d'une telle base est la suivante :

$$\begin{aligned} \vec{q}_0 &= \vec{0} \\ \beta &= 0 \\ \text{choisir } \vec{q}_1 &\text{ tel } \|\vec{q}_1\|_2 = 1 \\ \text{POUR } j &= 1, 2, \dots, m \text{ FAIRE} \\ \vec{z}_j &= H \cdot \vec{q}_j - \beta_{j-1} \vec{q}_{j-1} \\ \alpha_j &= \langle Z_j, \vec{q}_j \rangle \\ \vec{v}_j &= \vec{z}_j - \alpha_j \cdot \vec{q}_j \\ \beta_j &= \|\vec{v}_j\|_2 \\ \vec{q}_{j+1} &= \frac{\vec{v}_j}{\beta_j} \text{ pour } \beta_j \neq 0 \\ \text{FIN POUR} \end{aligned}$$

L'interprétation de (3.86) en écriture matricielle donne :

$$\begin{aligned}
 Q_m^T \cdot H \cdot Q_m &= \boxed{Q_m^T} \times \boxed{H} \times \boxed{Q_m} \\
 &= \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & \beta_{m-1} & \alpha_m \end{pmatrix} \stackrel{\text{def}}{=} \boxed{T_m}
 \end{aligned}$$

La matrice carrée T_m est la matrice de Rayleigh tridiagonale symétrique d'ordre m , elle correspond à celle de la projection orthogonale de H sur l'espace de Krylov \mathcal{K}_m s'écrivant dans la base $\{q_1, q_2, \dots, q_m\}$. Les m éléments propres (θ_j, \vec{y}_j) avec $1 \leq j \leq m$ de la matrice T_m , c'est à dire :

$$T_m \cdot \vec{y}_j = \theta_j \cdot \vec{y}_j \quad \vec{y}_j \in \mathbb{R}^m \quad \theta_j \in \mathbb{R}$$

sont facilement calculables par la méthode $Q.R$ ou par la méthode de bisection. Les couples $(\theta_j, Q_m \cdot \vec{y}_j)$ sont appelés les éléments de Ritz de H . Ils donnent une approximation du spectre de H . En effet, on a les deux théorèmes suivants :

Théorème 3.2 *Il existe m valeurs propres $\lambda_1^m, \lambda_2^m, \dots, \lambda_m^m$ de H telles que :*

$$|\lambda_j^m - \theta_j^m| \leq \beta_m |\langle \vec{y}_j, e_m \rangle| \quad \forall j = 1, 2, \dots, m \quad (3.87)$$

où e_m est le $m^{\text{ème}}$ vecteur de la base canonique de \mathbb{R}^m

Théorème 3.3 *Les vecteurs de Rayleigh-Ritz $x_j^m \stackrel{\text{def}}{=} Q_m \cdot \vec{y}_j$, vérifient la relation suivante :*

$$\|H \cdot x_j^m - \theta_j^m \cdot x_j^m\| = \beta_m |\langle \vec{y}_j, e_m \rangle| \quad \forall j = 1, 2, \dots, m \quad (3.88)$$

Remarque

Comme $|\vec{y}_j| = 1$ et $|e_m| = 1$, alors $|\langle \vec{y}_j, e_m \rangle| \leq 1$.

Pour les démonstrations de ces deux théorèmes, on peut se référer à l'article de KAHAN et PARLETT [53]. On remarque que l'approximation des éléments de Rayleigh-Ritz et d'autant meilleure que le «résidu» β_m est petit. Le test d'arrêt de l'algorithme porte donc sur la valeur de cette quantité β_m .

Cet algorithme est bien adapté à la décomposition spectrale du Hessien de la fonction coût J à minimiser, en effet sans avoir besoin d'explicitier la matrice du Hessien H , il suffit que l'on fournisse à l'algorithme le produit $H \cdot \vec{q}$. Cependant, le grand inconvénient de la méthode de Lanczos est sa très grande instabilité. Elle est donc très affectée par les phénomènes dûs aux erreurs d'arrondi. Ceci se traduit par une perte d'orthogonalité naturelle des vecteurs $\{q_j\}$ calculés. PARLETT et SCOTT [83] (également dans [57])

ont montré que ce risque devient essentiel quand justement les quantités $\beta_m |\langle \vec{y}_j, e_m \rangle|$ sont petites. Ils proposent une modifications de la méthode en ajoutant un processus dit de «réorthogonalisation-sélective» qui consiste à réorthogonaliser les vecteurs $\{q_j\}$ de temps à autre, suivant un critère portant sur les quantités $\beta_m |\langle \vec{y}_j, e_m \rangle|$.

3.12 Expériences numériques

Les résultats de cette section sont basés uniquement sur le Hessien de la fonction coût. Nous présentons dans un premier temps la validité du produit Hessien×vecteur de la fonction coût (par un test de Taylor (voir [66]), ainsi que le test de symétrie pour des vecteurs aléatoires.

La validité du produit Hessien×vecteur est donnée par :

$$J(U + \alpha.v) = J(U) + \alpha \langle \nabla J(U), v \rangle + \frac{\alpha^2}{2} \langle H(U).v, v \rangle + O(\alpha^2)$$

et nous devons avoir pour $\mu(\alpha) = \frac{J(U + \alpha.v) - J(U) - \alpha \langle \nabla J(U), v \rangle}{\frac{1}{2}\alpha^2 \langle H(U).v, v \rangle}$,

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \mu(\alpha) = 1,$$

numériquement, on a

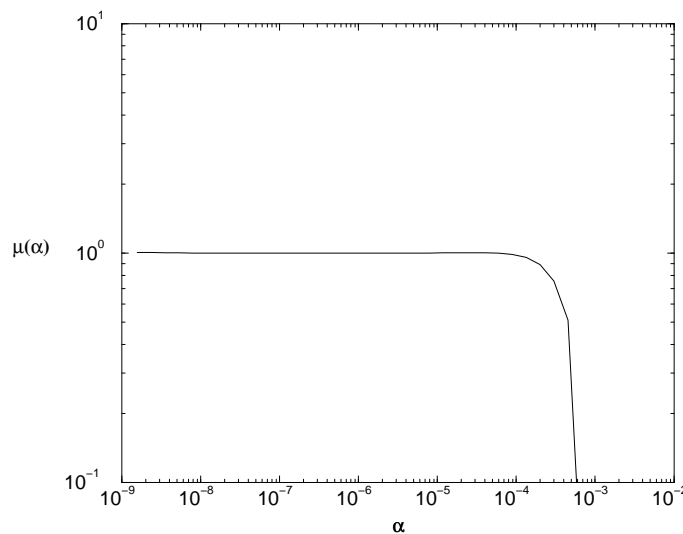


FIG. 3.16 – Précision numérique du calcul du produit Hessien×vecteur

Pour tester la symétrie du Hessien, nous avons considéré deux vecteurs aléatoires v et w .

La figure (3.16) et le tableau (3.1) ci-dessus nous permettent alors de conclure le produit Hessien×vecteur a été bien calculé et que le Hessien est également symétrique à la précision machine près.

$\langle v, H(U), w \rangle$	213.305142
$\langle v, H(U), w \rangle$	213.305087

TAB. 3.1 – Test de symétrie du Hessien

Pour étudier la variation du conditionnement du Hessien en fonction de la configuration temporelle des données, (observations), nous allons utiliser dans un premier temps, la même distribution des données à savoir des données analytiques continues, distribuées toutes les 60 secondes, 300 secondes et toutes les 720 secondes, et ensuite les données de terrain.

Il est à noter que le conditionnement de la fonction coût est calculé à l'optimum, par la méthode de Lanczos, qui nous fournit de *bonnes* approximations des valeurs propres minimale et maximale. Les résultats suivant ces différentes distributions temporelles de données sont donnés sur les figures (3.17), (3.18), (3.19), (3.20) et (3.21) ainsi que les tableaux (3.2) et (3.3).

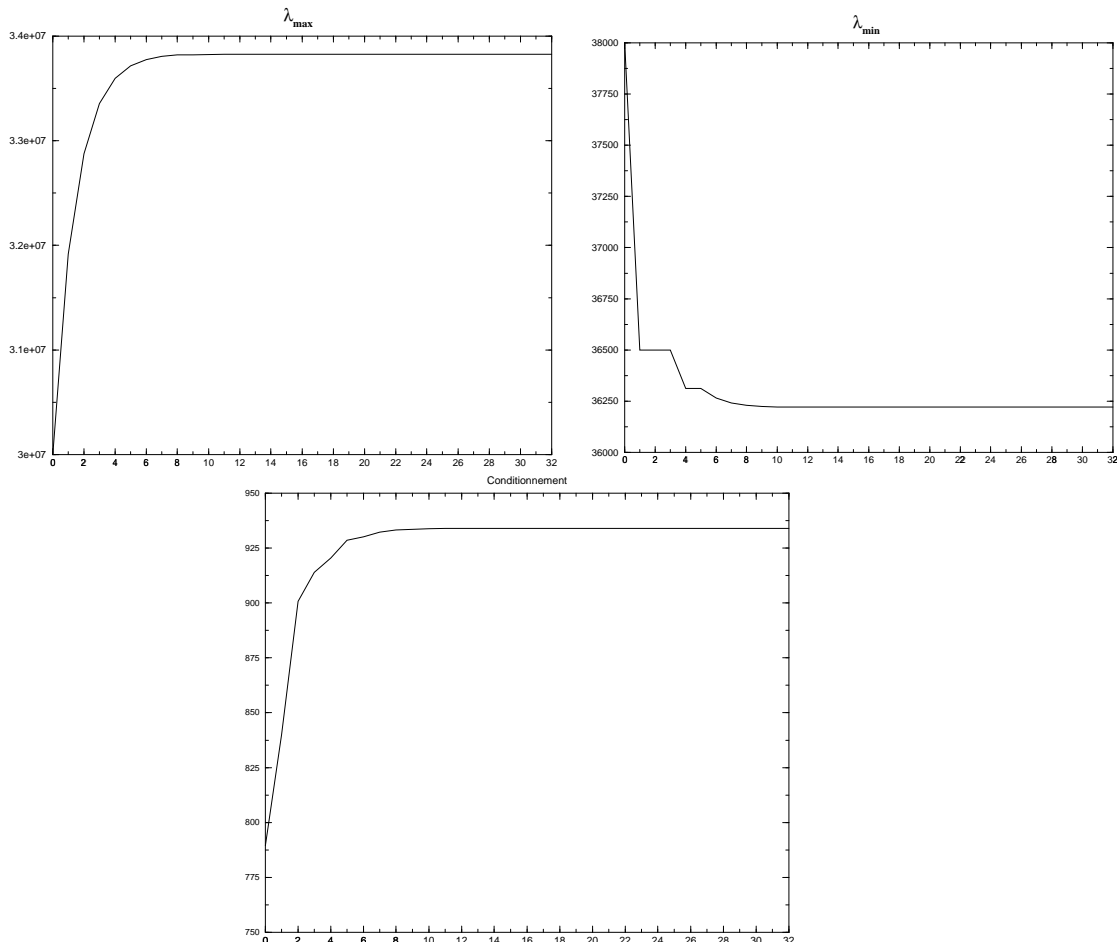


FIG. 3.17 – Variations de la valeur propre maximale (à gauche), de la valeur propre minimale (à droite) et conditionnement (dessous) suivant la distribution temporelle des observations : *toutes les données analytiques*

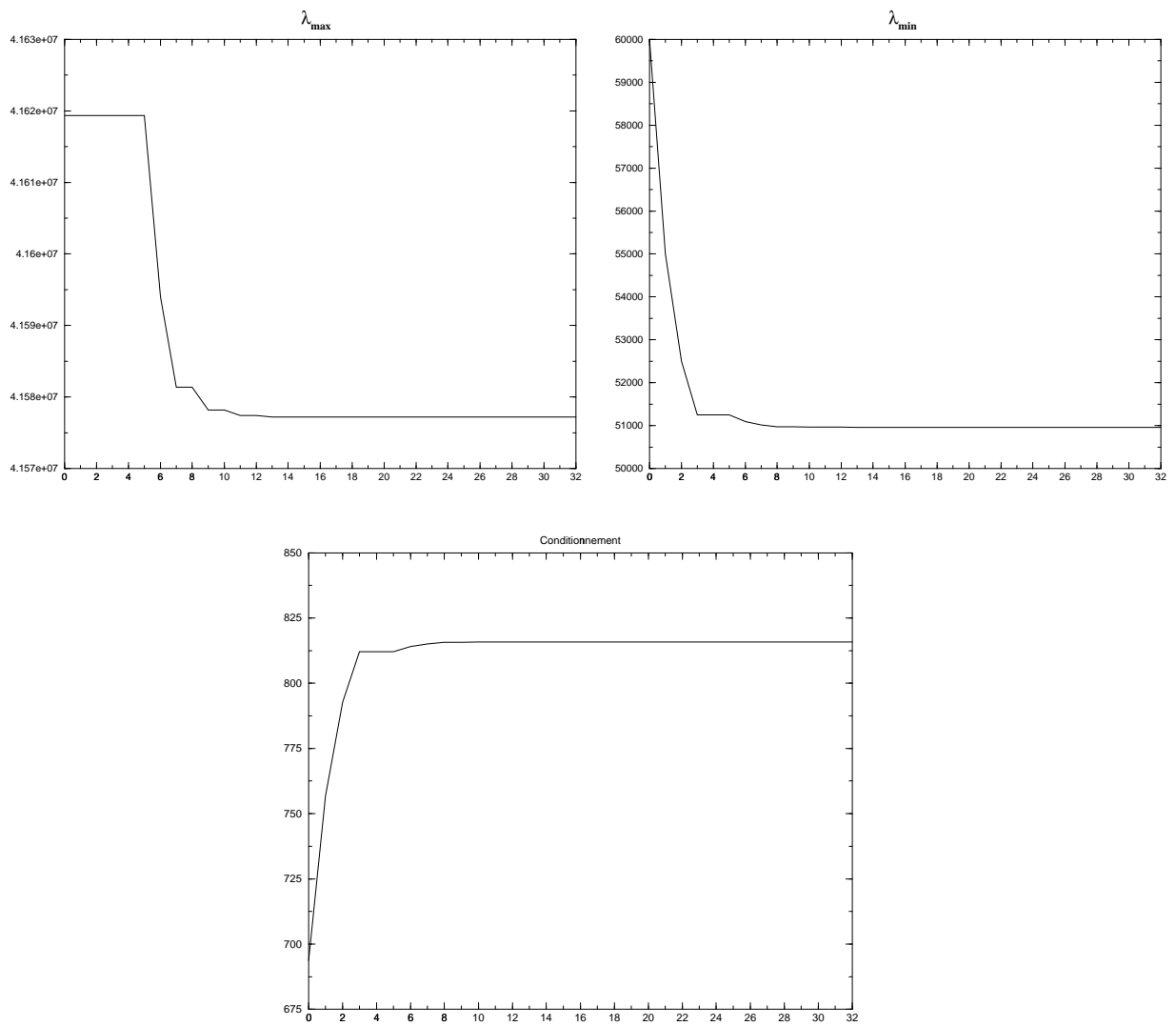


FIG. 3.18 – Variations de la valeur propre maximale (à gauche), de la valeur propre minimale (à droite) et conditionnement (dessous) suivant la distribution temporelle des observations : *données analytiques toutes les 60 secondes*

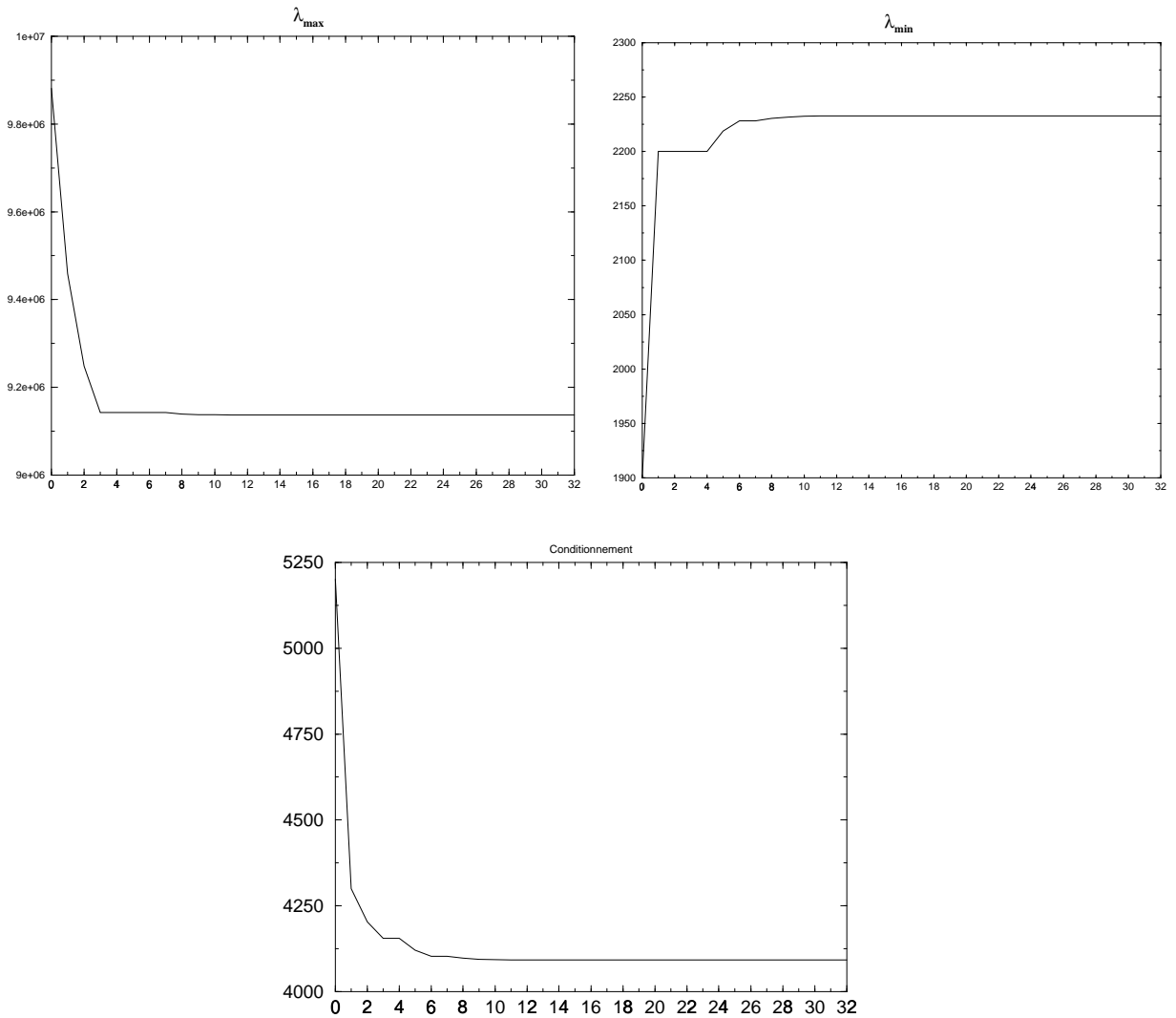


FIG. 3.19 – Variations de la valeur propre maximale (à gauche), de la valeur propre minimale (à droite) et conditionnement (dessous) suivant la distribution temporelle des observations : *données analytiques toutes les 300 secondes*

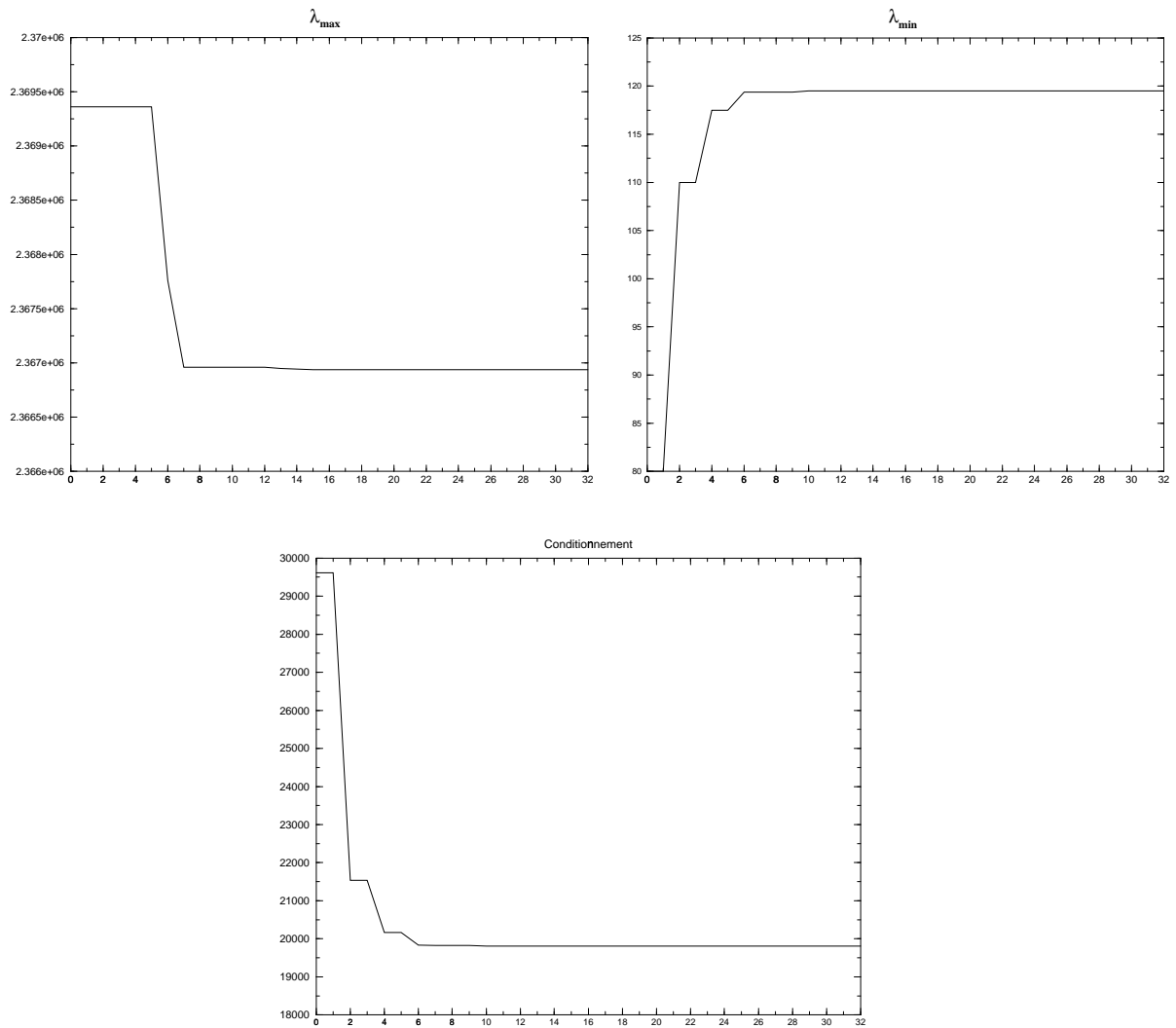


FIG. 3.20 – Variations de la valeur propre maximale (à gauche), de la valeur propre minimale (à droite) et conditionnement (dessous) suivant la distribution temporelle des observations : *données analytiques toutes les 720 secondes*

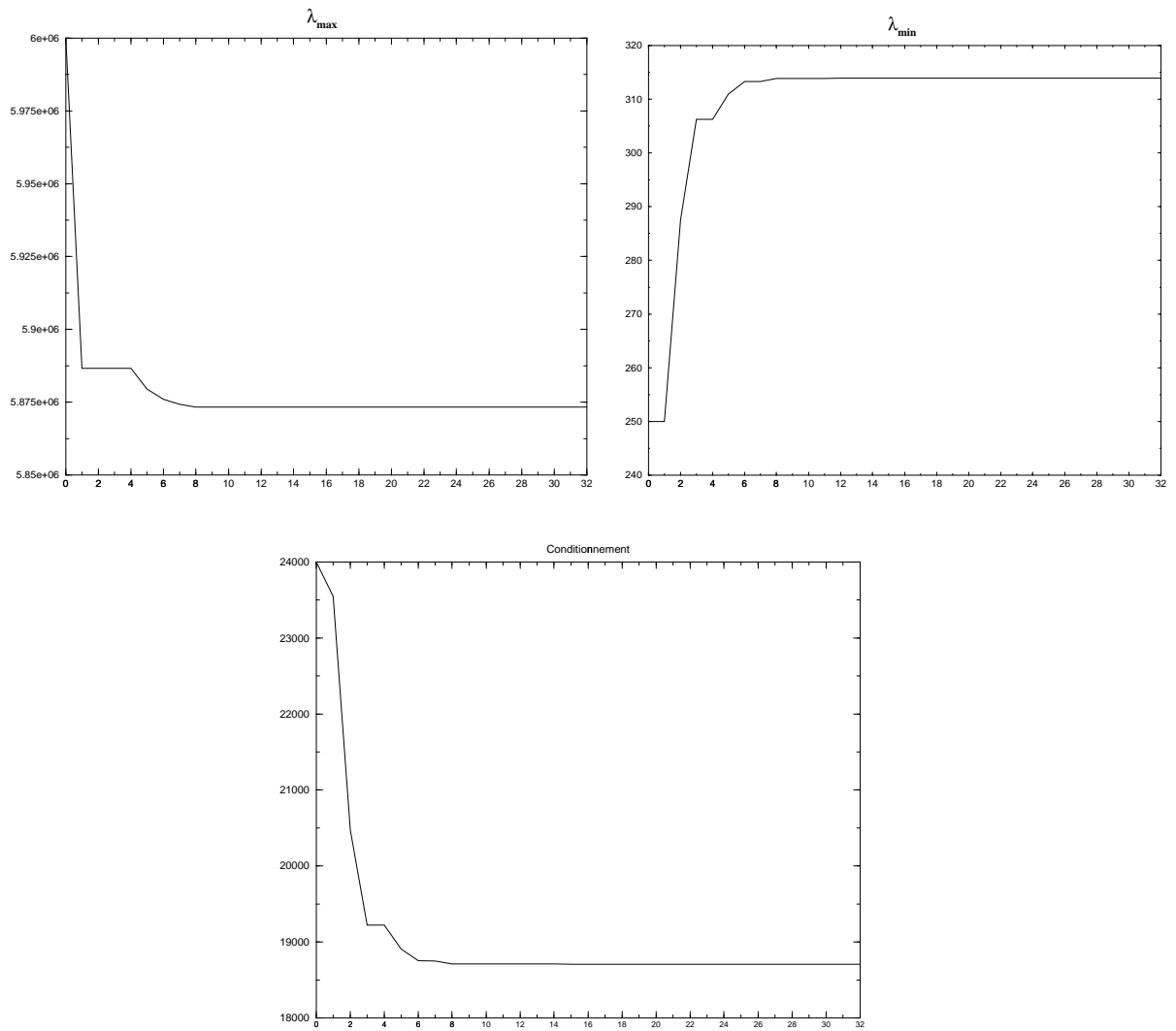


FIG. 3.21 – Variations de la valeur propre maximale (à gauche), de la valeur propre minimale (à droite) et conditionnement (dessous) suivant la distribution temporelle des observations : *données de terrain*

Observations	ΔT	$6\Delta T$	$30\Delta T$	$72\Delta T$
λ_{max}	3.3826×10^7	4.1577×10^7	9.1372×10^6	2.3669×10^7
λ_{min}	3.6221×10^4	5.0962×10^4	2.232×10^3	$1.19.5104 \times 10^2$
Cond.	9.3388×10^2	8.1583×10^2	4.0926×10^4	1.98052×10^5

TAB. 3.2 – Conditionnement du Hessien

Observations	Données de terrain
λ_{max}	$5.873304.34 \times 10^6$
λ_{min}	$3.13.909 \times 10^2$
Cond.	1.871017×10^4

TAB. 3.3 – Conditionnement du Hessien

Commentaires

Nous constatons à partir de ces résultats que la dégradation de observations affecte beaucoup plus les valeurs propres extrêmes (et donc le conditionnement) pour les données analytiques simulées. Pour les données de terrain, les résultats ne sont guère meilleurs néanmoins le conditionnement réduit d'un facteur 10^2 , est toujours d'un ordre de grandeur élevé. Ceci traduit de façon générale le mauvais conditionnement de notre problème d'identification et par ricochet explique la convergence lente de notre processus d'identification.

3.12.1 Autres expériences numériques

Pour bien comprendre les choses, nous allons procéder à une autre série de tests de calcul de valeurs propres extrêmes en se focalisant sur les données d'infiltration simulée. Pour ce faire, nous allons distribuer les données suivant des distributions temporelles différentes afin de mieux appréhender ce phénomène. Rappelons que le pas temps est de 10s et le temps de simulation choisi est de 1 heure. Nous allons distribuer les données d'infiltration (observations), suivant des fréquences différentes : toutes les 20, 30, 40, 50, 80, 90, 100, 120, 150, 180, 200, 225, 240, 250, 360, 400, 450, 600, 800, 900, 1200, 1800 secondes, ce qui correspond respectivement à 180, 120, 90, 72, 60, 45, 40, 36, 24, 20, 18, 16, 15, 14, 12, 10, 9, 8, 6, 5, 4, 5, 4, 3 et 2 observations respectivement.

Sur les figures (3.22),(3.23), (3.24), (3.25), sont représentées les différentes infiltrations cumulées (simulé et identifié) et sur les figures du graphique (3.26) les évolutions de la fonction coût ainsi que la norme de son gradient correspondant à ces différentes distributions temporelles des observations.

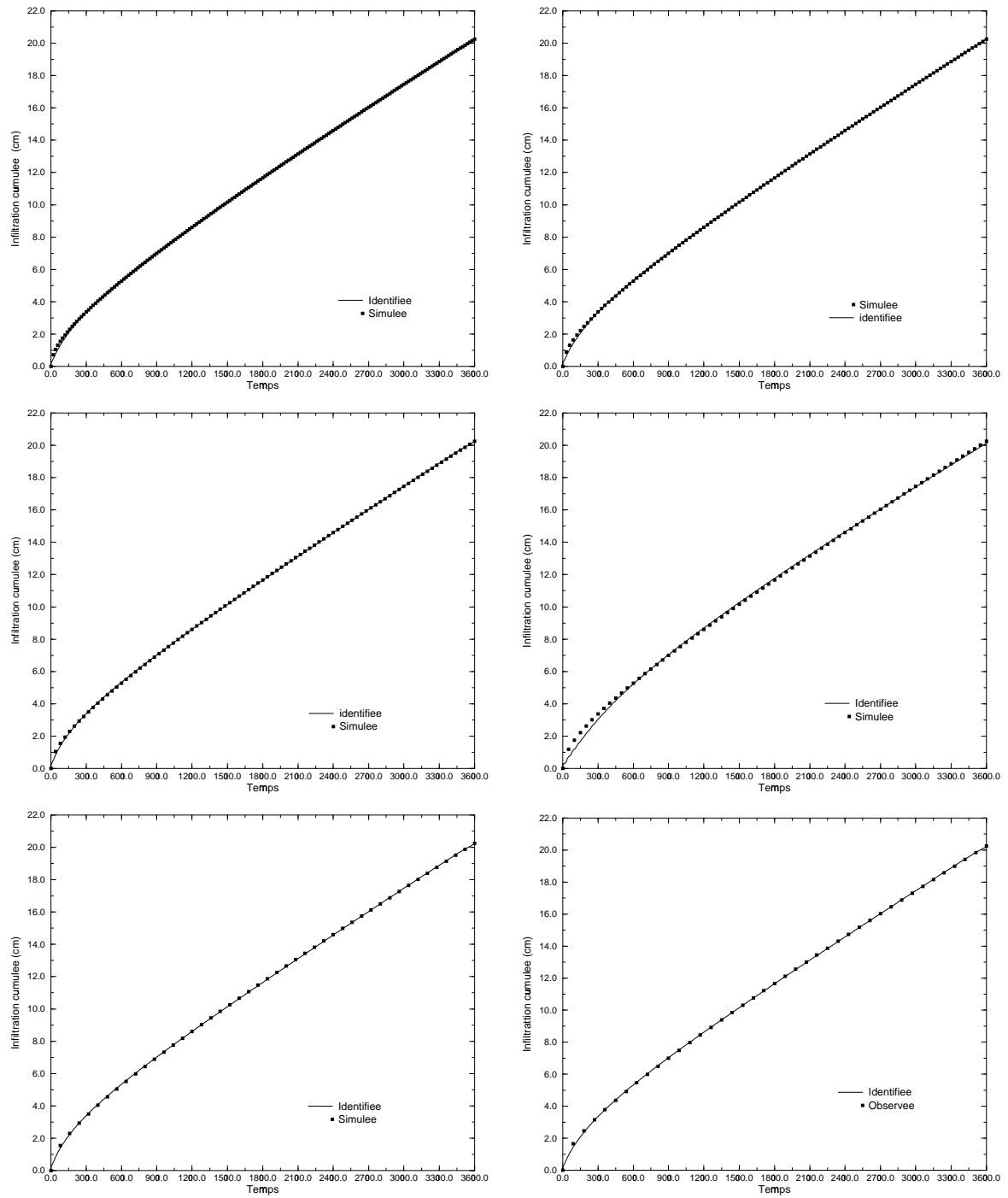


FIG. 3.22 –

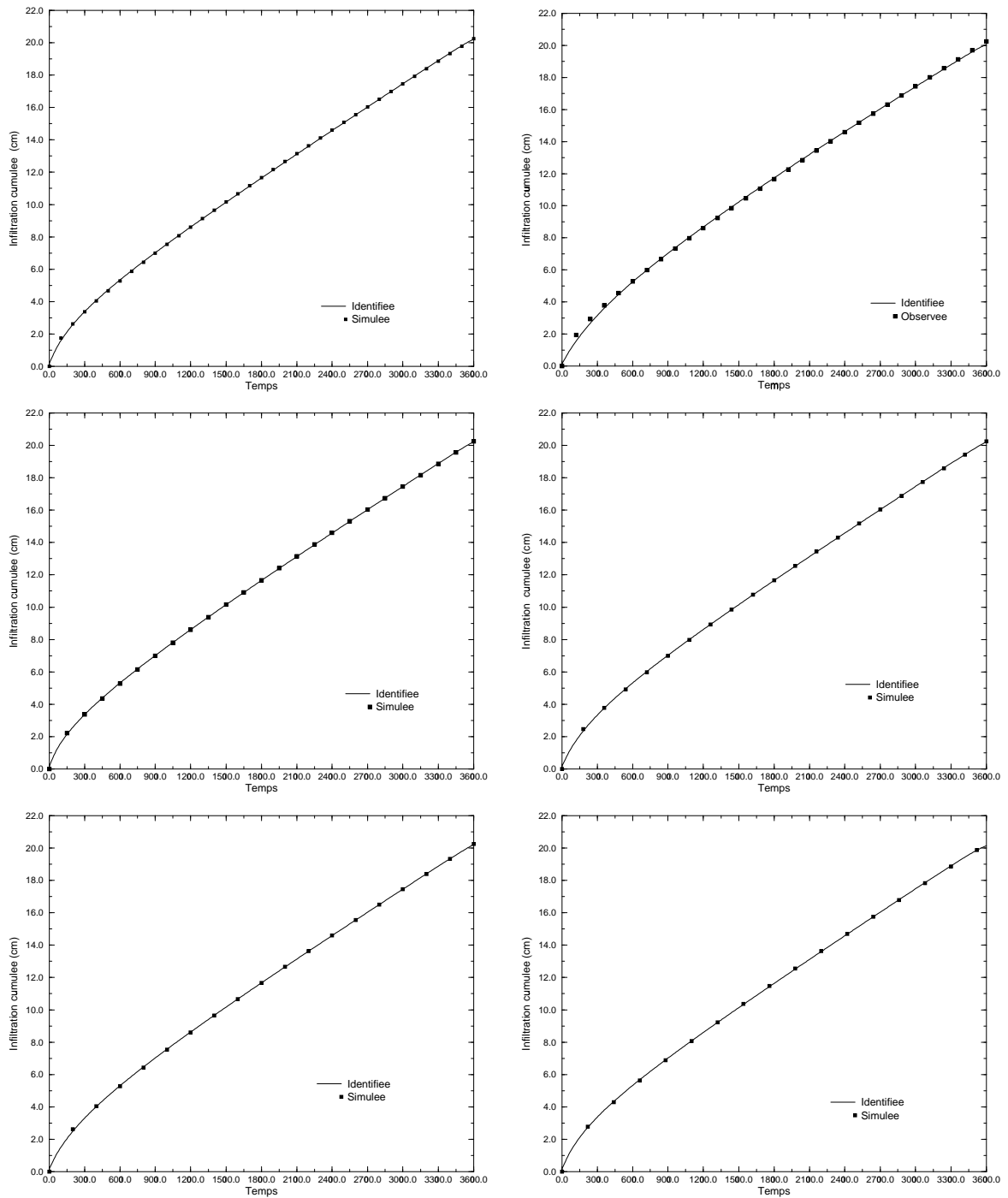


FIG. 3.23 –

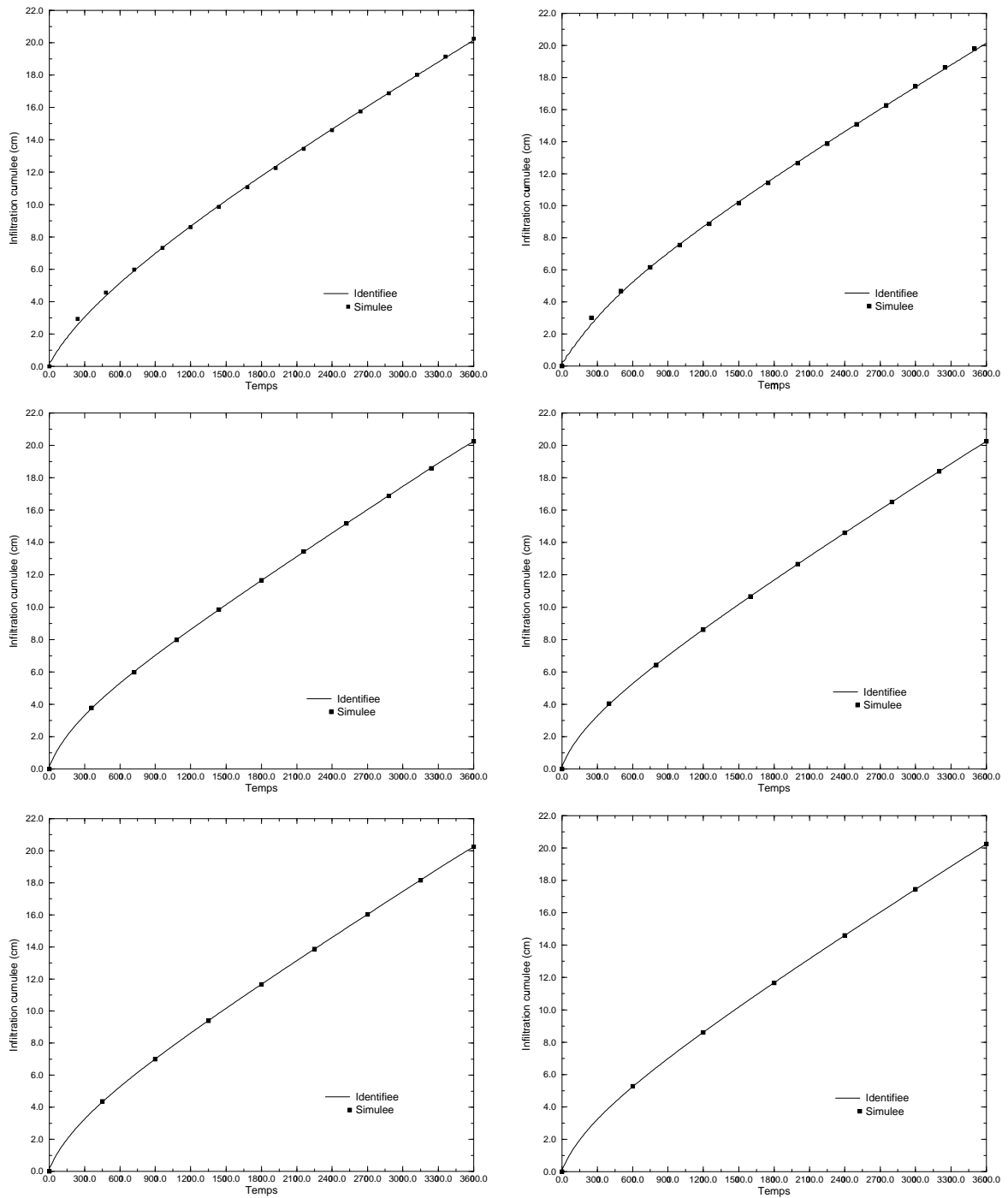


FIG. 3.24 –

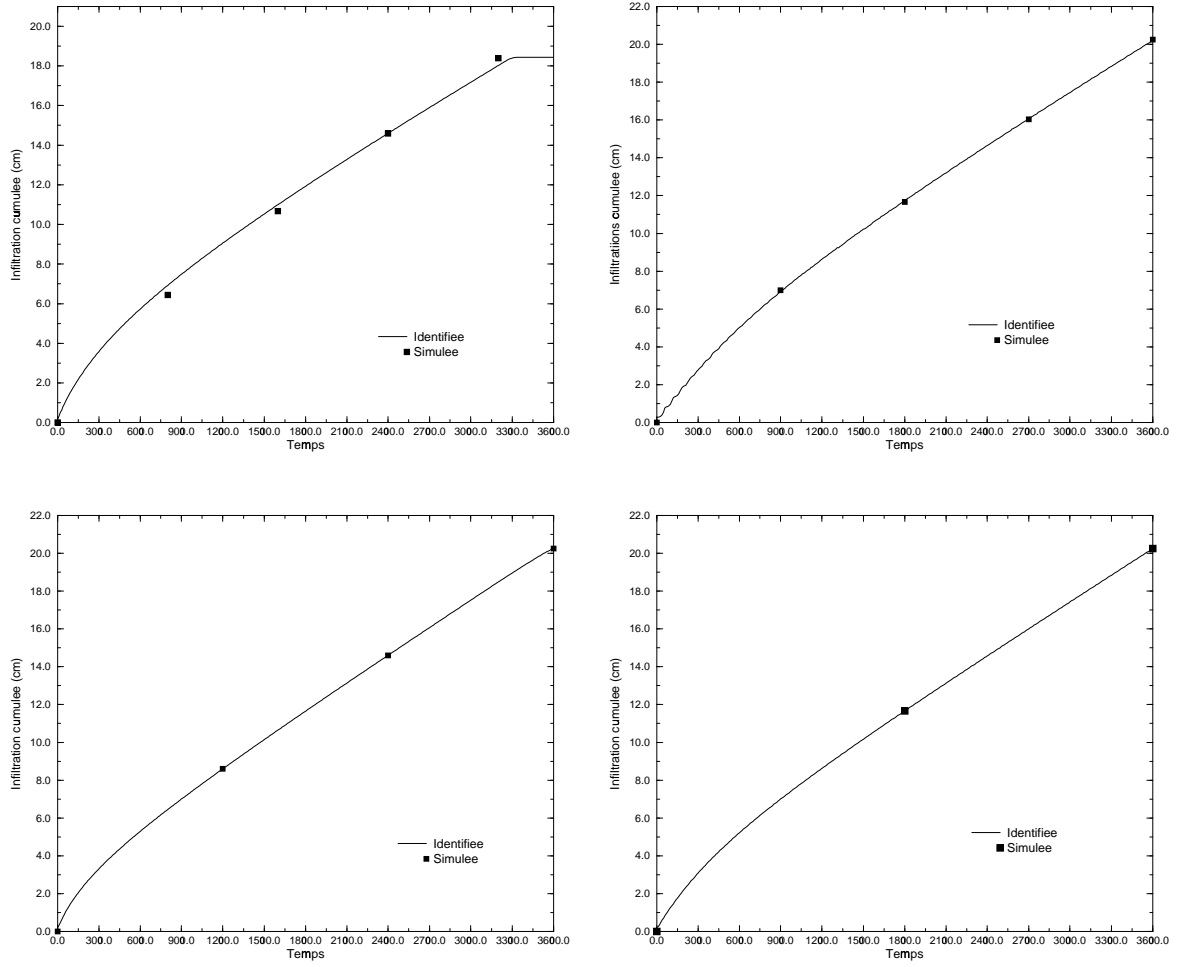


FIG. 3.25 –

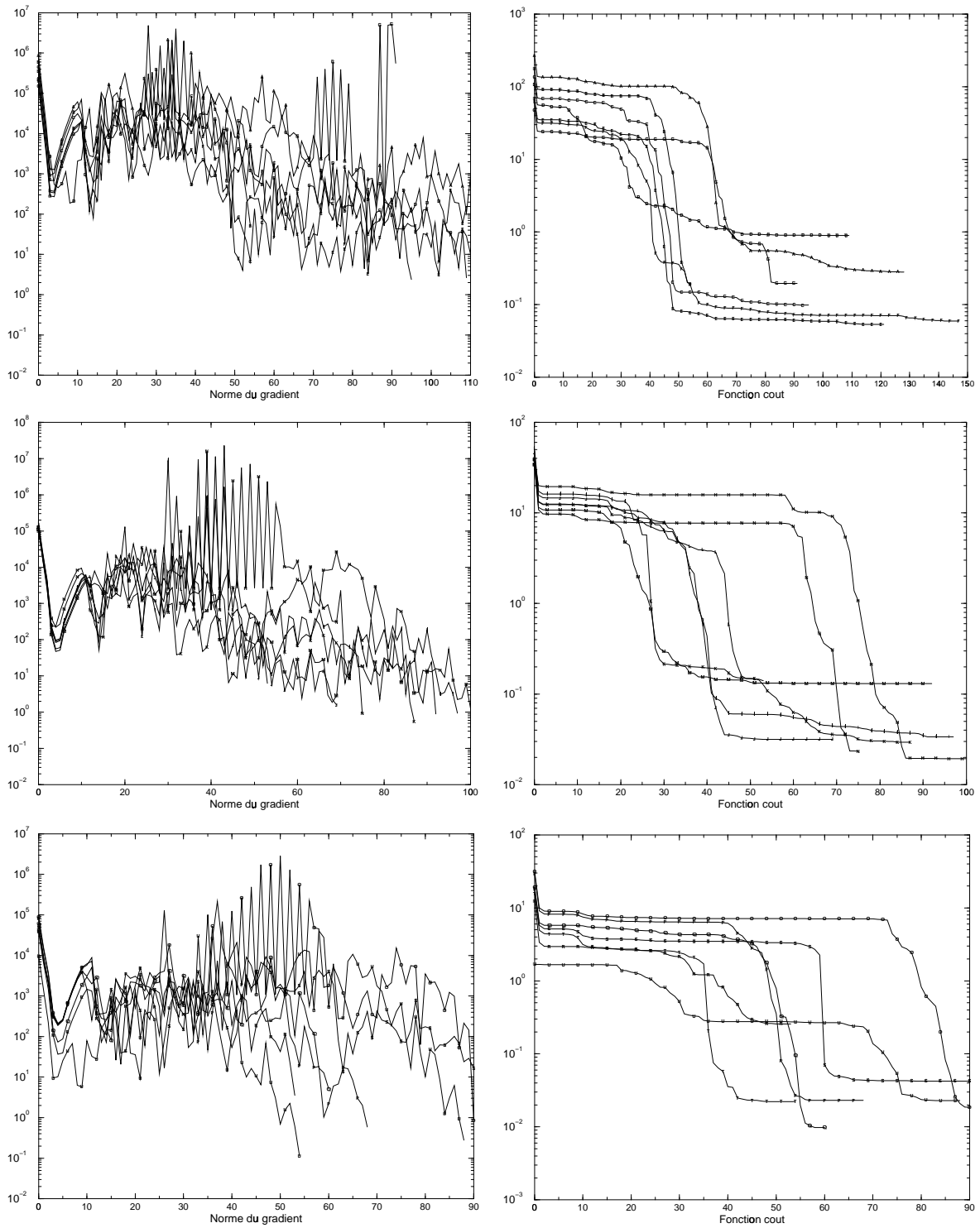


FIG. 3.26 – Fonction coût et norme du gradient lors du calcul du vecteur de paramètre optimal. Les légendes A, B, C, D, E, F, G, H, I, J, K, L, M, N, O, P, Q, R, S, T, et U correspondent respectivement aux différentes configurations des observations.

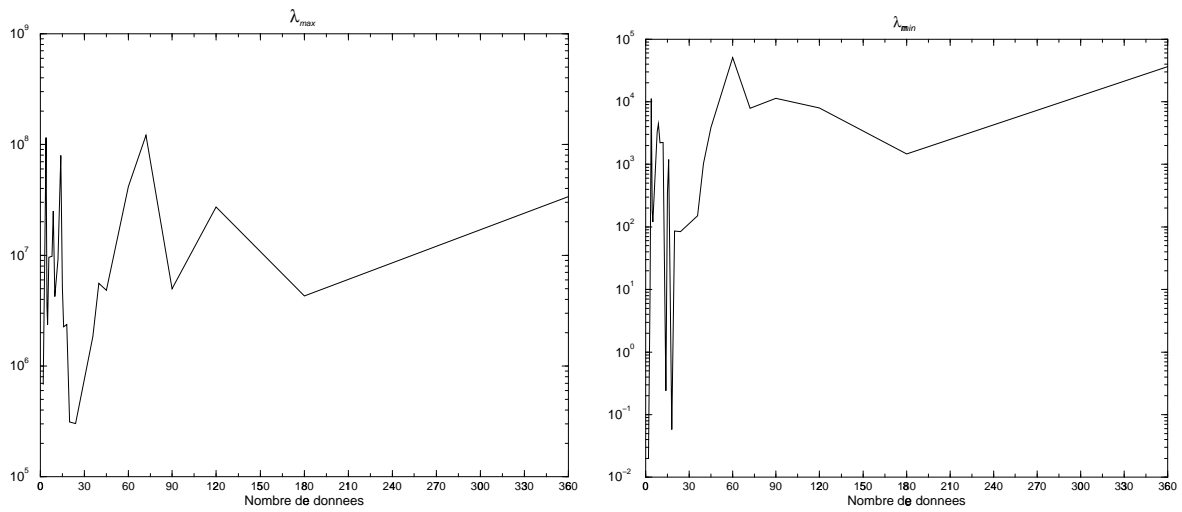


FIG. 3.27 – Variation des valeurs propres maximale (à gauche) et minimale (à droite) en fonction de la dégradation temporelle de la configuration des observations

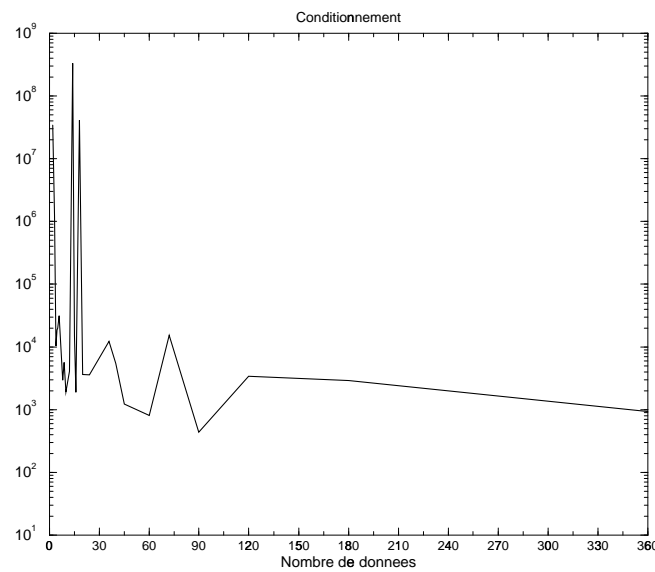


FIG. 3.28 – Variation du conditionnement en fonction de la dégradation temporelle de la configuration des observations

Commentaires

On constate sur les graphes de la figure (3.27) que le comportement des valeurs propres minimale et maximale est fortement affecté par la distribution des observations. Pour une distribution de données comprise entre 2 et 30, cette influence est fortement accentuée avec un comportement aléatoire de la variation des valeurs propres extrêmes : en deçà de 60 pour la valeur propre minimale, et en deçà de 90 pour la valeur propre maximale. On constate la croissance du comportement des valeurs propres

extrêmes. Cependant la vitesse de croissance de la valeur propre maximale λ_{max} est beaucoup plus grande que celle de la valeur propre minimale λ_{min} . En conséquence, le conditionnement du Hessien (d'après le graphe (3.28)) est décroissant au delà d'une distribution de 90 observations. Cette décroissance suit asymptotiquement la valeur 10^3 . Ceci explique sans doute le mauvais conditionnement de notre problème de minimisation (existence de fortes non-linéarités) et justifie la nécessité du nombre élevé d'itérations indispensable suivant les configurations temporelle des données, pour atteindre le minimum.

On a un conditionnement minimum $\kappa(H) = 439.13015$ correspondant à une distribution comportant 90 observations soit une observation toutes les 40 secondes. On conclut qu'il est indispensable de favoriser la densité temporelle des données, même si en pratique, les mesures *in situ* ne sont pas faciles à réaliser pendant toute la durée de l'expérience.

3.13 Conclusion et perspectives

Le calcul de la sensibilité selon la méthode décrite dans ce chapitre nécessite la résolution du système d'optimalité qui se fait par des algorithmes de minimisation de type *méthodes de descente*. Les propriétés de la fonction coût ont ici toute leur importance dans la convergence plus ou moins rapide de la minimisation. Une autre partie de cette importance est attribuée à la connaissance d'un bon point de départ (*first guess*). Mais la connaissance de l'optimum est toujours approximative par le biais des critères d'arrêt de la minimisation, principalement le nombre d'itérations et la norme du gradient de la fonction coût lorsqu'elle devient petite.

Ensuite, la résolution du système adjoint au second ordre permet de mettre à jour le produit $H.v$ et d'utiliser le résultat de $Q_2(0)$ pour entamer le calcul de la sensibilité v^* par rapport aux observations par minimisation de la fonctionnelle (3.49) définie à la page 89 qui suppose le stockage des états direct et adjoint. Le coût mémoire d'évaluation de la sensibilité en utilisant les équations adjointes au second est de deux fois le coût d'évaluation de la sensibilité (notamment par rapport aux observations, celles-ci n'apparaissant que dans le système d'optimalité) en se limitant simplement aux équations adjointes au premier ordre [81]. Disposant du Hessien (produit Hessien \times vecteur), nous avons également étudié le conditionnement de notre problème d'identification par rapport à la distribution temporelle des observations

L'amélioration de ces résultats passe nécessairement par les voies ci-dessous :

- Prise en compte des différentes «fortes» non-linéarités : modèle et fonction coût. Ceci pourrait se faire par d'autres type d'algorithmes de minimisation : par exemple «Newton global» ou des algorithmes type probabiliste (recuit simulé).
- Etudes plus approfondies du schéma numérique utilisé pour discrétiser le modèle direct.
- Disposer d'un nombre suffisant d'observations
- Préconditionner le problème afin d'espérer une diminution considérable du conditionnement du Hessien de la fonction coût et par conséquent, l'amélioration de l'algorithme de minimisation.

L'assimilation de données pour une observation fixée est une approche permettant de caractériser une bonne approximation des paramètres hydrodynamiques dans un modèle d'écoulement en zone non-saturée.

Pour une étude *a posteriori*, l'analyse au second ordre est un outil d'une importance fondamentale dans des problèmes d'assimilation variationnelle de données.

Chapitre 4

Un générateur automatique de codes

Plan du chapitre

4.1	Introduction	132
4.2	Calcul des dérivées	133
4.2.1	Différences finies	133
4.2.2	Méthode de la variable complexe	133
4.2.3	Linéarisation de l'équation d'état	134
4.2.4	Méthode de l'état adjoint	134
4.2.5	Méthode adjointe et multiplicateurs de Lagrange	135
4.2.6	Différentiation automatique des fonctions représentées par des programmes	135
4.3	Détermination pratique du système adjoint	136
4.3.1	Système adjoint au second ordre	140
4.4	Dérivation automatique des codes adjoints : Utilisation d'Odyssee	141
4.4.1	Quelques définitions	141
4.4.2	Généralités	141
4.4.3	Présentation d'Odyssee	141
4.4.4	Fonctionnalités d'Odyssee	142
4.5	Assimilation de données et différentiation automatique	142
4.5.1	Modèle adjoint : (Odyssee)	143
4.5.2	Utilisation d'Odyssee	144
4.5.3	Adjoint au second ordre : Odyssee	145
4.6	Résultats numériques	147
4.6.1	Validation des codes générés de façon automatique	147
4.6.2	Identification	149
4.6.3	Analyse de sensibilité	155
4.7	Conclusion	163

4.1 Introduction

La différentiation automatique est un ensemble de méthodes permettant de générer de manière automatique un programme calculant les dérivées d'une fonction à partir d'un programme calculant la fonction elle-même. Nous avons vu dans les chapitres précédents que le problème inverse (problèmes d'identification chapitre 2) consistait à retrouver les paramètres hydrodynamiques à partir des mesures expérimentales. L'approche utilisée pour la résolution de ce problème fut la méthode classique des moindres carrés : minimisation des écarts entre la solution du modèle direct et les observations. Le code d'optimisation de la fonctionnelle coût réclame alors l'écriture de deux procédures qui dépendent du problème : l'une résout le problème direct et calcule la fonction coût et l'autre calcule le gradient de la fonction coût. Pour l'analyse de sensibilité, nous constatons également qu'il est indispensable de disposer des équations adjointes au second ordre et cela nécessite le calcul des dérivées secondes au travers de l'adjoint au second ordre.

Le calcul des dérivées pourrait être effectué en utilisant les différences finies classiques en faisant légèrement évoluer les paramètres un par un. Cette approche est très coûteuse en temps de calcul, surtout lorsque le nombre de paramètres de contrôle est élevé. En plus, cette approche donne seulement une approximation du gradient et ne permet donc pas une optimisation très précise. De plus, il est très difficile de choisir le pas dans la formule des différences finies.

C'est pour cette raison que nous avons opté pour un calcul exact du gradient et du Hessien de la fonction coût. Cette approche est la plus efficace que ce soit en temps de calcul (indépendant du nombre de paramètres) ou pour l'optimisation. En revanche, elle est fastidieuse, difficile à mettre au point et propice à de nombreuses erreurs de programmation. De plus, une fois la méthode mise en œuvre pour un modèle, si une modification doit être apportée au schéma numérique, tout est à recommencer.

Deux situations peuvent être envisagées :

- Ou bien le code direct existe déjà. Ce cas est très fréquent lorsque de grands codes sont développés depuis plusieurs années. Alors le gradient et les dérivées d'ordre supérieur peuvent être directement calculés à partir de la procédure Fortran de la simulation en utilisant par exemple `Odyssée` [33] ou `Adifor` [3].
- Ou bien la simulation n'existe pas ou peut être réécrite. On utilise alors le calcul formel pour automatiser le calcul du gradient et des dérivées d'ordre supérieur [63, 52].

Après avoir brièvement rappelé le principe de la différentiation automatique des fonctions représentées par des programmes en suivant la démarche décrite dans [39, 31], nous expliquerons comment avec `Odyssée`, le générateur automatique de codes, nous pouvons à partir du modèle direct obtenir le gradient de la fonction coût (et donc reprendre les optimisations du chapitre 2), ensuite extraire les dérivées secondes (reprendre l'analyse de sensibilité du chapitre 3).

4.2 Calcul des dérivées

Nous rappelons tout d'abord les différentes façon pour évaluer la dérivée d'une fonction coût J par rapport aux paramètres de contrôle $x \in \mathbb{R}^n$, dans le cas où $J(x, U(x))$ dépend de x via la fonction $U(x)$ qui est la solution d'une équation aux dérivées partielles. Nous supposons que l'équation d'état est définie par :

$$J(x, U(x)) \text{ où } x \longrightarrow U(x) \text{ est défini par l'équation } E(x, U(x)) = 0$$

4.2.1 Différences finies

La méthode classique et très couramment utilisée est la méthode des différences finies. Dans ce cas, on a besoin de plusieurs évaluations de la fonction coût sans avoir besoin d'écrire de codes supplémentaires. La formule est donnée par :

$$\frac{dJ}{dx_i} \approx \frac{[J(\vec{x} + \varepsilon_i \vec{e}_i, U(\vec{x} + \varepsilon_i \vec{e}_i)) - J(\vec{x}, U(\vec{x}))]}{\varepsilon_i}$$

Cette approximation est justifiée lorsque les termes du second ordre du développement de Taylor sont négligeables, donc au voisinage de $\varepsilon_i = 0$. Cependant, on fait face aux difficultés suivantes :

- . Le choix de ε_i : plusieurs valeurs de ε_i doivent être testées.
- . Le coût du calcul proportionnel à la taille du paramètre de contrôle.

4.2.2 Méthode de la variable complexe

Pour éviter le choix critique pour ε mais aussi pour éviter les erreurs dues à la soustraction présente dans les différences finies, on peut utiliser la méthode de la variable complexe [92]. En effet, comme J est à valeurs réelles, on a :

$$\frac{dJ}{dx_i} = \frac{\Re[J(x_i + \mathbf{i}\varepsilon, U(x_i + \mathbf{i}\varepsilon))]}{\varepsilon} + o(\varepsilon),$$

$$J(x_i + \mathbf{i}\varepsilon, U(x_i + \mathbf{i}\varepsilon)) = J(x, U(x)) + \mathbf{i}\varepsilon \frac{dJ}{dx} - \frac{\varepsilon^2}{2} \frac{d^2J}{dx^2} - \mathbf{i} \frac{\varepsilon^3}{6} \frac{d^3J}{dx^3} + o(\varepsilon^3),$$

où $x_i + \mathbf{i}\varepsilon$ signifie ajouter à la i ème composante du paramètre de contrôle l'incrément $\varepsilon\sqrt{-1}$. On peut observer ainsi qu'il n'y a plus de soustraction et que le choix de ε est moins critique.

De même, la dérivée seconde est donnée par :

$$\frac{d^2J}{dx^2} = -2 \frac{\Re[J(x_i + \mathbf{i}\varepsilon, U(x_i + \mathbf{i}\varepsilon)) - J(x, U(x))]}{\varepsilon^2} + o(\varepsilon^2).$$

Malheureusement, ici, la soustraction apparaît de nouveau, mais est cependant moins significative que dans la formule de différences finies centrées

$$\frac{d^2J}{dx^2} = \frac{[J(x + \varepsilon) - 2J(x) + J(x - \varepsilon)]}{\varepsilon^2}.$$

En pratique, cette méthode requiert simplement la redéfinition de toutes les variables de contrôle réelles du programme dans la boucle correspondante comme étant des variables complexes.

Par ailleurs, la complexité de cette approche est comparable à la méthode de différences finies d'ordre 2, la complexité étant de ce fait proportionnelle au nombre de variables du paramètre de contrôle.

4.2.3 Linéarisation de l'équation d'état

Pour réduire l'influence de ε , une approche utilisée dans le calcul variationnel, est de calculer avec les différences finies uniquement les dérivées partielles.

Ainsi, si on note $\delta x = \varepsilon \vec{e}_i$ et par δU la variation de U (i.e. $\delta U = \delta x_i \partial_{x_i} U$). Par linéarisation de $E(x, U(x)) = 0$, on a :

$$\frac{\partial E}{\partial U} \delta U = -\frac{\partial E}{\partial x} \delta x \approx -[E(x + \varepsilon \vec{e}_i, U(x)) - E(x, U(x))]. \quad (4.1)$$

Après substitution, on obtient :

$$\frac{dJ}{dx} = \frac{\partial J}{\partial x} + \frac{\partial J}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial x}, \quad (4.2)$$

où les dérivées partielles sont calculées par différences finies, mais $\frac{\partial U}{\partial x}$ est calculé en résolvant l'équation (4.1). Cependant, le coût du calcul reste proportionnel à la taille du paramètre de contrôle.

4.2.4 Méthode de l'état adjoint

Dans l'expression (4.2) de la méthode de linéarisation, on a :

$$\frac{dJ}{dx} = \frac{\partial J}{\partial x} - \frac{\partial J}{\partial U} \left[\left(\frac{\partial E}{\partial U} \right)^{-1} \frac{\partial E}{\partial x} \right] = \frac{\partial J}{\partial x} - \left[\frac{\partial J}{\partial U} \left(\frac{\partial E}{\partial U} \right)^{-1} \right] \frac{\partial E}{\partial x}.$$

Dans cette expression, on a simplement trois termes qui apparaissent dans la dérivée de la fonction coût. Ainsi, on peut introduire une nouvelle variable P (variable adjointe), définie par :

$$P^T \left(\frac{\partial E}{\partial U} \right) = \frac{\partial J}{\partial U}, \quad (4.3)$$

qui permet alors de calculer le gradient de la fonction coût indépendamment de la taille du paramètre de contrôle, il suffit pour cela, de résoudre l'équation (4.3). Le gradient de la fonction coût est donné par :

$$\frac{dJ}{dx} = \frac{\partial J}{\partial x} - P^T \frac{\partial E}{\partial x}.$$

4.2.5 Méthode adjointe et multiplicateurs de Lagrange

En introduisant le Lagrangien $L = J + P^T E$, et en écrivant la relation fondamentale liant le Lagrangien et le gradient de la fonction coût par rapport aux paramètres de contrôle U, P, x (supposés indépendants). On obtient la condition d'optimalité à l'optimum donnée par l'équation adjointe P :

$$\frac{\partial L}{\partial U} = \frac{\partial J}{\partial U} + P^T \left(\frac{\partial E}{\partial U} \right) = 0, \quad (4.4)$$

et le gradient de J

$$\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{\partial J}{\partial x} = \frac{\partial J}{\partial x} + P^T \left(\frac{\partial E}{\partial x} \right). \quad (4.5)$$

On constate, que le coût est proportionnel à la taille de la variable d'état et (à moindre coût) à la taille du paramètre de contrôle, en effet après une résolution de l'équation d'état et une résolution de l'équation adjointe, il reste à évaluer la quantité $\frac{\partial E}{\partial x}$ de (4.5). Ceci peut se faire facilement en utilisant les différences finies, ou en utilisant la différentiation automatique en mode direct ou en mode inverse [71, 67].

En pratique, la bonne approche consiste à construire une approximation des équations d'état et de la fonction coût J , à définir un Lagrangien discret et des équations adjointes discrètes et à calculer un gradient discret. Le gradient ainsi obtenu est exact pour le problème approché qui est effectivement résolu. Cette méthode de l'état adjoint est étroitement liée au mode inverse de la différentiation automatique [41, 39].

4.2.6 Différentiation automatique des fonctions représentées par des programmes

Le mode direct (*forward*)

Les principales approches, selon lesquelles une fonction représentée par un programme peut être différenciée se font en dérivant chaque ligne du programme. Ainsi, les méthodes de différentiation automatique diffèrent surtout selon l'approche de l'implémentation de cette idée. Une revue complète de ces approches est fournie dans [39]. Nous l'expliquerons à la section 4.3 sur un exemple.

Le mode inverse (*adjoint*)

Cette méthode s'apparente au calcul du gradient par la méthode de l'état adjoint dans les problèmes de contrôle optimal. Elle est moins intuitive que le mode direct et plusieurs implémentations existent suivant la formulation du modèle [31, 39].

4.3 Détermination pratique du système adjoint

Nous présentons ici une méthode pour dériver l'adjoint et calculer le gradient de la fonction coût pour un modèle complètement discrétisé. Cette méthode est proche du langage de programmation et est très utile pour comprendre comment s'implémentent les codes correspondants au système adjoint de façon automatique [101, 39].

Système direct

Nous appliquons ici les techniques décrites précédemment pour un modèle discrétisé selon un schéma aux différences finies et intégré temporellement par la méthode d'Euler. Afin de simplifier l'écriture, nous supposons que l'on contrôle le système par rapport à la condition initiale uniquement.

Nous supposons que l'état pendant l'intervalle de temps $[0, T]$ est régi par l'équation d'évolution :

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = F(X); \\ X|_{t=0} = u. \end{cases}$$

Soit X_i l'état discret à l'instant $t_i = t_0 + \Delta t$ pour $i \in \{0, \dots, T\}$. La forme discrétisée avec le schéma d'Euler correspondante est

$$\begin{cases} X_0 = u, \\ X_1 = X_0 + \Delta t \cdot F(X_0), \\ \vdots \\ X_t = X_{t-1} + \Delta t \cdot F(X_{t-1}), \\ \vdots \\ X_T = X_{T-1} + \Delta t \cdot F(X_{T-1}). \end{cases}$$

Chaque ligne du système ci-dessus est une opération qui peut être non-linéaire et qui sera codée sous forme de boucle DO effectuant un parcours sur les composantes de la variable X_i .

Système linéaire tangent

Nous avons montré dans les chapitres précédents que le système linéaire tangent est défini par :

$$\begin{cases} \frac{d\widehat{X}}{dt} = \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right] \widehat{X}, \\ \widehat{X}(0) = h_u. \end{cases}$$

La forme discrétisée correspondante est :

$$\left\{ \begin{array}{l} \widehat{X}_0 = h_u, \\ \widehat{X}_1 = \widehat{X}_0 + \Delta t. \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X_0) \right] \widehat{X}_0, \\ \vdots \\ \widehat{X}_t = \widehat{X}_{t-1} + \Delta t. \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X_{t-1}) \right] \widehat{X}_{t-1}, \\ \vdots \\ \widehat{X}_k = \widehat{X}_{k-1} + \Delta t. \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X_{k-1}) \right] \widehat{X}_{k-1}. \end{array} \right.$$

Système adjoint

Nous avons vu que le système adjoint s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dP}{dt} + \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X) \right]^T .P = C^T (X - X_{obs}), \\ P(T) = 0 \end{array} \right.$$

sous forme discrète, cela peut s'écrire :

$$\left\{ \begin{array}{l} P_k = C_k, \\ P_{k-1} = P_k + \Delta t. \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X_{k-1}) \right]^T P_{k-1} + C_{k-1}, \\ \vdots \\ P_{t-1} = P_t + \Delta t. \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X_{t-1}) \right]^T P_t + C_{t-1}, \\ \vdots \\ P_0 = P_1 + \Delta t. \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X_0) \right]^T P_1 + C_0. \end{array} \right.$$

Remarque 4.1 *Le modèle adjoint discret ci-dessus et lié au schéma de discrétisation temporelle du modèle direct. Si on avait choisit un autre schéma de discrétisation (Leap-Frog par exemple) du modèle direct le modèle adjoint discret n'aurait pas la même formulation.*

Écriture du code adjoint

En fait, on peut obtenir le code du système adjoint simplement, en effet l'adjoint d'une fonction composée n'est autre que la transposition des adjoints des étapes élémentaires prises dans l'ordre inverse [101, 39]. Cette méthode peut donc se résumer en trois étapes :

1. Dériver les instructions.
2. Inverser l'ordre des instructions, en termes mathématiques, cela correspond à la transposition par rapport au temps.

3. Transposer chaque instruction.

Inverser l'ordre des instructions

Dans le cas d'une séquence d'instructions arithmétiques, inverser l'ordre est simple. Cette opération peut être plus compliquée dans le cas de boucles ou de tests.

Une boucle peut être écrite sous forme déroulée, c'est-à-dire que l'on peut écrire n fois la séquence d'instruction contenue dans la boucle. On peut alors inverser l'ordre des instructions et on constate que cela revient à inverser l'ordre des instructions dans la boucle et à effectuer la boucle dans le sens inverse. Par exemple, la boucle :

```
Do i=1,3
  Instruction1(i)
  Instruction2(i)
ENDDO
```

devient :

```
Instruction1(1)
Instruction2(1)
Instruction1(2)
Instruction2(2)
Instruction1(3)
Instruction2(3)
```

En inversant l'ordre des instructions, on obtient :

```
Instruction2(3)
Instruction1(3)
Instruction2(2)
Instruction1(2)
Instruction2(1)
Instruction1(1)
```

Ce qui revient à :

```
Do i=3,1,-1
  Instruction2(i)
  Instruction1(i)
ENDDO
```

Une instruction de test représente une alternative entre deux séquences possibles. Si l'on garde une trace du chemin suivi à l'exécution du code direct, inverser l'ordre des instructions n'est pas une difficulté. Donc pour coder le système adjoint, il faut «se rappeler» du chemin suivi lors de l'exécution du système direct, c'est-à-dire conserver toutes les valeurs ayant servi à faire des choix et refaire les mêmes choix dans le code. Par exemple, si le code linéarisé s'écrit :

```

IF (a.gt. b) THEN
  Instruction1
  Instruction2
ELSE
  Instruction3
  Instruction4
ENDIF

```

Si à l'exécution on a $a > b$, on exécutera :

```

Instruction1
Instruction2

```

ce qui donne le code adjoint :

```

Instruction2
Instruction1

```

et qui revient à :

```

IF (a.gt. b) THEN
  Instruction2
  Instruction1
ELSE
  Instruction3
  Instruction4
ENDIF

```

où a et b sont les **valeurs** de a et b obtenues lors de l'exécution du **code direct**.

Transposer une instruction élémentaire

Les instructions de calcul d'un code sont toujours de la forme : une variable reçoit une valeur dépendant de n variables, cette opération est notée par un signe = mais c'est en fait une instruction d'affectation dont les arguments sont toutes les variables qui apparaissent dans le terme de droite. La transposée d'une application de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R} étant une application de \mathbb{R} dans \mathbb{R}^n , la transposée de cette instruction sera composée de n instructions. Par exemple, l'instruction :

$$a = b * c$$

est linéarisée dans une première étape, elle devient (avec pour convention que l'on garde le nom des variables du système direct pour désigner leurs dérivées et que l'on nomme $z*$ la variable $*$ du système direct) :

$$a = b * zc + zb * c$$

L'ordre des instructions est ensuite inversé, puis on transpose cette instruction, ce qui donne l'instruction Fortran suivante :

$$\begin{aligned}q &= q + p * zc \\r &= r + p * zb\end{aligned}$$

où (p, q, r) est l'adjoint de (a, b, c) . En nommant l'adjoint de chaque variable par son nom dans le système direct, on obtient une deuxième forme d'instruction informatique (Fortran) équivalente :

$$\begin{aligned}b &= b + a * zc \\c &= c + a * zb\end{aligned}$$

En effet, matriciellement, cela s'écrit simplement. L'écriture mathématique de l'instruction linéarisée correspond à cette opération :

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \leftarrow \begin{pmatrix} 0 & zc & zb \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \times zc + c \times zb \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

La transposition mathématique donne :

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \leftarrow \begin{pmatrix} 0 & zc & zb \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ zc & 1 & 0 \\ zb & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ b + a \times zc \\ c + a \times zb \end{pmatrix}$$

On peut noter que l'application systématique de cette méthode engendre des lignes inutiles qu'il sera intéressant d'éliminer par la suite [8].

4.3.1 Système adjoint au second ordre

Le code du système adjoint au second ordre est obtenu en dérivant le code adjoint. On doit pour cela conserver les trajectoires du système direct, tangent et adjoint.

Remarque

Le développement d'un code adjoint (et adjoint au second ordre) n'est en général pas un processus très compliqué. Il peut néanmoins devenir fastidieux et long lorsque l'on veut l'appliquer à de gros codes comme de modèles météorologiques ou océanographiques. Les écritures à la main nécessitent une validation à chaque étape et conduit souvent à beaucoup d'erreurs de typographie. C'est dans le but d'automatiser ce processus que nous utiliserons dans les paragraphes ci-dessus le logiciel de différentiation automatique *Odyssée* pour déduire le modèle adjoint et ensuite le modèle adjoint au second ordre afin de déduire les études de sensibilités par rapport aux observations. Nous commençons tout d'abord par une brève description du différentiateur automatique *Odyssée*.

4.4 Dérivation automatique des codes adjoints : Utilisation d'Odyssee

4.4.1 Quelques définitions

On appelle :

routine informatique un morceau compilable de code constitué d'une entête, de déclarations de variables, d'expressions arithmétiques, d'expressions conditionnelles, d'appels à d'autres routines, de lignes de contrôle d'itérations et d'une instruction de fin,
variables d'entrée d'une routine R, les arguments de la routine dont la valeur est connue pour l'exécution de cette routine. Les variables d'entrée actives sont les variables d'entrée par rapport auxquelles le code direct est dérivé,
variables de sorties d'une routine R, les arguments modifiés par exécution de celle-ci,
code direct le code original que l'on souhaite dériver.

4.4.2 Généralités

Durant les deux dernières décénies, les modèles adjoints étaient codés manuellement. Cette tâche est non seulement très difficile à réaliser, mais est source de beaucoup d'erreurs. Avec l'apparition des logiciels de différentiation automatique Adifor [3], Adol-C [42] (pour les codes écrits en C/C++), TAMC, Odyssee [33], . . . , ce travail difficile et fastidieux, peut être en partie évité.

Ces logiciels de différentiation automatique ont des performances différentes et permettent de calculer les dérivées successives d'un code en mode linéaire tangent (linéarisation des expressions) et inverse pour certains, et opèrent sur des programmes écrits en langages différents (Fortran 77 pour Odyssee, TAMC et Adifor, C pour Adol-C). Ces outils ont été utilisés pour plusieurs applications. Nous pouvons citer de façon non exhaustive, l'utilisation d'Odyssee en météorologie pour la dérivation du code adjoint Meso-NH par Charentier et Ghémirès [8], en thermohydraulique [31] et en aéronautique pour étudier les problèmes d'optimisation de forme [67, 71]. La bibliographie concernant le développement et les applications d'Odyssee s'obtiennent aisément sur le site Web de l'INRIA (<http://www.inria.fr>). Ci-dessous, nous présentons quelques caractéristiques de la version 1.7 d'Odyssee que nous utilisons.

4.4.3 Présentation d'Odyssee

Odyssee (version 1.7) est le logiciel de différentiation automatique conçu et réalisé par le projet SAFIR (INRIA Sophia-Antipolis). Ce code de calcul formel prend en entrée un code écrit en fortran 77 et construit deux codes dérivés, tangent et cotangent, écrits et compatibles en Fortran 77. (Voir pour plus de détails [33, 31]).

4.4.4 Fonctionnalités d'Odysée

Le linéaire tangent (mode direct)

Le code linéaire tangent d'une unité est l'unité qui calcule la fonction représentée par le code initial ainsi que son application linéaire tangente. Si les variables d'entrée actives de l'unité initiale sont notées v_D et les variables de sortie actives sont notées v_M et si cette unité calcule $v_M := \psi(v_D)$, le code linéaire tangent calculera $v_M := \psi(v_D)$ et \dot{v}_D en v_D dans la direction \dot{v}_D , par $\dot{v}_M := \psi'(v_D) \cdot \dot{v}_D$. La variable \dot{v}_M ainsi calculée contient la valeur de la dérivée (directionnelle) de v_M au point v_D dans la direction \dot{v}_D .

Le linéaire cotangent (mode inverse)

Le code linéaire cotangent d'une unité est l'unité qui calcule son application linéaire cotangente. Si on désigne encore par v_D les variables d'entrée actives et par v_M les variables de sortie actives, le code linéaire cotangent met à jour les variables duales \bar{v}_D associées aux entrées initiales v_D à partir des variables d'entrée initiales v_D et des variables duales \bar{v}_D et \bar{v}_M .

4.5 Assimilation de données et différentiation automatique

Nous présentons dans ce paragraphe, une application de la différentiation automatique (via `Odysée`) pour dériver les informations du premier et du second ordre sur le modèle d'écoulement en zone non-saturée. Nous utiliserons la différentiation automatique en mode inverse pour déduire le système adjoint (gradient de la fonction coût par rapport aux variables d'entrée actives) et en mode direct sur le système d'optimalité pour obtenir la dérivée directionnelle du gradient de la fonction coût, nécessaire pour mener l'analyse de sensibilité.

Tout d'abord, nous commençons par rappeler les équations pour le modèle d'évolution défini aux chapitres 2 et 3.

Modèle adjoint

Le calcul du gradient de la fonction coût par rapport aux paramètres hydrodynamiques nécessite la résolution du modèle adjoint. Ainsi, pour le modèle d'évolution de forme générale :

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = F(X, K), \\ X|_{t=0} = u, \end{cases}$$

si P est la variable adjointe associée à la variable d'état X , alors P est solution de l'équation :

$$\begin{cases} \frac{dP}{dt} = \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T P = C^T (C.X - X_{obs}) \\ P(T) = 0. \end{cases} \quad (4.6)$$

La résolution de ce système de façon rétrograde permet d'obtenir le gradient de la fonction coût J par rapport aux paramètres de contrôle $U = (u, K)$

$$\begin{aligned} \nabla_u J &= \lambda_2(u - u_o) - P(0) \\ \nabla_K J &= \lambda_1(K - K_o) - \left[\frac{\partial F}{\partial K} \right]^T . P \end{aligned} \quad (4.7)$$

Modèle adjoint au second ordre et analyse de sensibilité

Pour une perturbation h , $h = (h_u, h_K)$ sur le vecteur de paramètres U , nous obtenons le système linéaire tangent

$$\begin{cases} \frac{d\widehat{X}}{dt} = \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right] \widehat{X} + \left[\frac{\partial F}{\partial K} \right] h_K, \\ \widehat{X}(0) = h_u, \end{cases}$$

où \widehat{X} est la perturbation sur X . Pour le système adjoint nous obtenons :

$$\begin{cases} \frac{d\widehat{P}}{dt} + \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2} . \widehat{X} + \frac{\partial^2 F}{\partial K \partial X} h_K \right]^T P + \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T \widehat{P} = C^T (C\widehat{X}) \\ \widehat{P}(T) = 0 \end{cases}$$

\widehat{P} étant la perturbation sur P induite par h . La dérivée directionnelle dans la direction de perturbation $h = (h_u, h_K)$ du gradient de la fonction coût est définie par :

$$\begin{cases} \widehat{\nabla}_u J = -\alpha h_u - \widehat{P}(0) \\ \widehat{\nabla}_K J = -\alpha h_K - \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X \partial K} . \widehat{X} + \frac{\partial^2 F}{\partial^2 K} . h_K \right]^T P - \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T \widehat{P} \end{cases}$$

Après ces rappels, nous allons ci-dessous nous utiliser le différentiateur *Odyssée* afin de dériver les études au premier et au second ordre.

4.5.1 Modèle adjoint : (Odyssée)

Algorithmique modèle direct

Le modèle direct est constitué de 4 routines principales. Les routines `coef1dim` et les routines `coef2dim` qui permettent respectivement de calculer la capacité spécifique et la conductivité hydraulique, `infcum` est la routine permettant de calculer l'infiltration cumulée et enfin `tridia1` est la routine qui nous permet de résoudre à chaque pas de temps un système tridiagonal afin de mettre à jour le vecteur de pression à l'itération suivante. `direct` est la routine principale qui fait appel aux autres routines afin de résoudre le modèle direct.

<pre style="margin: 0;"> direct +- (coef1dim) +- (coef2dim) +- (infcum) +- (tridia1) </pre>

TAB. 4.1 – Structure du modèle direct

4.5.2 Utilisation d’Odyssée

Paramètres de dérivation

L’utilisation d’Odyssée requiert la spécification du mode de dérivation, la routine principale (*head*) et les variables d’entrée actives par rapport auxquelles on souhaite effectuer la dérivation.

Nous choisissons pour notre problème comme variables d’entrée actives :

- la pression H pour dériver le modèle adjoint.
- Les paramètres K_s , θ_s , h_g , η , n , θ_{ini} , θ_{surf} et θ_{fond} (qu’on identifiera à K pour ne pas alourdir les expressions) pour la dérivation des routines `coef1dim`, `coef2dim`, `infcum`.

Dans le but de prendre en compte le terme $(I_{cal}(t_j) - I_{obs}(t_j))$ provenant de la fonction coût qui intervient dans le second membre de l’équation adjointe (2.38), il faut écrire de façon judicieuse la routine de tête.

Après dérivation de `direct(H, K)` par rapport à la variable active (pression), en mode cotangent nous obtenons le code adjoint dont le graphe fonctionnel est présenté sur la figure (4.2) ci-dessous.

<pre style="margin: 0;"> directcl +- (coef1dim) +- (coef1dimcl) +- (coef2dim) +- (coef2dimcl) +- (infcum) +- (infcumcl) +- (tridia1) +- (tridia1cl) </pre>
--

TAB. 4.2 – structure du code adjoint

Dans le formalisme d’Odyssée la variable adjointe est notée par HCCL (et de façon générale les routines dérivées ont le suffixe CL et les variables CCL en mode adjoint et TL et TTL pour les variables en mode linéaire tangent) et correspond à P dans l’équation (4.6).

Pour évaluer les composantes de la fonction coût (4.7), nous effectuons la dérivation des routines `coef1dim`, `coef2dim`, `infcum` en mode inverse par rapport aux

paramètres de contrôle K . Ceci se fait facilement en dérivant les autres routines par rapport à la variable active K . On peut également effectuer cette dérivation en mode tangent, la seule différence se situe au niveau de l'initialisation des variables duales lors des différents appels aux routines dérivées.

En résumé, l'obtention du gradient de la fonctionnelle coût J par *Odyssee*, s'obtient facilement en dérivant les différentes routines du modèle direct en mode inverse .

Après cette phase, nous allons à présent nous atteler aux dérivées secondes afin de nous consacrer aux études au second ordre.

4.5.3 Adjoint au second ordre : *Odyssee*

Que ce soit pour l'analyse de sensibilité par rapport aux critères fonctionnels, ou l'étude de sensibilité du vecteur de paramètres par rapport à une perturbation sur les observations, l'approche globale repose sur l'adjoint au second ordre (Le Dimet et al [104, 43]) que nous avons présenté au chapitre 3.

A ce jour, aucun logiciel de différentiation automatique n'est susceptible, de lui même, de dériver l'adjoint au second ordre d'un code. Cependant compte tenu de la définition de l'adjoint au second ordre, il est naturel de chercher à utiliser ces logiciels pour obtenir automatiquement le code associé. Nous pouvons citer les travaux de J. Abate et al [1] qui ont décrit une approche d'évaluation automatique des dérivées secondes d'une fonction représentée par des codes écrits en Fortran ou en C. Néanmoins, cette approche ne correspond pas à notre problématique car nous voulons conserver l'esprit de l'analyse de sensibilité utilisant les équations adjointes.

En suivant la démarche qui nous a conduit à l'obtention du modèle adjoint, on peut penser qu'il serait aisé de dériver de nouveau en mode cotangent le code adjoint obtenu comme décrit dans [22]. Malheureusement la version actuelle d'*Odyssee* ne donne pas satisfaction. En effet il résulte de cette deuxième dérivation un code pas clair, avec des variables incohérentes.

Pour cette raison, et compte tenu du fait qu'en réalité notre analyse de sensibilité est basée sur le calcul du produit du Hessien appliqué à un vecteur et que ce produit Hessien vecteur n'est rien d'autre que la perturbation du gradient de la fonction coût ; cela nous suggère plutôt de penser à une dérivation en mode linéaire tangent des codes générés par dérivation en mode linéaire cotangent.

Nous expliquons ci-dessous notre approche.

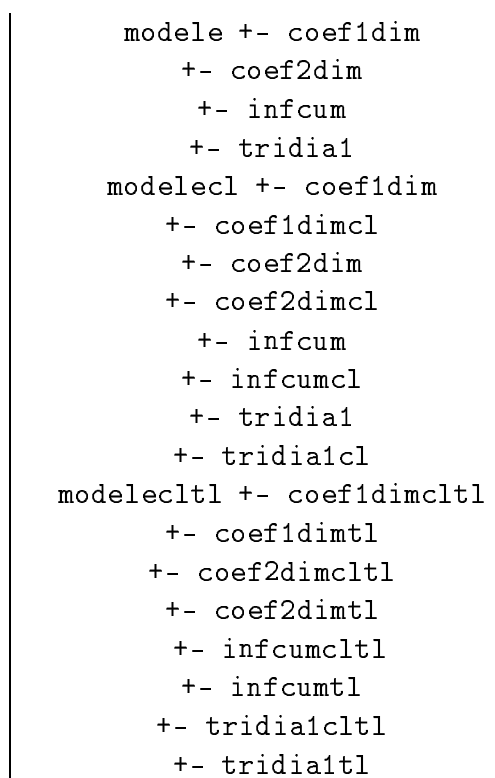
Algorithme

- Construire le modèle direct en fonction des variables de contrôle.
- Différencier en mode adjoint par rapport à ces variables de contrôle. Dans le formalisme d'*Odyssee* la variable adjointe est notée *HCCl* ce qui correspond à la

variable adjointe P . Avant de poursuivre la dérivation, on remplace toutes les occurrences de $HCCL$ par P .

- On regroupe dans le même routine informatique, notée ASO , les modèles direct et adjoint en y ajoutant le résultat du calcul du gradient de la fonction coût obtenu en utilisant le résultat du calcul de la variable adjointe générée par $Odyssée$ (que nous noterons par J pour simplifier notre exposé). En dérivant ASO par rapport aux variables X et P en mode tangent on obtient la routine $ASOTL$ et les variables adjointes $XTTL$, $PTTL$ et $JTTL$.

On obtient dans $JTTL$ la dérivée directionnelle du gradient de la fonction coût dont les composantes correspondent à $\widehat{\nabla}_u J$ et $\widehat{\nabla}_K J$. L'appel de la routine $ASOTL$ avec initialisation de la variable duale $XTTL$ à un vecteur v permet alors d'obtenir dans $JTTL$, le produit $Hessien \times vecteur H(U).v$ ($U = (u, K)$).



TAB. 4.3 – Graphe d'appel des routines du programme $ASOTL$.

Cette phase est complétée par une seconde dérivation en mode inverse par $Odyssée$ du modèle direct avec une modification, la fonction coût est remplacée par la fonction réponse.

Nous venons ainsi d'effectuer deux opérations qui nous permettent d'obtenir d'une part le produit $H(U^*).v$ et d'autre part le second membre correspondant à $Q_1(0)$.

Il ne reste plus qu'à utiliser un algorithme de type descente ou gradient conjugué pour calculer la sensibilité v^* , qui se résume en fait à l'inversion de la matrice hessienne.

Sensibilité du paramètre optimal par rapport à une perturbation sur les observations

Pour ce point, la différence se situe au niveau de la résolution du modèle adjoint permettant d'obtenir la variable adjointe \widehat{P}_2 :

$$\begin{cases} \frac{d\widehat{P}_2}{dt} + \left[\frac{\partial F}{\partial X} \right]^T \widehat{P}_2 = -C^T h_{obs} \\ \widehat{P}_2(T) = 0 \end{cases}$$

Pour ce faire, après dérivation du modèle direct et en mode inverse par *Odysée*, par rapport à la variable H , dans le code obtenu, les différentes observations à chaque pas de temps sont remplacées par les perturbations correspondantes. Ce qui nous conduit à une équation de calcul de la sensibilité identique au cas précédent.

Remarque

Le gradient de la fonction peut aussi s'obtenir en dérivant uniquement après regroupement dans le modèle direct de la routine qui évalue la fonction coût. Il suffit ensuite de dériver soit en mode direct soit en mode adjoint par rapport aux paramètres de contrôle (variables actives) et on obtient dans JTTL ou JCCL le gradient de la fonction coût.

Pour le produit du Hessien par un vecteur, il faut dériver deux fois, une première fois en mode adjoint ensuite faire un regroupement judicieux et redériver une seconde fois en mode direct ou inverse toujours par rapport aux variables de contrôle. On obtient dans JCCLTTL (ou JTTLCCCL) le résultat souhaité. Lors des appels des différentes routines dérivées, il faut initialiser convenablement les différentes variables duales.

4.6 Résultats numériques

4.6.1 Validation des codes générés de façon automatique

Comme moyen de vérification des codes dérivés construits, on utilise classiquement le test du gradient et le test de produit scalaire [8]. Le premier étudie l'adéquation du code direct avec les codes dérivés par comparaison de gradients directionnels, le second permet de valider au sens où l'on vérifie seulement l'adéquation entre le code linéaire tangent et le code linéaire cotangent. Nous donnons ci-dessous le formalisme.

Le test du gradient d'une fonctionnelle

Soit \mathcal{P} un programme informatique tel que

$$\begin{aligned} \mathcal{P} : \mathbb{R}^n &\longrightarrow \mathbb{R}^m \\ u &\longmapsto \mathcal{P}(u) = v \end{aligned} \tag{4.8}$$

Pour valider les procédures de dérivation de notre programme, on choisit un fonctionnelle J :

$$\begin{aligned} J : \mathbb{R}^m &\longrightarrow \mathbb{R} \\ u &\longmapsto J(v) \quad [= J(\mathcal{P}(u))], \end{aligned} \quad (4.9)$$

Dans notre cas, J sera la fonction coût.

Version mathématique

Pour vérifier l'exactitude du vecteur gradient de la fonctionnelle J , un test expérimental fiable consiste à employer un développement de Taylor de J au point v [14, 8]. En notant $w \in \mathbb{R}^m$ une perturbation dans la direction de $\delta v \in \mathbb{R}^m$ ($\|\delta v\| = 1$), il découle que

$$J(v+w) - J(v) = \langle \nabla J(v), w \rangle + o(\|w\|).$$

Si pour toute direction $\delta v \in \mathbb{R}^m$, on vérifie :

$$\text{pour } \nu(\alpha) = \frac{J(v + \alpha \delta v) - J(v)}{\alpha \cdot \langle \nabla J(v), \delta v \rangle} = 1 + o(\alpha), \quad \lim_{\alpha \rightarrow 0} \nu(\alpha) = 1,$$

alors le test du gradient est satisfait : la linéarisation du code direct est convenable.

Test du calcul *Hessien* \times *vecteur* d'une fonctionnelle

Pour valider les procédures permettant de calculer le produit *Hessien* \times *vecteur* de la fonctionnelle J , nous allons utiliser le même test expérimental qui consiste à effectuer un développement de Taylor à l'ordre 2 de J au point v . En notant comme précédemment $w \in \mathbb{R}^m$ une perturbation dans la direction de $\delta v \in \mathbb{R}^m$ ($\|\delta v\| = 1$), il découle que

$$J(v+w) - J(v) = \langle \nabla J(v), w \rangle + \frac{1}{2} \langle \nabla^2 J(v) w, w \rangle + o(\|w\|^2).$$

Si pour toute direction $\delta v \in \mathbb{R}^m$, on vérifie :

$$\text{pour } \zeta(\alpha) = \frac{J(v + \alpha \delta v) - J(v) - \alpha \langle \nabla J(v), \delta v \rangle}{\frac{\alpha^2}{2} \cdot \langle \nabla^2 J(v) \delta v, \delta v \rangle} = 1 + o(\alpha), \quad \lim_{\alpha \rightarrow 0} \zeta(\alpha) = 1,$$

alors le test du calcul du produit *Hessien* \times *vecteur* est satisfait.

Sur les tableaux (4.4) et (4.5), nous présentons les résultats du test de gradient et du test du calcul du produit *Hessien* \times *vecteur*.

Pour tester la symétrie du Hessien, nous avons considéré comme au chapitre 3 deux vecteurs aléatoires v et w . Nous observons sur le tableau (4.4) que $\nu(\alpha)$ tend vers 1 quand α vers 0, $\alpha \geq 2^{-10}$, pour le gradient, on a une très bonne précision pour $\alpha = 2^{-26}$. Pour le calcul du produit *Hessien* \times *vecteur*, $\zeta(\alpha)$ tend vers 1 quand α vers 0, $\alpha \geq 2^{-20}$. Les tableaux (4.4), (4.5), montrent que le gradient de la fonction coût et le produit *Hessien* \times *vecteur* sont bien calculés par *Odyssée*. De plus à travers le tableau (4.6) nous constatons que le Hessien est symétrique (à la précision machine près).

α	$\nu(\alpha)$	α	$\nu(\alpha)$	α	$\nu(\alpha)$
2^{-10}	1.0030206678	2^{-20}	1.0000029523	2^{-30}	0.99999995210
2^{-12}	1.0007559210	2^{-22}	1.0000007345	2^{-32}	1.0000006607
2^{-14}	1.0001890235	2^{-24}	1.0000001073	2^{-34}	1.0000006607
2^{-16}	1.0000472585	2^{-26}	1.0000000006	2^{-36}	0.9999855429
2^{-18}	1.0000059071	2^{-28}	0.9999999521	2^{-38}	0.9999553071

TAB. 4.4 – Précision du calcul du gradient : *Odysée*

α	$\zeta(\alpha)$	α	$\zeta(\alpha)$	α	$\zeta(\alpha)$
2^{-10}	0.510422571	2^{-20}	0.9986924079	2^{-30}	1.0001848522
2^{-12}	0.756299875	2^{-22}	1.0024825991	2^{-32}	1.0000679719
2^{-14}	0.890181975	2^{-24}	1.0009696008	2^{-34}	0.9999919671
2^{-16}	0.957338651	2^{-26}	1.0006118047	2^{-36}	0.9999455327
2^{-18}	0.987029752	2^{-28}	1.0003588691	2^{-38}	0.9999216944

TAB. 4.5 – Précision du calcul de $Hessien \times vecteur$: *Odysée*

$\langle H(U).v, w \rangle$	916.896193593925
$\langle H(U).w, v \rangle$	916.896102258690

TAB. 4.6 – Symétrie du Hessien

4.6.2 Identification

Nous allons à présent avant de passer à l'étude de sensibilité, procéder à la phase d'identification car nous disposons du gradient de la fonction coût. Pour cela comme nous l'avons fait au chapitre 2, nous allons distribuer les données d'infiltration (observations) suivant des distributions temporelles différentes : tous les pas de temps, toutes les 60 secondes, 300 secondes, 720 secondes, et enfin nous utiliserons les données de terrains. En pratique nous avons utilisé le programme d'optimisation M1QN3 développé par Gilbert et Lemaréchal [38].

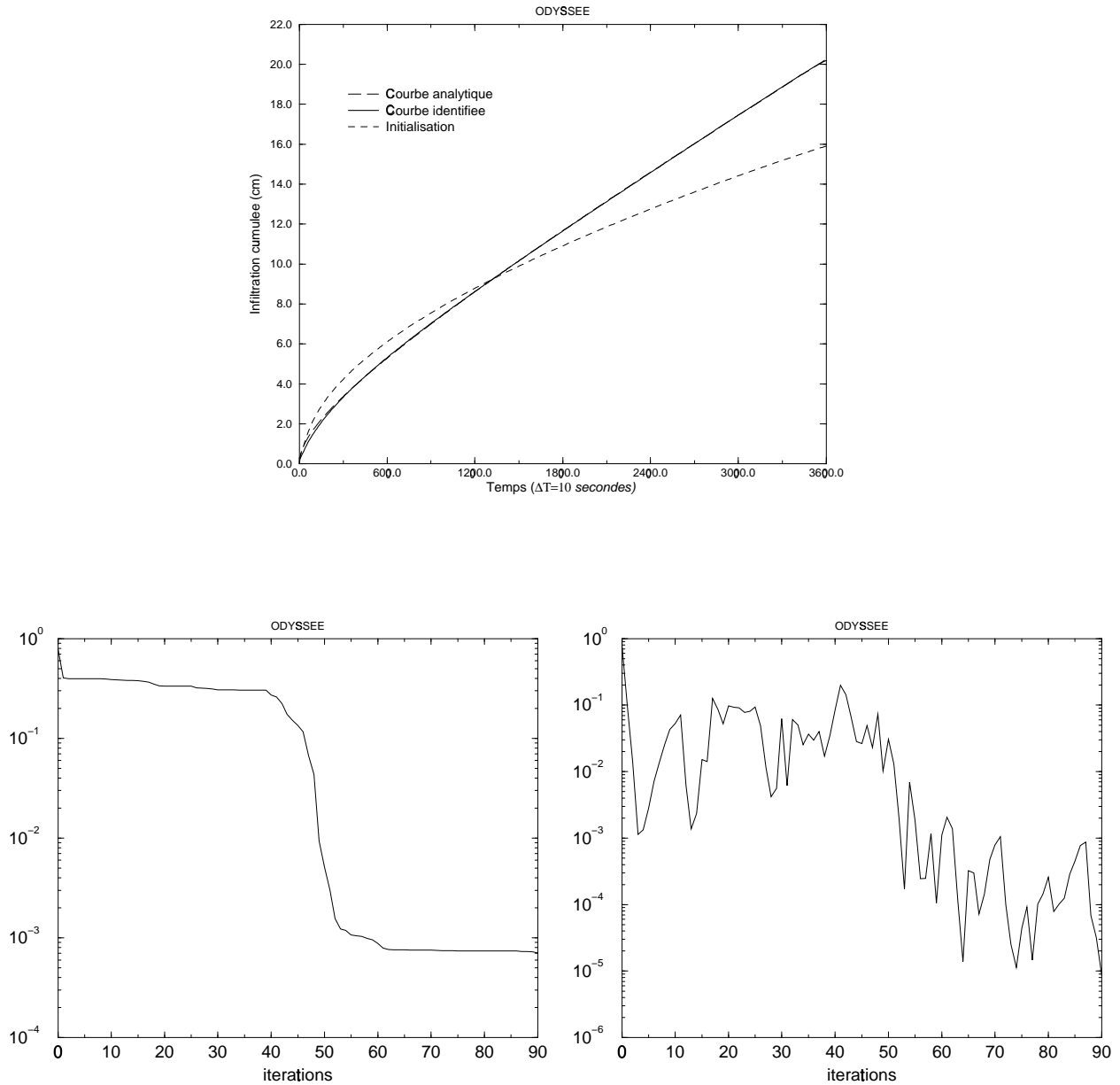


FIG. 4.1 – Infiltrations cumulées simulée et identifiée au dessus, au dessous à gauche variations de $\frac{J_k}{J_0}$ à gauche et de $\frac{\|\nabla J_k\|}{\|\nabla J_0\|}$ à droite au cours des itérations *données analytiques continues*

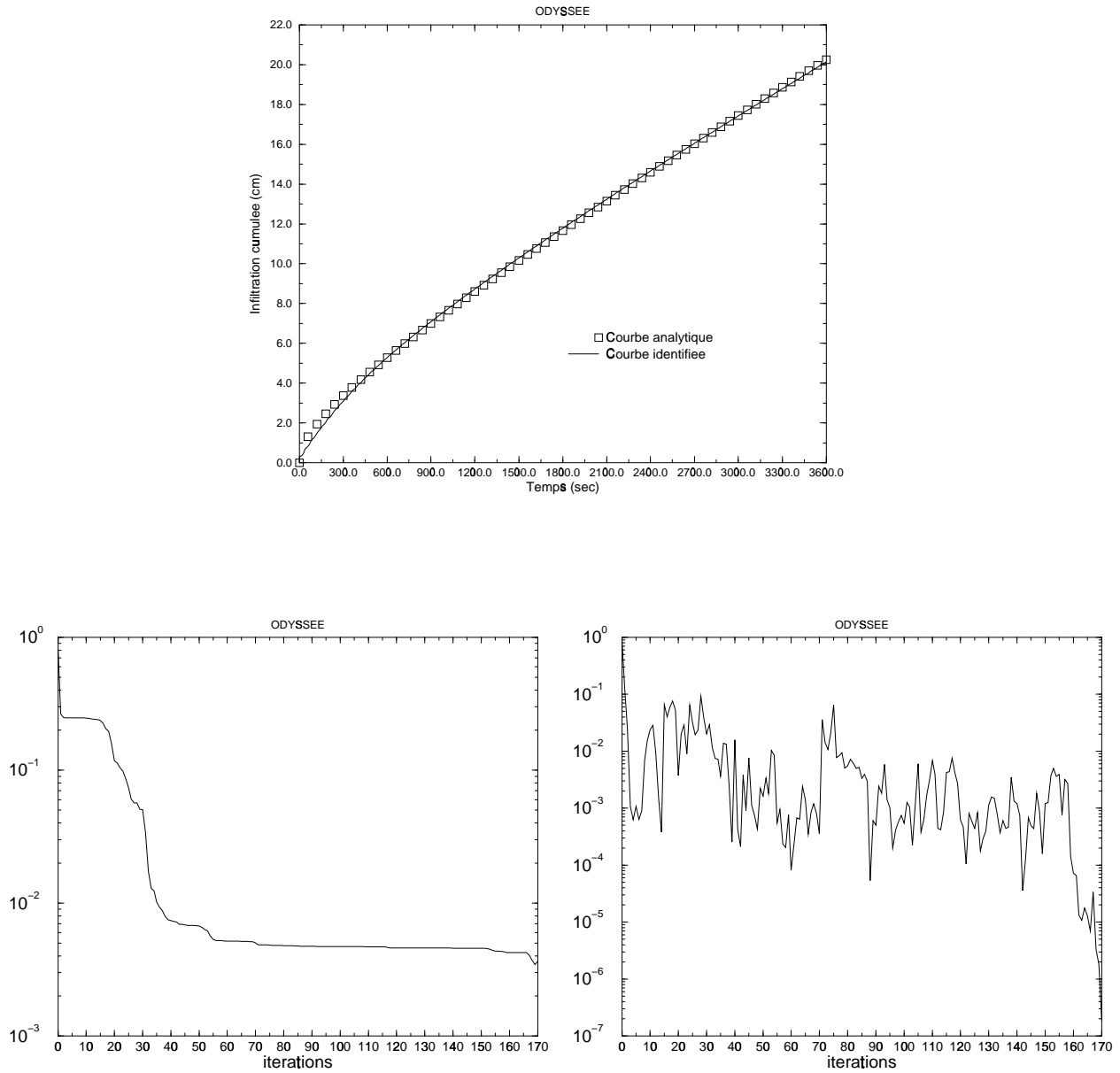


FIG. 4.2 – Infiltrations cumulées simulée et identifiée au dessus, au dessous à gauche variations de $\frac{J_k}{J_0}$ à gauche et de $\frac{\|\nabla J_k\|}{\|\nabla J_0\|}$ à droite au cours des itérations *données analytiques discrètes toutes les 60 secondes*

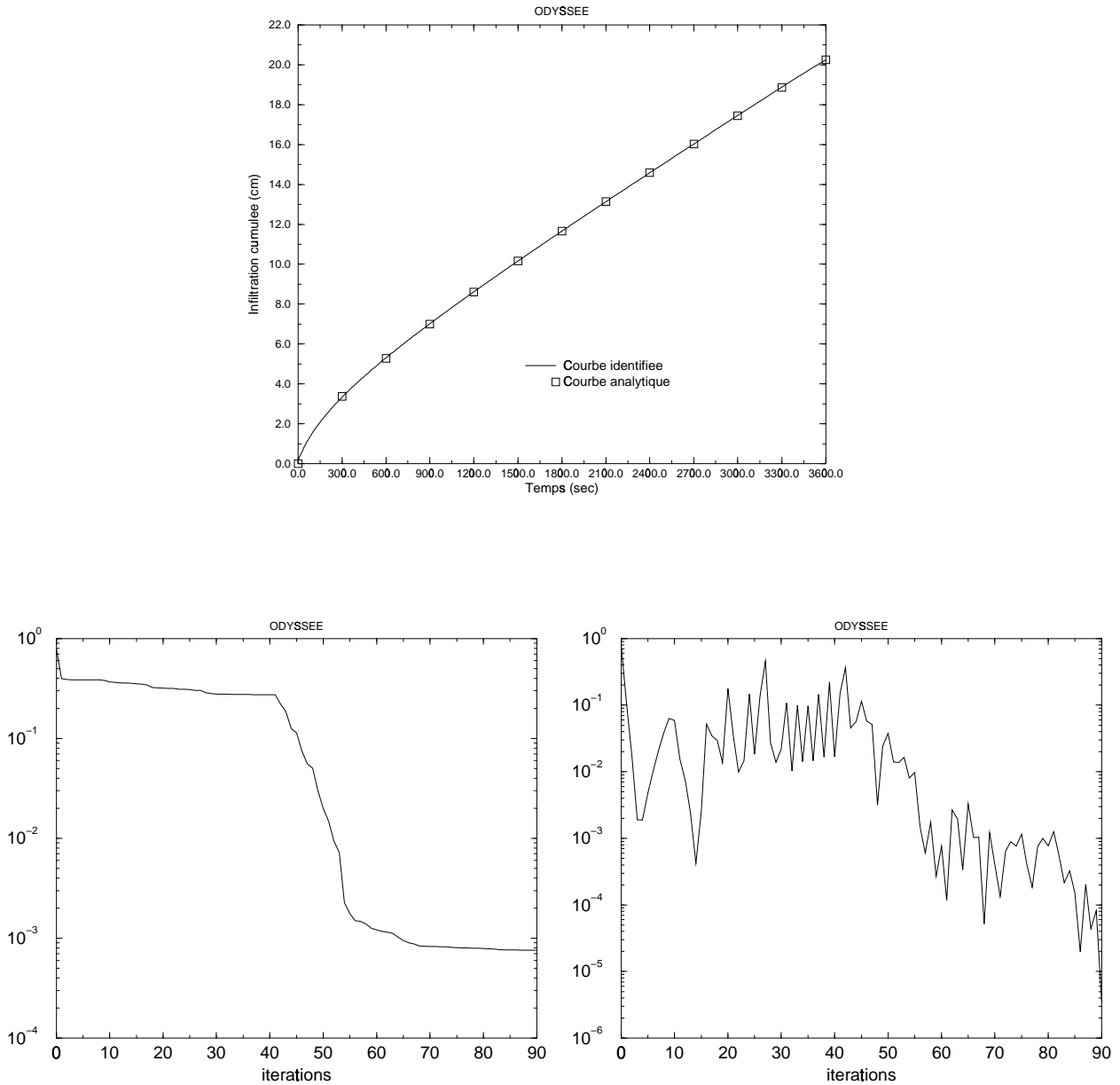


FIG. 4.3 – Infiltrations cumulées simulée et identifiée au dessus, au dessous à gauche variations de $\frac{J_k}{J_0}$ à gauche et de $\frac{\|\nabla J_k\|}{\|\nabla J_0\|}$ à droite au cours des itérations *données analytiques discrètes toutes les 300 secondes*

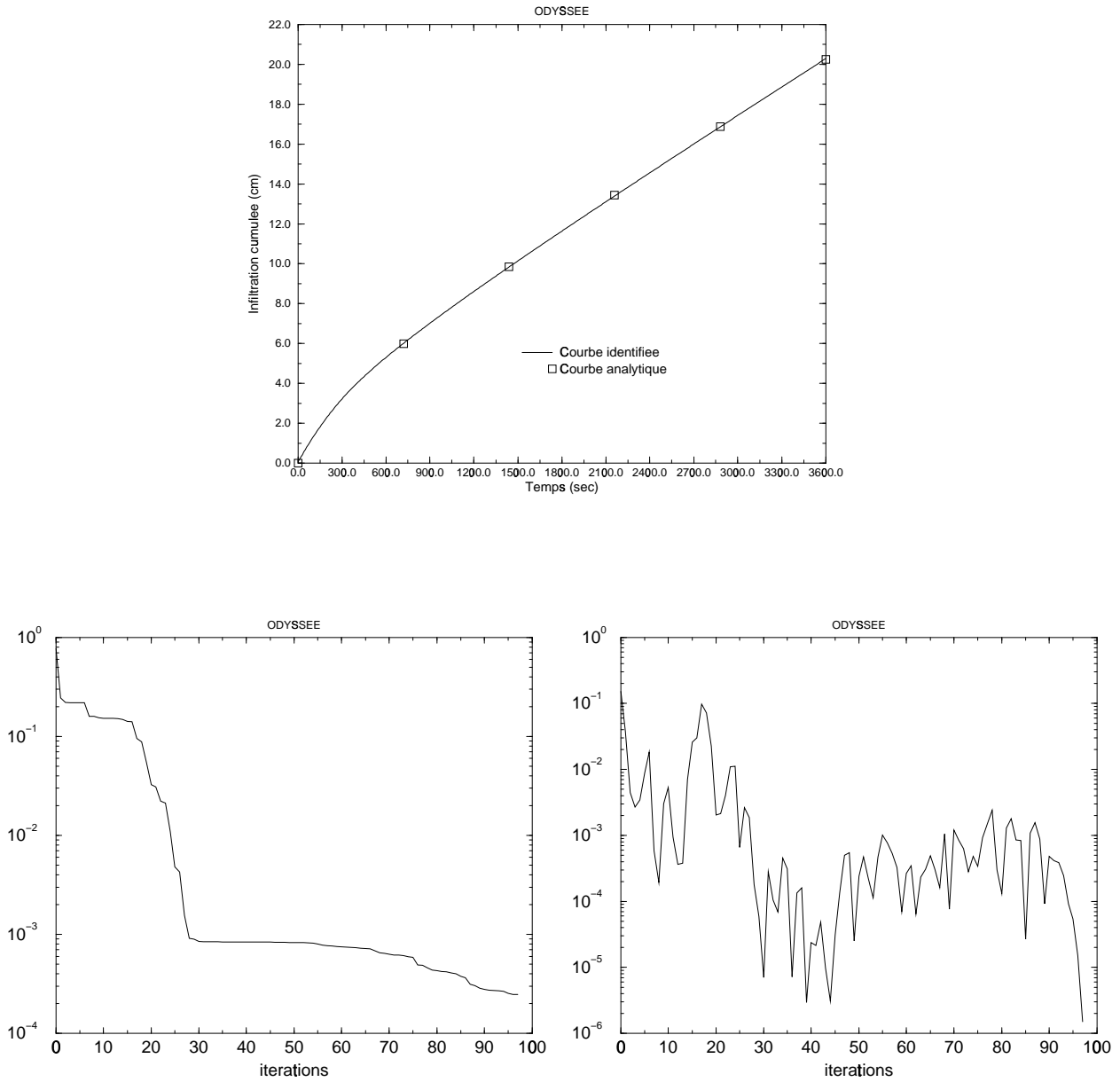


FIG. 4.4 – Infiltrations cumulées simulée et identifiée au dessus, au dessous à gauche variations de $\frac{J_k}{J_0}$ à gauche et de $\frac{\|\nabla J_k\|}{\|\nabla J_0\|}$ à droite au cours des itérations *données analytiques discrètes toutes les 720 secondes*

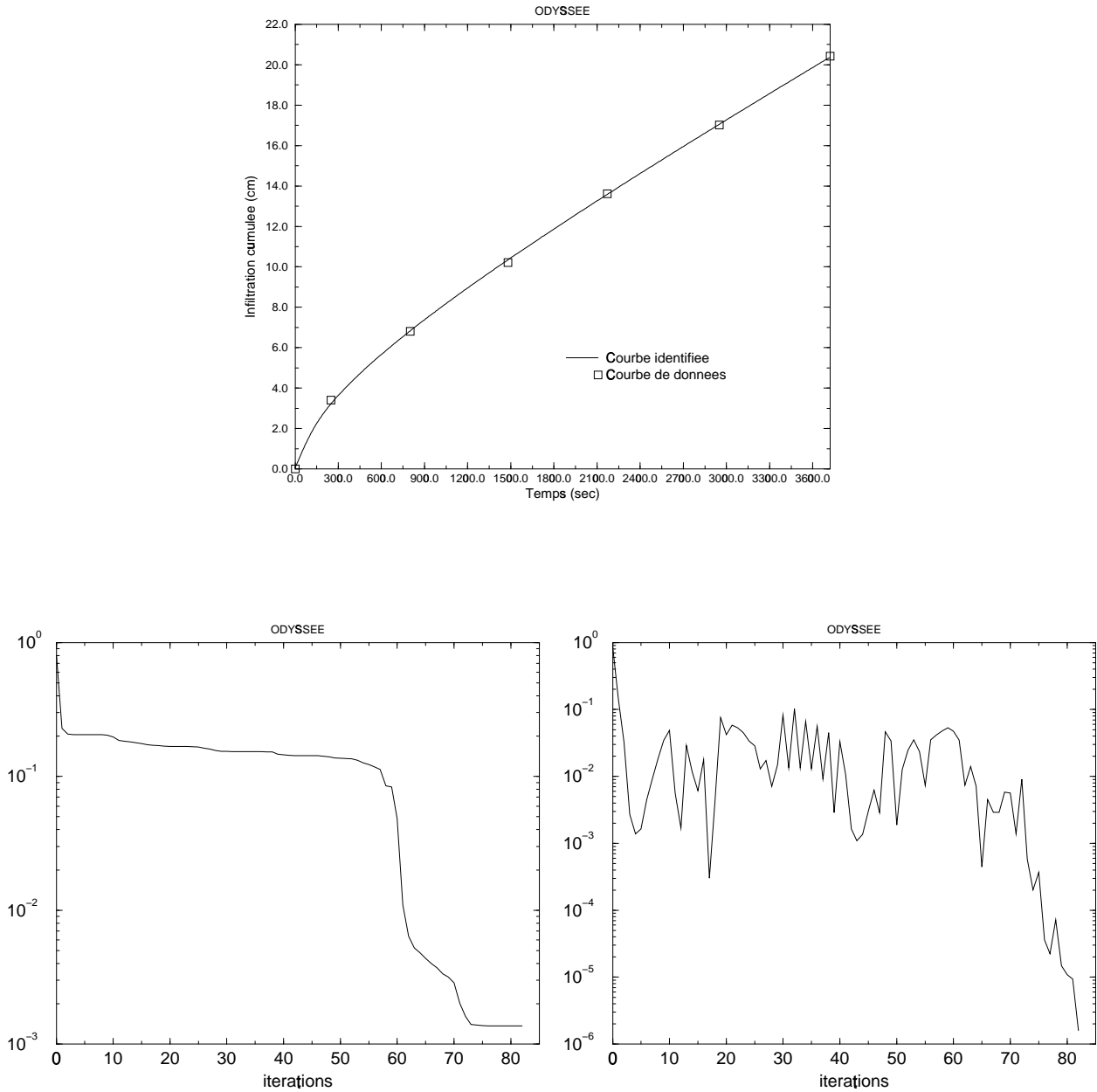


FIG. 4.5 – Infiltrations cumulées simulée et identifiée au dessus, au dessous à gauche variations de $\frac{J_k}{J_0}$ à gauche et de $\frac{\|\nabla J_k\|}{\|\nabla J_0\|}$ à droite au cours des itérations *données de terrain*

Commentaires

La phase d'identification utilisant l'équation adjointe générée par *Odyssee* est bien réalisée. Les différents graphes : (4.1), (4.2), (4.3), (4.4) et (4.5) justifient ce bon déroulement. L'explication peut être fournie par la bonne évaluation du gradient de la fonction coût par *Odyssee*.

On observe aussi que, mis à part le cas des observations distribuées toutes les 60 secondes (où le nombre d'itérations pour atteindre le minimum est élevé 170), le nombre des itérations pour les autres configurations est inférieur ou égal à 100.

4.6.3 Analyse de sensibilité

Après cette phase, nous abordons à présent, l'analyse de sensibilité. Pour ce faire, nous utilisons les critères fonctionnels (fonction réponse) qui ont été définis au chapitre 3 (paragraphe 3.6.2, page 95).

Ci-dessous, nous présentons l'analyse de sensibilité réalisée sur ces deux fonctions réponses en utilisant *Odyssee*.

Pour les graphes représentant l'évolution de la norme de la sensibilité en fonction du temps, on dérive le modèle direct en mode linéaire tangent par rapport à la variable active H et on l'intègre en l'initialisant avec les paramètres v_u^* et v_K^* issus de l'inversion du Hessien de la fonction coût.

Sensibilité des critères fonctionnels

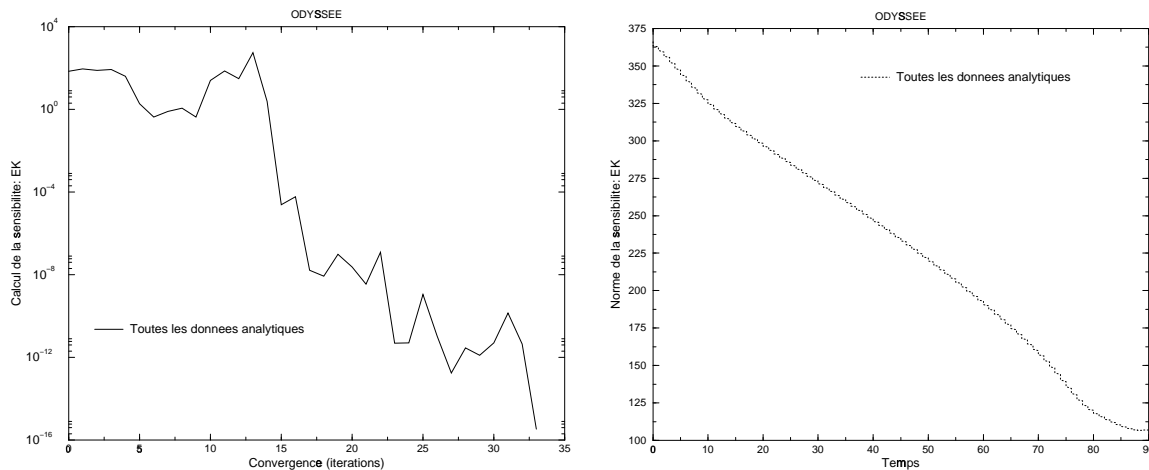


FIG. 4.6 – La figure de gauche représente la convergence du calcul de la sensibilité de EK au cours des itérations ; celle de droite montre l'évolution (en fonction du temps) de la norme de la sensibilité de EK : *toutes les données analytiques*

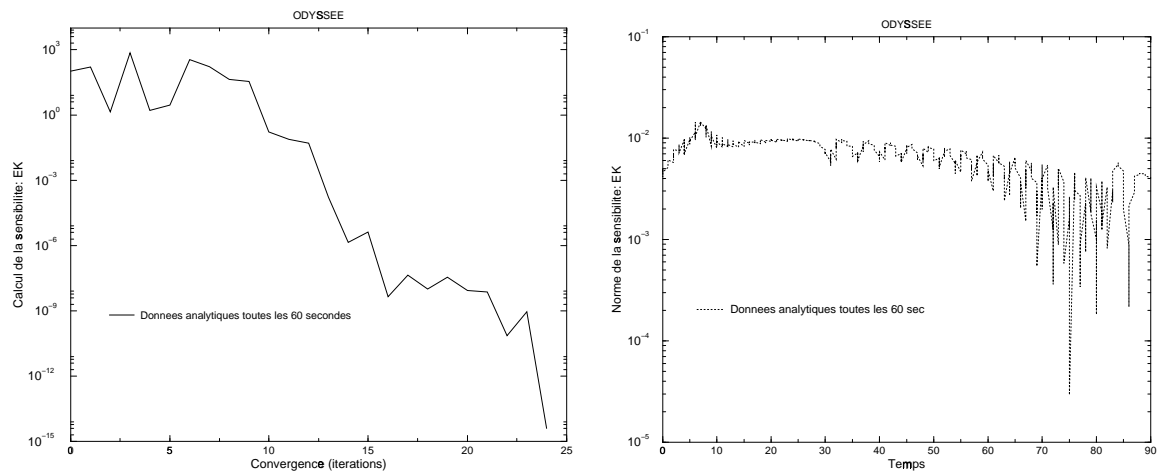


FIG. 4.7 – La figure de gauche représente la convergence du calcul de la sensibilité de EK au cours des itérations ; celle de droite montre l'évolution (en fonction du temps) de la norme de la sensibilité de EK : *données analytiques toutes les 60 secondes*

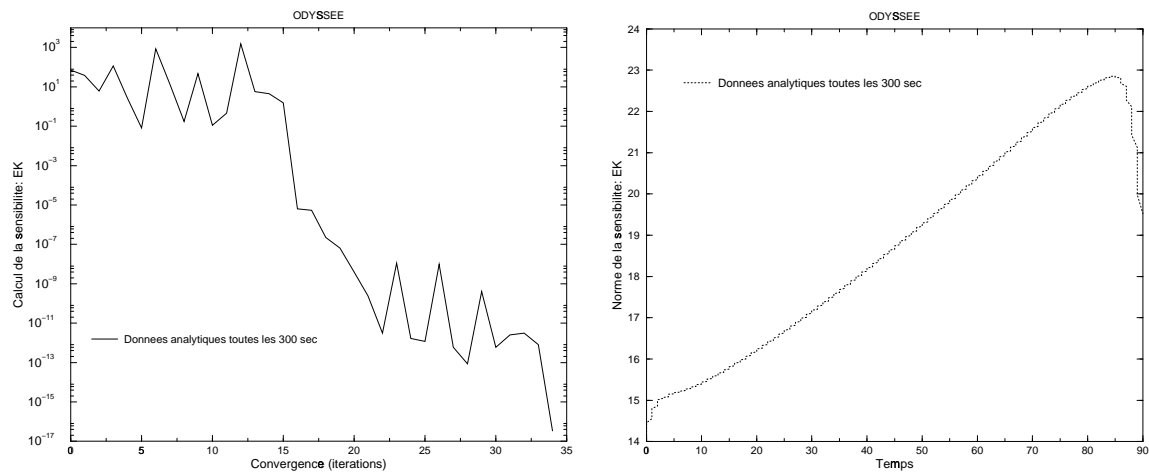


FIG. 4.8 – La figure de gauche représente la convergence du calcul de la sensibilité de EK au cours des itérations ; celle de droite montre l'évolution (en fonction du temps) de la norme de la sensibilité de EK : *données analytiques toutes les 300 secondes*

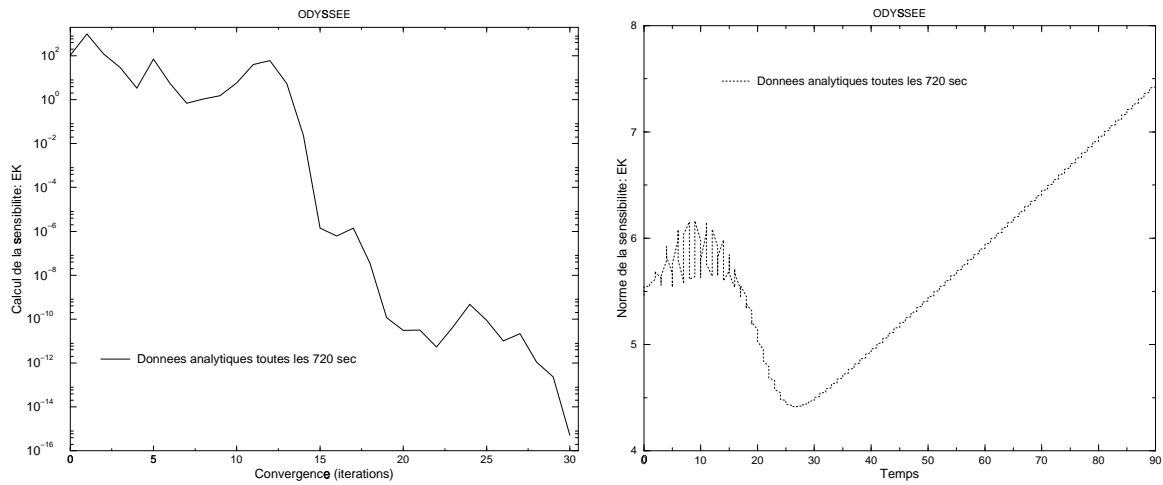


FIG. 4.9 – La figure de gauche représente la convergence du calcul de la sensibilité de EK au cours des itérations ; celle de droite montre l'évolution (en fonction du temps) de la norme de la sensibilité de EK : *données analytiques toutes les 720 secondes*

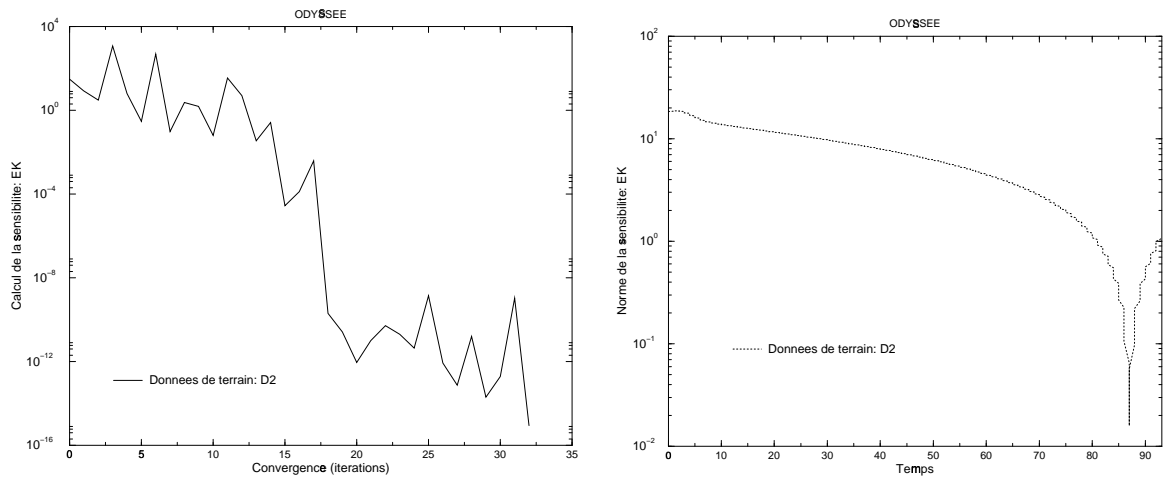


FIG. 4.10 – La figure de gauche représente la convergence du calcul de la sensibilité de EK au cours des itérations ; celle de droite montre l'évolution (en fonction du temps) de la norme de la sensibilité de EK : *données de terrain*

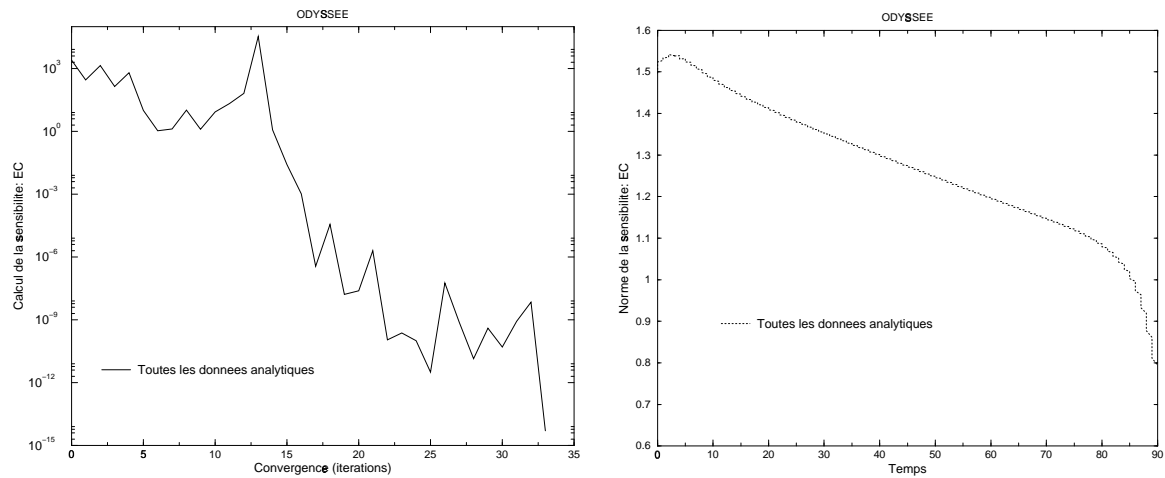


FIG. 4.11 – La figure de gauche représente la convergence du calcul de la sensibilité de EC au cours des itérations ; celle de droite montre l'évolution (en fonction du temps) de la norme de la sensibilité de EC : *toutes les données analytiques*

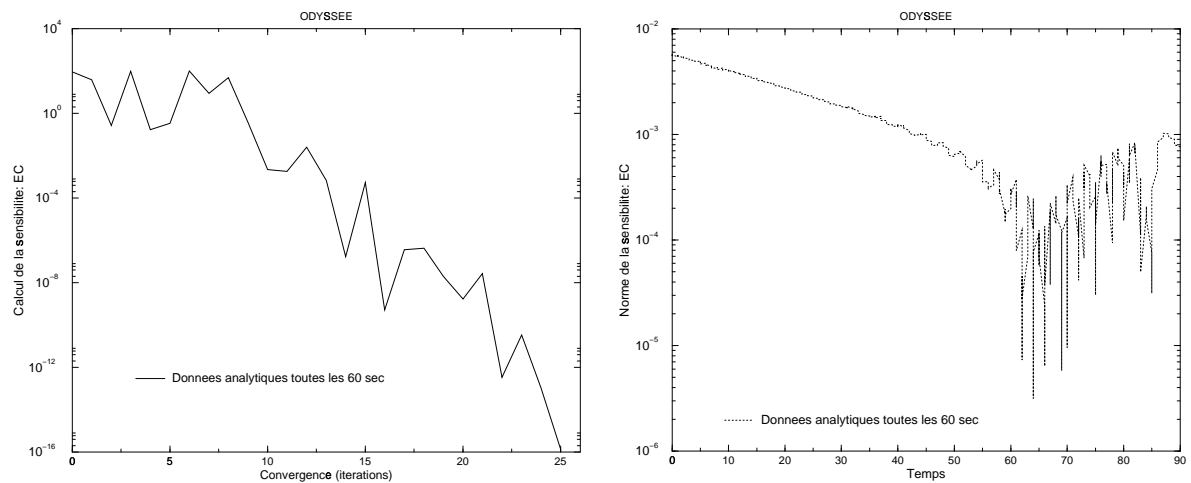


FIG. 4.12 – La figure de gauche représente la convergence du calcul de la sensibilité de EC au cours des itérations ; celle de droite montre l'évolution (en fonction du temps) de la norme de la sensibilité de EC : *données analytiques toutes les 60 secondes*

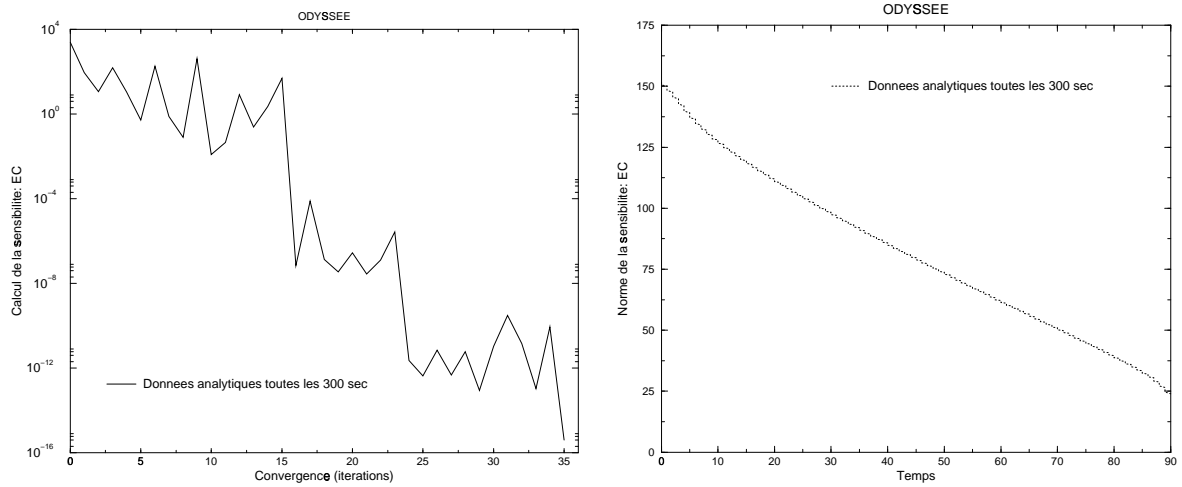


FIG. 4.13 – La figure de gauche représente la convergence du calcul de la sensibilité de EC au cours des itérations ; celle de droite montre l'évolution (en fonction du temps) de la norme de la sensibilité de EC : *données analytiques toutes les 300 secondes*

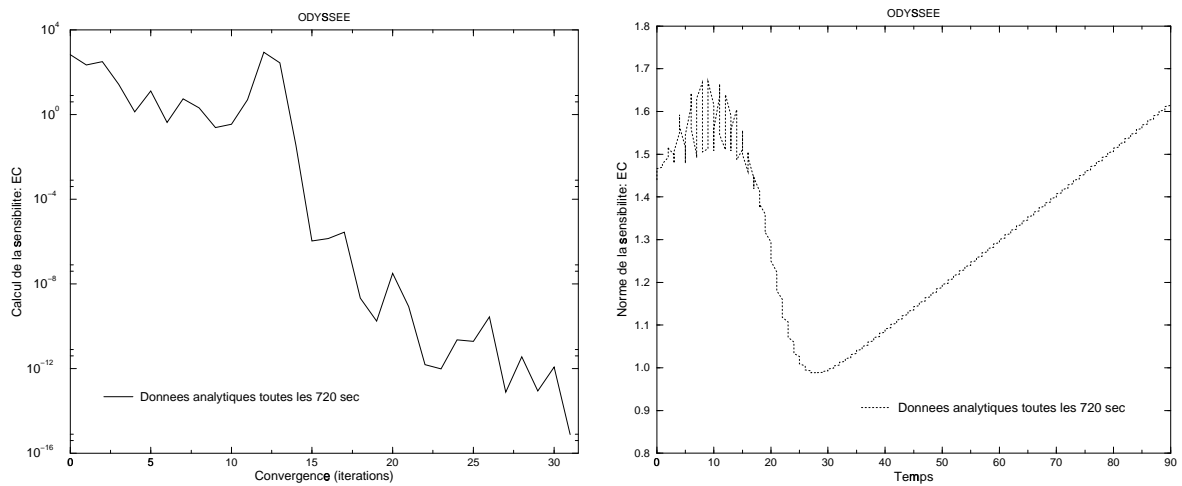


FIG. 4.14 – La figure de gauche représente la convergence du calcul de la sensibilité de EC au cours des itérations ; celle de droite montre l'évolution (en fonction du temps) de la norme de la sensibilité de EC : *données analytiques toutes les 720 secondes*

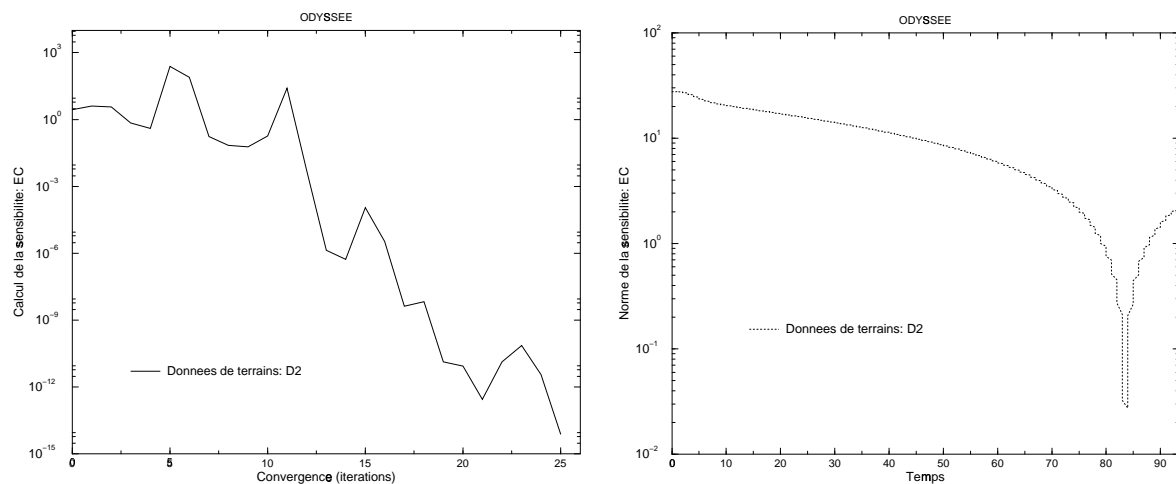


FIG. 4.15 – La figure de gauche représente la convergence du calcul de la sensibilité de EC au cours des itérations ; celle de droite montre l'évolution (en fonction du temps) de la norme de la sensibilité de EC : *données de terrain*

Sensibilité du contrôle optimal

Pour l'analyse de sensibilité du vecteur de paramètres optimal par rapport à une perturbation sur les observations, celles-ci ont été perturbées de $\pm 10\%$, nous présentons ci-dessous les résultats générés par la méthode de descente (gradient conjugué) utilisée pour minimiser la fonctionnelle associée à la résolution de $H(U^*) \cdot \tilde{v} + P_2(0)$ (voir chapitre 3, paragraphe 3.5.1, page 92).

Sur ces différents graphes, nous présentons le taux de convergence de la norme du résidu $H(U^*) \cdot \tilde{v} + P_2(0)$ ainsi que le taux de convergence du vecteur de sensibilité \tilde{v} obtenus en divisant la norme du résidu et la norme de la sensibilité à chaque itération par la norme du résidu et la norme de la sensibilité initiales respectivement.

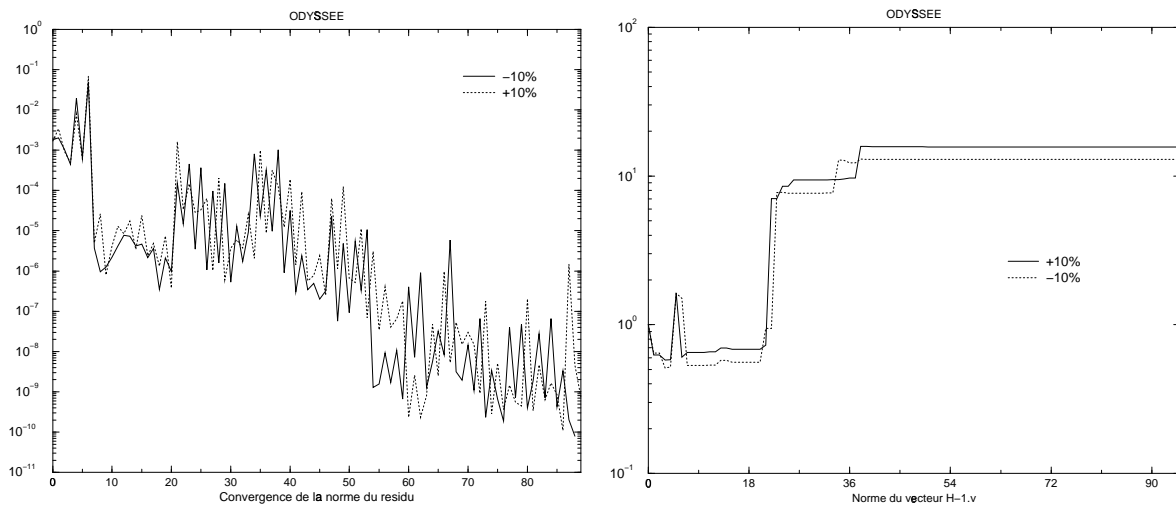


FIG. 4.16 – La figure de gauche représente la convergence de la norme du résidu en fonction des itérations; celle de droite la norme du vecteur la sensibilité : *toutes les données analytiques*

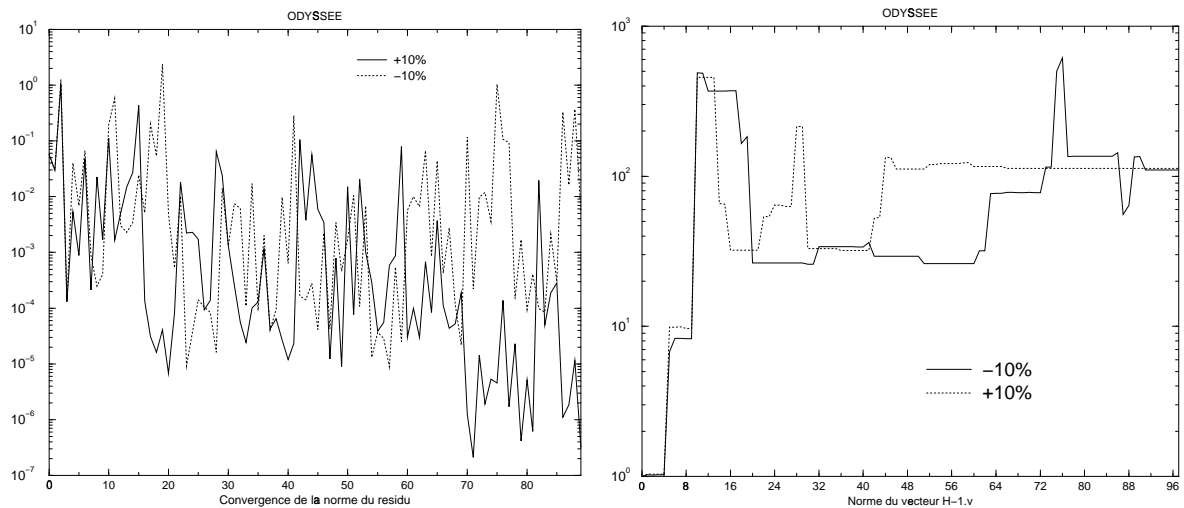


FIG. 4.17 – La figure de gauche représente la convergence de la norme du résidu en fonction des itérations; celle de droite la norme du vecteur la sensibilité : *données analytiques distribuées toutes les 60 secondes*

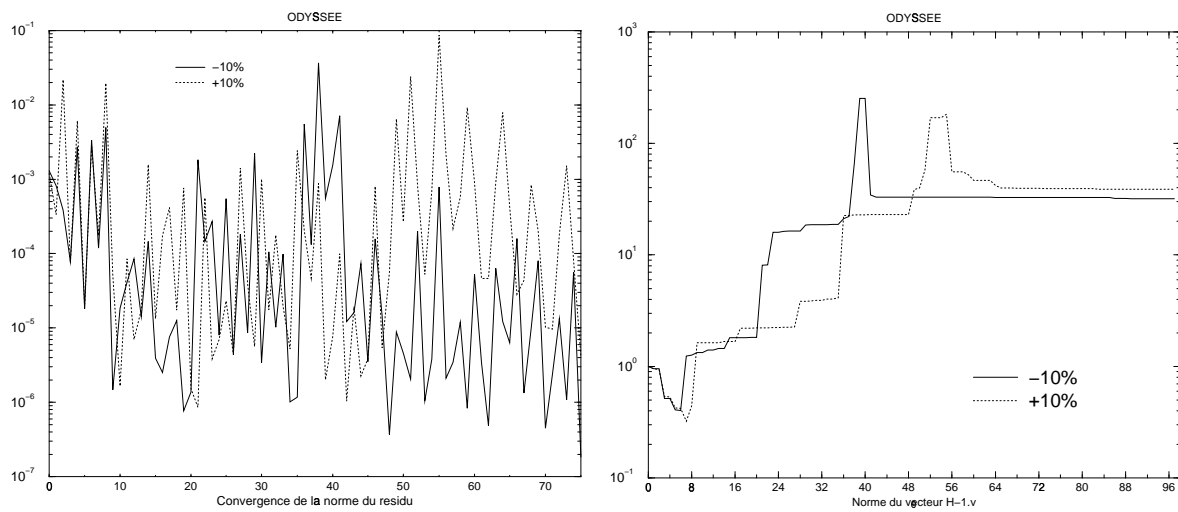


FIG. 4.18 – La figure de gauche représente la convergence de la norme du résidu en fonction des itérations; celle de droite la norme du vecteur la sensibilité : *données analytiques distribuées toutes les 300 secondes*

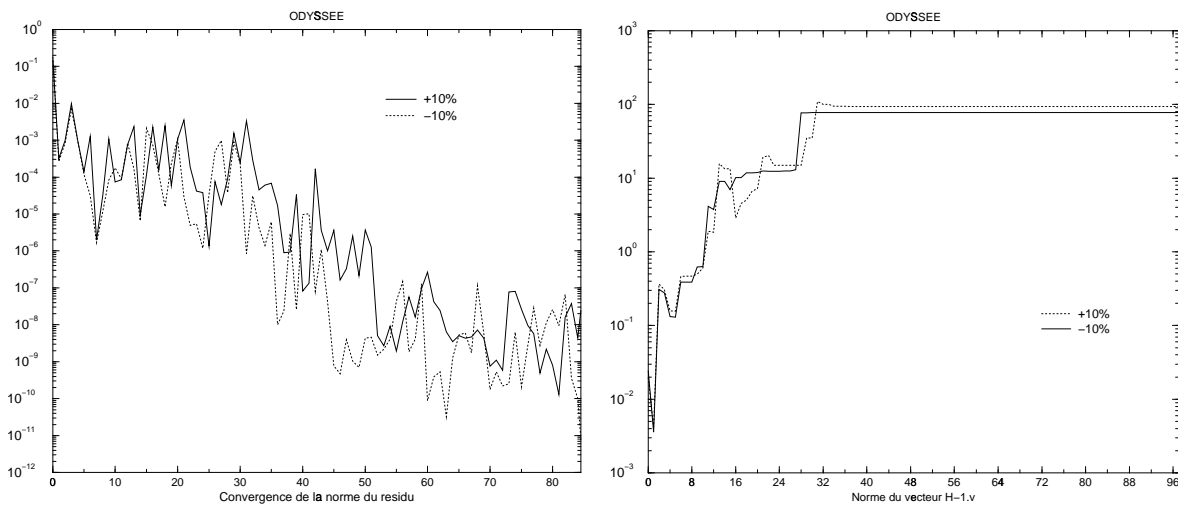


FIG. 4.19 – La figure de gauche représente la convergence de la norme du résidu en fonction des itérations; celle de droite la norme du vecteur la sensibilité : *données analytiques distribuées toutes les 720 secondes*

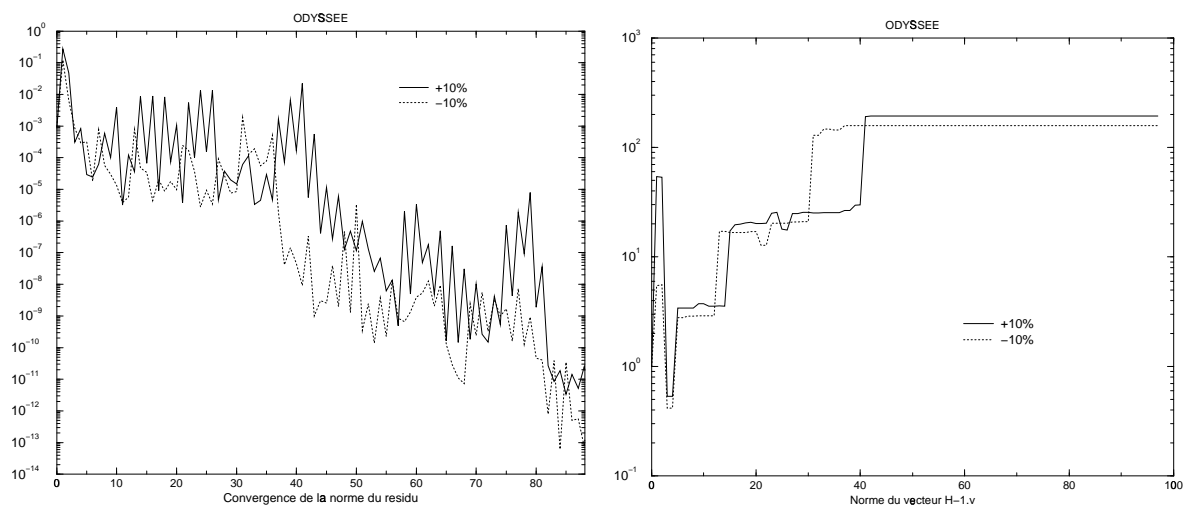


FIG. 4.20 – La figure de gauche représente la convergence de la norme du résidu en fonction des itérations ; celle de droite la norme du vecteur la sensibilité : *données de terrain*

Commentaires

Rappelons que l'évaluation de la sensibilité se fait en intégrant le modèle linéaire tangent avec les paramètres issus du processus d'inversion du Hessien.

Il ressort des différents graphes ci-dessus, que les incertitudes sur les observations que ce soit sur la capacité spécifique moyenne ou sur la conductivité hydraulique moyenne ont une influence sur la sensibilité. En effet l'évolution de la norme de la sensibilité pour une perturbation de +10% sur les observations est supérieure à la norme de la sensibilité pour une perturbation de -10% sur les observations. Nous retrouvons ici une confirmation des résultats du chapitre 3. D'où l'importance en assimilation variationnelle de disposer de données fiables afin d'espérer réaliser une bonne identification.

Les résultats mis en avant dans ce chapitre en utilisant le différentieur *Odyssee* sont assez satisfaisants. Cependant, ils sont à prendre sous certaines considérations, en effet, les expériences comparatives (différences finies et utilisation de *Odyssee*) réalisées dans [71] pour résoudre une équation aux dérivées partielles (équation de Navier-stokes sous forme conservative) en utilisant l'algorithme de Newton, montrent que les résultats dépendent en partie du schéma numérique utilisé. *Odyssee* produit de façon générale de bien meilleurs résultats. Nous avons aussi de [31] que l'utilisation de *Odyssee* (en comparaison avec les différences finies) donne plus de chiffres significatifs en double précision.

4.7 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre, les différents principes de la différentiation automatique suivie d'une application sur le différentiateur *Odyssee* pour dériver l'analyse au premier et au second ordre sur notre modèle d'écoulement en zone non-saturée.

Nous avons bénéficié dans notre contexte du fait que notre modèle direct est de taille réduite. En effet, bien que l'utilisation de `Odyssée` soit assez aisée, on ne doit pas perdre de vue que les codes générés dûs aux différentes sauvegardes dont ce différentiateur a besoin afin de mettre à jour les différentes dérivées, sont de taille considérable. Ces différentes sauvegardes alourdissent les codes dérivés et on doit faire face à un encombrement mémoire. Nous avons pu constater dans notre application, `Odyssée` nécessite trois fois plus d'espace mémoire. Son utilisation pour les codes industriels généralement très volumineux devrait prendre en compte la sauvegarde des trajectoires sur fichier préconisée dans [8].

Chapitre 5

Méthode de Newton en assimilation de données

Plan du chapitre

5.1	Introduction	165
5.2	Présentation de la méthode de Newton	166
5.3	Méthode de Newton	167
5.4	Problème d'assimilation de données linéaire à chaque étape	168
5.5	Convergence de la méthode de Newton	169
5.6	Méthode de Newton pour résoudre $\nabla J(u) = 0$	171
5.7	Méthode de Newton pour $\nabla J(u) = 0$: convergence	172
5.8	Étude d'un exemple d'application	175
5.8.1	Application de la méthode de Newton sur un exemple	176
5.8.2	Justification du choix du modèle	178
5.9	Résultats numériques	179
5.9.1	Evolution de l'état en fonction de la condition initiale optimale au cours des itérations de Newton	181
5.9.2	Evolution du modèle adjoint en fonction de la condition initiale optimale au cours des itérations de Newton	185
5.9.3	Evolution de l'état et du modèle adjoint au cours des itérations de Newton	189
5.9.4	Résultats numériques pour la résolution de $\nabla J(u) = 0$	191
5.10	Conclusion	198

5.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons une autre approche pour résoudre le problème d'identification. Cette approche est basée sur l'algorithme de Newton. La formulation du problème d'identification présentée dans les chapitres antérieurs est réduite à

l'assimilation de la condition initiale uniquement. Ce choix est guidé par la fortes non-linéarité du modèle considéré dans les chapitres antérieurs du point de vue contrôle des paramètres hydrodynamiques. Et par conséquence apparaît, la grande difficulté non seulement de formuler les équations mais également de caractériser les résultats de convergence dans la méthode de Newton.

Ce chapitre est organisé de la façon suivante : nous présentons la méthode de Newton ainsi que les résultats de convergence. Ensuite, nous étudierons sa faisabilité sur un modèle scalaire simple, le but étant de retrouver le paramètre apparaissant dans l'opérateur $F \left(\frac{dX}{dt} = F(X, K) \equiv K.X \right)$ afin de justifier le choix de cette reformulation.

En se servant de ce qui a été fait dans les chapitres précédents, nous appliquerons la méthode de Newton sur notre modèle hydrologique d'infiltration en zone non-saturée. Ceci, en utilisant des valeurs du vecteur de paramètre optimal obtenues au cours des précédentes optimisations, le problème de contrôle se limite à la condition initiale. Ce qui nous conduira à considérer quatre situations correspondant aux différentes distributions temporelles des données. La première étant la situation où les observations sont distribuées à tous les pas de temps, la deuxième toutes les 60 secondes, la troisième toutes les 300 secondes et enfin la dernière toutes les 720 secondes.

5.2 Présentation de la méthode de Newton

Le modèle que nous considérerons se présentera sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = F(X, K_{opt}), & t \in (0, T) \\ X(0) = u \end{cases} \quad (5.1)$$

$X = X(t, u)$ est la fonction inconnue appartenant pour tout temps $t \in [0, T]$ à un espace de Hilbert \mathcal{X} , u est le paramètre de contrôle appartenant à l'ensemble des paramètres admissibles $\mathcal{U}_{ad} \subset \mathcal{X}$ qui est également un espace de Hilbert. F est un opérateur non-linéaire de $\mathcal{X} \times \mathcal{K}_{ad}$ dans \mathcal{X} . On pose $Y = L_2(0, T; \mathcal{X})$; $(\cdot, \cdot)_{L_2(0, T; \mathcal{X})} = (\cdot, \cdot)$, $\|\cdot\| = (\cdot, \cdot)^{\frac{1}{2}}$ produit scalaire et norme dans l'espace Y . Il est à noter ici que le paramètre $K_{opt} \in \mathcal{K}_{ad}$ sera fixé selon la configuration temporelle des données choisie. Ainsi, l'opérateur non-linéaire F peut être considéré comme étant de \mathcal{X} dans \mathcal{X} . Dans ce cas, l'équation (5.1) peut se mettre sous la forme :

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = F(X, K_{opt}) \equiv F(X), & t \in (0, T) \\ X(0) = u \end{cases} \quad (5.2)$$

On introduit la fonction coût

$$J(u) = \frac{\alpha}{2} \|u - u_{obs}\|_{\mathcal{U}_{ad}}^2 + \frac{1}{2} \int_0^T \|C.X - X_{obs}\|_{Y_{obs}}^2 dt \quad (5.3)$$

où $\alpha \geq 0$ est une constante, $u_{obs} \in \mathcal{U}_{ad}$ représente une observation de la condition initiale u et $X_{obs} \in Y_{obs}$ représente le vecteur d'observation, Y_{obs} étant un sous espace

de $Y, C : Y \rightarrow Y_{obs}$ est un opérateur linéaire.

On considère le problème d'assimilation de données (pour K_{opt} donné) afin d'identifier la condition initiale u suivant, déterminer :

X et u tels que :

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = F(X), & t \in (0, T), \\ X(0) = u, \\ J(u) = \inf_{\tau \in \mathcal{U}_{ad}} J(\tau). \end{cases} \quad (5.4)$$

La condition nécessaire d'optimalité conduit au système suivant

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = F(X), & t \in (0, T), \\ X(0) = u, \end{cases} \quad (5.5)$$

$$\begin{cases} \frac{dP}{dt} + [F'(X)]^T \cdot P = C^T (C \cdot X - X_{obs}), & t \in (0, T), \\ P(T) = 0, \end{cases} \quad (5.6)$$

$$\nabla J(u) = \alpha(u - u_{obs}) - P(0) = 0, \quad (5.7)$$

avec comme inconnues $X, P,$ et u

En supposant que la solution au problème (5.5)-(5.7) existe, nous allons considérer à présent la méthode de Newton pour sa résolution.

5.3 Méthode de Newton

Le système (5.5)-(5.7), avec les 3 inconnues X, P, u peut être formulé en terme d'opérateur de la forme :

$$\mathcal{F}(U) = 0, \quad (5.8)$$

où $U = (X, P, u)$.

L'implémentation de la méthode de Newton nécessite le calcul de la dérivée $\mathcal{F}'(U)$ de l'opérateur \mathcal{F} au point U .

L'algorithme de Newton pour résoudre le problème,

$$U_{n+1} = U_n - [\mathcal{F}'(U_n)]^{-1} \cdot \mathcal{F}(U_n), \quad \text{où } U_n = (X_n, P_n, u_n), \quad (5.9)$$

se décompose en 2 étapes :

- 1 Chercher $V_n = [\mathcal{F}'(U_n)]^{-1} \cdot \mathcal{F}(U_n)$ comme solution du problème $[\mathcal{F}'(U_n)] \cdot V_n = \mathcal{F}(U_n)$. $V_n = (\bar{X}_n, \bar{P}_n, \bar{u}_n)$ est solution de :

$$\begin{cases} \frac{d\bar{X}_n}{dt} - [F'(X_n)] \cdot \bar{X}_n = \frac{dX_n}{dt} - F(X_n) \\ \bar{X}_n(0) - \bar{u}_n = X_n - u_n \end{cases} \quad (5.10)$$

$$\begin{cases} \frac{d\bar{P}_n}{dt} + [F'(X_n)]^T \cdot \bar{P}_n + [F''(X_n) \cdot \bar{X}_n]^T P_n - C^T \cdot C \cdot \bar{X}_n \\ = \frac{dP_n}{dt} + [F'(X_n)]^T \cdot P_n - C^T (C \cdot X_n - X_{obs}) \\ \bar{P}_n(T) = P_n(T) \end{cases} \quad (5.11)$$

$$\alpha \bar{u}_n - \bar{P}_n(0) = \alpha (u_n - u_{obs}) - P_n(0) \quad (5.12)$$

- 2 et ensuite poser $U_{n+1} = U_n - V_n$ soit,

$$X_{n+1} = X_n - \bar{X}_n, \quad P_{n+1} = P_n - \bar{P}_n, \quad u_{n+1} = u_n - \bar{u}_n \quad (5.13)$$

Comme $U_{n+1} = U_n - V_n$, les équations (5.10), (5.11) et (5.12) peuvent être reformulées de la façon suivante : pour X_n, P_n, u_n , chercher $X_{n+1}, P_{n+1}, u_{n+1}$ tels que

$$\begin{cases} \frac{dX_{n+1}}{dt} - [F'(X_n)] \cdot X_{n+1} = F(X_n) - [F'(X_n)] \cdot X_n \\ X_{n+1}(0) = u_{n+1} \end{cases} \quad (5.14)$$

$$\begin{cases} \frac{dP_{n+1}}{dt} + [F'(X_n)]^T \cdot P_{n+1} = -[F''(X_n) \cdot (X_{n+1} - X_n)]^T P_n \\ + C^T (C \cdot X_{n+1} - X_{obs}) \\ P_{n+1}(T) = 0 \end{cases} \quad (5.15)$$

$$\alpha (u_{n+1} - u_{obs}) - P_{n+1}(0) = 0 \quad (5.16)$$

5.4 Problème d'assimilation de données linéaire à chaque étape

Pour n fixé, le problème (5.14)-(5.16) peut être vu comme un problème d'assimilation de données linéaire. En effet, c'est le système d'optimalité associé au problème de minimisation suivant : chercher \tilde{X}, \tilde{u} tels que :

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{X}}{dt} - [F'(X_n)] \cdot \tilde{X} = \tilde{f}, \quad t \in (0, T) \\ \tilde{X}(0) = \tilde{u} \\ J_n(\tilde{u}) = \inf_{v \in \mathcal{X}} J_n(v) \end{cases} \quad (5.17)$$

où $\tilde{f} = F(X_n) - [F'(X_n)] \cdot X_n$.

avec comme fonctionnelle coût

$$J_n(\tilde{u}) = \frac{\alpha}{2} \|\tilde{u} - u_{obs}\|_{\mathcal{X}}^2 + \frac{1}{2} \int_0^T \|C\tilde{X} - X_{obs}\|_{\mathcal{X}}^2 dt - \frac{1}{2} \int_0^T (P_n, [F''(X_n) \cdot (\tilde{X} - X_n)] (\tilde{X} - X_n))_{\mathcal{X}} dt \quad (5.18)$$

Le Hessien H_n du problème linéaire (5.17) est défini en résolvant successivement :

$$\begin{cases} \frac{dR}{dt} - [F'(X_n)] \cdot R = 0, & t \in [0, T] \\ R(0) = u \end{cases} \quad (5.19)$$

$$\begin{cases} \frac{dQ}{dt} + [F'(X_n)]^T \cdot Q = -[F''(X_n) \cdot R]^T P_n - C^T C \cdot R \\ Q(T) = 0 \end{cases} \quad (5.20)$$

$$H_n v = \alpha v - Q(0) \quad (5.21)$$

Ainsi, si la méthode Newton est convergente, et que $X_n \rightarrow X$, $P_n \rightarrow P$, $u_n \rightarrow u$, alors $H_n \rightarrow H(u)$ quand $n \rightarrow +\infty$, où $H(u)$ est le Hessien de la fonctionnelle coût initiale $J(u)$ au point u .

Le Hessien H_n est symétrique. De plus,

$$\begin{aligned} (H_n v, v)_{\mathcal{X}} &= (\alpha v - Q(0), v)_{\mathcal{X}} = \alpha(v, v)_{\mathcal{X}} - (Q(0), v)_{\mathcal{X}} \\ &= \alpha(v, v)_{\mathcal{X}} - (Q, [F''(X_n) \cdot R]^T P_n - C^T C \cdot R) \\ &= \alpha(v, v)_{\mathcal{X}} + (CR, CR) - ([F''(X_n) \cdot R] R, P) \end{aligned}$$

Ainsi, dans le cas où l'opérateur $C = I_{\mathcal{X}}$ (opérateur identité de \mathcal{X}) et sous la condition

$$\|[F''(X_n) \cdot Q]\| \|P_n\| \leq 1 \quad (5.22)$$

l'opérateur H_n est défini positif pour $\alpha > 0$:

$$(H_n v, v)_{\mathcal{X}} \geq \alpha(v, v)_{\mathcal{X}}, \quad (5.23)$$

donc le problème linéaire (5.17) possède une unique solution \tilde{u} , laquelle fournit un minimum à la fonctionnelle $J_n(\tilde{u})$ définie par (5.18). La condition (5.22) doit être vérifiée à chaque étape du processus itératif.

5.5 Convergence de la méthode de Newton

Fixons $X_0 \in Y$, un nombre réel $R \in \mathbb{R}_+^*$ et considérons la boule $S_R(X_0) = \{X \in Y : \|X - X_0\| \leq R\}$. Nous supposons que le problème initial vérifie les conditions suivantes pour tout $X \in S_R(X_0)$:

1 La solution du problème

$$\begin{cases} \frac{d\varphi}{dt} - [F'(X)] \cdot \varphi = f, & t \in [0, T] \\ \varphi(0) = v \end{cases}$$

satisfait à l'inégalité

$$\|\varphi\| \leq c_1 (\|f\| + \|v\|_{\mathcal{X}}) \quad (5.24)$$

2 La solution du problème adjoint

$$\begin{cases} -\frac{d\phi}{dt} - [F'(X)]^T \cdot \phi = d \\ \phi(T) = g \end{cases}$$

vérifie

$$\|\phi\| + \|\phi(0)\|_{\mathcal{X}} \leq c_1^* (\|d\| + \|g\|_{\mathcal{X}}), \quad c_1^* = c_1^*(R, X_0) > 0; \quad (5.25)$$

3 L'opérateur F est trois fois continuellement Fréchet-différentiable et vérifie :

$$\|F''(X)\| \leq c_2, \quad c_2 = c_2(R, X_0) > 0 \quad \forall X, \quad (5.26)$$

$$\|F'''(X)\| \leq c_3, \quad c_3 = c_3(R, X_0) > 0 \quad \forall X. \quad (5.27)$$

Sous l'hypothèse d'observation complète, c'est-à-dire $C = I_{\mathcal{X}}$ nous avons les résultats de convergence de la méthode de Newton ci-dessous.

Théorème 5.1 Soient $u_0 \in X$, $X_0 \in Y$, $R > 0$, et

$$B\eta \left(1 + B(c_2 + c_3 r) \frac{r}{2}\right) \leq \frac{1}{2}, \quad (5.28)$$

où

$$\eta = \left\| \frac{\partial X_0}{\partial t} \right\| + \|X_0(0) - u_0\| + \|X_0(0) - X_{obs}\| + \alpha \|u_0 - u_{obs}\|,$$

$$B = \text{Max} \left(\alpha^{-1} (2c_1 c_1^* + 2c_1^2 c_1^* + 4c_1^2 c_1^2) + c_1 + 2c_1 c_1^*, \alpha^{-1} (c_1^* + c_1 c_1^* + 2c_1 c_1^{2*}) + 4c_1^*, \alpha^{-1} (1 + c_1 + 2c_1 c_1^*) \right).$$

Alors le système (5.17) possède une unique solution X , P , u dans la boule S_r . Avec comme point de départ X_0 , P_0 , u_0 , la méthode de Newton converge vers X , P , u . De plus, on a l'estimation suivante sur le taux de convergence :

$$\|X - X_n\| + \|P - P_n\| + \|u - u_n\|_{\mathcal{X}} \leq B\eta \frac{\left(\frac{h}{2}\right)^{2^n - 1}}{1 - \left(\frac{h}{2}\right)^{2^n}} \quad (5.29)$$

où $h = B^2 \eta (c_2 + c_3 r) < 2$.

Théorème 5.2 *Si les hypothèses (5.24)-(5.27) sont satisfaites et si une approximation X_0, P_0, u_0 est choisie de sorte que le Hessien H_0 défini par (5.19)-(5.21) pour $n = 0$ soit défini positif. Alors si*

$$h = B^2 K \eta \leq \frac{1}{2} \tag{5.30}$$

et

$$R \geq R_0 = \frac{1 - \sqrt{1 - 2h}}{h} B \eta, \tag{5.31}$$

le système possède une solution $(X, P, u) \in S_R$ pour laquelle la méthode de Newton converge.

Le taux de convergence est défini par la formule :

$$\|X - X_n\| + \|P - P_n\| + \|u - u_n\|_X \leq \frac{1}{2^n} (2h)^{2^n} \frac{B \eta}{h}, \tag{5.32}$$

où la constante B dépend de la valeur propre minimale λ_{min} du Hessien H_0 .

De plus, si pour $h < \frac{1}{2}$ on a

$$R < R_1 = \frac{1 - \sqrt{1 - 2h}}{h} B \eta$$

et pour $h \leq \frac{1}{2}$

$$R \leq R_1$$

Alors la solution (X, P, u) est unique dans la boule S_R

La démonstration de ces deux théorèmes est fournie par Le Dimet et Shutyaev [27] Nous allons dans le paragraphe suivant, appliquer la méthode de Newton pour rechercher la condition initiale annulant le gradient de la fonction coût.

5.6 Méthode de Newton pour résoudre $\nabla J(u) = 0$

On considère à présent la méthode de Newton pour résoudre l'équation $\nabla J(u) = 0$ laquelle est équivalente au système d'optimalité (5.5)-(5.7). Nous avons

$$u_{n+1} = u_n - [J''(u_n)]^{-1} \nabla J(u_n). \tag{5.33}$$

Pour implémenter la méthode de Newton, à chaque étape, il est nécessaire de calculer le Hessien ($H = J''$) de la fonctionnelle coût J et de résoudre le système linéaire $J''(u_n)(u_{n+1} - u_n) = \nabla J(u_n)$. En utilisant la définition du Hessien, on constate que la méthode de Newton est constituée des étapes suivantes :

1 Déterminer X_n, P_n en résolvant :

$$\begin{cases} \frac{dX_n}{dt} = F(X_n), & t \in [0, T] \\ X_n(0) = u_n \end{cases} \tag{5.34}$$

$$\begin{cases} \frac{dP_n}{dt} + [F'(X_n)]^T \cdot P_n = C^T (C \cdot X_n - X_{obs}), & t \in [0, T] \\ P_n(T) = 0 \end{cases} \quad (5.35)$$

ensuite évaluer $\nabla J(u_n) = \alpha(u_n - u_{obs}) - P_n(0)$

2 Déterminer $v_n = [J''(u_n)]^{-1} \cdot \nabla J(u_n)$ comme solution du système suivant :

$$\begin{cases} \frac{dR_n}{dt} = [F'(X_n)] \cdot R_n, & t \in [0, T] \\ R_n(0) = v_n \end{cases} \quad (5.36)$$

$$\begin{cases} \frac{dQ_n}{dt} + [F'(X_n)]^T \cdot Q_n = [F''(X_n) R_n]^T \cdot P_n + C^T C \cdot R_n, \\ Q_n(T) = 0 \end{cases} \quad (5.37)$$

$$\alpha v_n - Q_n(0) = H(u_n) v_n = \alpha(u_n - u_{obs}) - P_n(0) \quad (5.38)$$

3 Mettre à jour u_{n+1} en posant :

$$u_{n+1} = u_n - v_n. \quad (5.39)$$

Ainsi, après avoir évalué le Hessien et résolu les équations correspondantes, il faut résoudre à chaque étape le problème de contrôle optimal linéaire de la forme (5.36)-(5.38) par des méthodes appropriées.

5.7 Méthode de Newton pour $\nabla J(u) = 0$: convergence

En supposant les hypothèses (5.24)-(5.27) satisfaites. Nous chercherons la solution de $\nabla J(u_n) = 0$ dans la boule

$$S_r = \{u : \|u - u_0\|_{\mathcal{X}} \leq r\} \quad u_0 \in X, \quad r > 0 \quad (5.40)$$

Soient $u_0 \in \mathcal{X}$, $u \in S_r$ et X_0, X solutions du problème initial non-linéaire (5.2) avec comme condition initiale $X_0(0) = u_0$ et $X(0) = u$. Nous supposons en outre que pour $r > 0$, il existe $R > 0$ tel que

$$\|X - X_0\|_{\mathcal{X}} \leq R. \quad (5.41)$$

En introduisant les notations suivantes :

$$\begin{aligned} \eta &= \|\nabla J(u_0)\|_{\mathcal{X}}, \quad K = c_1^2 c_1^* \{2c_1^* c_2 (c_2 \beta + \|C^* C\|) + c_3 \beta + c_1 c_2 \|C^* C\|\}, \\ \beta &= c_1^* \|C^* C\| R + c_1^* \|C^* (C X_0 - \widehat{X})\|, \end{aligned} \quad (5.42)$$

où les constantes c_i , c_1^* sont définies dans le paragraphe (5.5) par les hypothèses (5.24)-(5.27), nous avons le résultat suivant :

Théorème 5.3 Soit $u_0 \in \mathcal{X}$ tel que le Hessien $H(u_0) = J''(u_0)$ soit défini positif avec la valeur propre minimale $\lambda_{min} > 0$. Alors si

$$h = \frac{K\eta}{\lambda_{min}^2} \leq \frac{1}{2}, \quad (5.43)$$

et

$$r \geq r_0 = \frac{1 - \sqrt{1 - 2h}}{h} \frac{\eta}{\lambda_{min}}, \quad (5.44)$$

L'équation $\nabla J(u) = 0$ possède une solution $u \in S_r$ pour laquelle la méthode de Newton converge.

Le taux de convergence est défini par la formule :

$$\|u - u_n\|_{\mathcal{X}} \leq \frac{2h^{2^n}}{2^n} \frac{\eta}{h\lambda_{min}} \quad (5.45)$$

Pour prouver la convergence de la méthode de Newton, il faut nécessairement étudier la dérivée troisième $J'''(u)$ de la fonction coût J . En différentiant le Hessien $J''(u)$ par rapport à u on trouve que pour $v, w \in \mathcal{X}$ l'élément, $J'''(u)vw$ est défini en résolvant successivement les équations suivantes :

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = F(X), & t \in [0, T] \\ X(0) = u \end{cases} \quad (5.46)$$

$$\begin{cases} \frac{dP}{dt} + [F'(X)]^T \cdot P = C^T (C \cdot X - \widehat{X}), & t \in [0, T] \\ P_n(T) = 0 \end{cases} \quad (5.47)$$

$$\begin{cases} \frac{dR}{dt} = [F'(X)] \cdot R, & t \in [0, T] \\ R(0) = v \end{cases} \quad (5.48)$$

$$\begin{cases} \frac{dQ}{dt} + [F'(X)]^T \cdot Q = -[F''(X) R]^T \cdot P + C^T C \cdot R, \\ Q(T) = 0 \end{cases} \quad (5.49)$$

$$\begin{cases} \frac{dR_1}{dt} = [F'(X)] \cdot R_1, & t \in [0, T] \\ R_1(0) = w \end{cases} \quad (5.50)$$

$$\begin{cases} \frac{dQ_1}{dt} + [F'(X)]^T \cdot Q_1 = -[F''(X) R_1]^T \cdot P + C^T C \cdot R_1, \\ Q_1(T) = 0 \end{cases} \quad (5.51)$$

$$\begin{cases} \frac{dR_2}{dt} = [F'(X)] \cdot R_2 + [F''(X) R_1] \cdot Q, & t \in [0, T] \\ R_2(0) = w \end{cases} \quad (5.52)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dQ_2}{dt} + [F'(X)]^T \cdot Q_2 = -[F''(X) R_1]^T \cdot Q - [F''(X) R]^T \cdot Q_1 \\ \quad \quad \quad - [F'''(X) R_1 R]^T \cdot P + C^T C \cdot R_2, \\ Q_2(T) = 0 \end{array} \right. \quad (5.53)$$

$$[J'''(u)] vw = -Q_2(0) \quad (5.54)$$

Lemme 5.1 *Sous les hypothèses (5.24)-(5.27) et (5.41), nous avons la majoration suivante :*

$$\|[J'''](u) vw\|_{\mathcal{X}} \leq K \cdot \|v\|_{\mathcal{X}} \|w\|_{\mathcal{X}} \quad \forall u \in S_r, \quad v, w \in \mathcal{X}, \quad (5.55)$$

où la constante K est définie par (5.42).

Démonstration :

Par définition, nous avons de (5.24)-(5.27), (5.46)- (5.53)

$$\begin{aligned} \|[J'''](u) vw\|_{\mathcal{X}} &= \|Q_2(0)\|_{\mathcal{X}} \leq c_1^* \left\| [F''(X) R_1]^T \cdot Q \right. \\ &\quad \left. + [F''(X) R]^T \cdot Q_1 + [F'''(X) R_1 R]^T \cdot P - C^T C \cdot R_2 \right\| \\ &\leq c_1^* \left(c_2 \|R_1\| \|Q\| + c_2 \|R\| \|Q_1\| + c_3 \|R_1\| \|R\| \|P\| + \|C^T C\| \|R_2\| \right) \\ &\leq c_1^* \left\{ c_1 c_2 \|w\|_{\mathcal{X}} c_1^* \left(c_2 \|R\| \|P\| + \|C^T C\| \|R\| \right) + c_2 \|R\| c_1^* \left(c_2 \|R_1\| \cdot \right. \right. \\ &\quad \left. \|P\| + \|C^T C\| \|R_1\| \right) + c_3 \|R_1\| \|R\| \|P\| + \|C^T C\| c_1 c_2 \|R\| \|R_1\| \left. \right\} \\ &\leq c_1^* \left\{ 2c_1^2 c_2 c_1^* \left(c_2 \|Q\| + \|C^T C\| \right) + c_1^2 \left(c_3 \|P\| + c_1 c_2 \|C^T C\| \right) \right\} \times \\ &\quad \|v\|_{\mathcal{X}} \|w\|_{\mathcal{X}} \end{aligned} \quad (5.56)$$

Comme nous avons de (5.47) et (5.25) :

$$\|P\| \leq c_1^* \|C^T (CX - \widehat{X})\| \leq \beta \quad (5.57)$$

avec β définie par (5.42), ainsi, les relations (5.56) et (5.57) nous permettent d'avoir (5.55) prouvant ainsi le lemme.

Démonstration du théorème 5.3

Soit $u_0 \in X$. Considérant la première étape de la méthode de Newton (5.33), Nous avons le problème :

$$H(u_0) v_0 = \nabla J(u_0). \quad (5.58)$$

D'après les hypothèses, $H(u_0) = J''(u_0)$ est défini positif, alors le problème (5.58) possède une unique solution, de plus nous avons la majoration suivante pour v_0 :

$$\|v_0\|_X \leq \frac{1}{\lambda_{min}} \eta, \quad (5.59)$$

où $\eta = \|\nabla J(u_0)\|_X$ et λ_{min} la valeur propre minimale du Hessien.

Les estimations (5.55) et (5.59) montrent que toutes les hypothèses du théorème de Kantorovitch [102] sont satisfaites. Ainsi, pour $h = \frac{1}{\lambda_{min}^2} K \eta \leq \frac{1}{2}$ la méthode de Newton converge, et la majoration (5.45) sur le taux de convergence est satisfaite.

5.8 Étude d'un exemple d'application

Nous condèrerons dans ce paragraphe, le modèle scalaire simple suivant :

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = K \cdot X & t \in [0, 1] \\ X(0) = X_0 \end{cases} \quad (5.60)$$

l'objectif étant d'identifier le paramètre $K \in \mathbb{R}$ par l'algorithme de Newton.

La fonction coût est

$$J(K) = \frac{\alpha}{2}(K - K_{est})^2 + \frac{1}{2} \int_0^1 (X - X_{obs})^2 dt, \quad (5.61)$$

α étant le paramètre de régularisation, K_{est} une estimation du paramètre K et $X_{obs} = cste$ une observation.

Le système d'optimalité est :

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = KX, & t \in [0, 1] \\ X(0) = X_0 \end{cases} \quad (5.62)$$

$$\begin{cases} \frac{dP}{dt} + K \cdot P = (X - X_{obs}), & t \in [0, 1] \\ P(1) = 0 \end{cases} \quad (5.63)$$

$$\nabla J(K) = \alpha(K - K_{est}) - \int_0^1 X(t) \cdot P(t) dt = 0 \quad (5.64)$$

Soit après résolution :

$$\begin{cases} X(t) = X_0 e^{Kt}, & t \in [0, 1] \\ P(t) = \frac{X_{obs}}{K} [e^{K(1-t)} - 1] + \frac{X_0}{2K} [e^{Kt} - e^{K(2-t)}], & t \in [0, 1] \\ \frac{X_0 X_{obs}}{K^2} e^K (1 - K) + \frac{X_0^2}{(2K)^2} e^{2K} (2K - 1) + \alpha(K - K_{est}) + \frac{X_0}{(2K)^2} [X_0 - 4X_{obs}] = 0 \end{cases} \quad (5.65)$$

5.8.1 Application de la méthode de Newton sur un exemple

Nous appliquons la méthode de Newton décrite au paragraphe 5.3. Elle consiste pour le modèle scalaire simple (5.60) à résoudre pour X_n, P_n, K_n

$$\begin{cases} \frac{dX_{n+1}}{dt} - K_n X_{n+1} = (K_{n+1} - K_n) X_n, & t \in [0, 1] \\ X_{n+1}(0) = X_0 \end{cases} \quad (5.66)$$

$$\begin{cases} \frac{dP_{n+1}}{dt} + K_n P_{n+1} = (K_n - K_{n+1}) P_n + (X_{n+1} - X_{obs}), & t \in [0, 1] \\ P_{n+1}(T) = 0 \end{cases} \quad (5.67)$$

$$\nabla J(K_{n+1}) = \alpha (K_{n+1} - K_{est}) + \int_0^1 [(X_n - X_{n+1}) P_n - X_n P_{n+1}] dt = 0 \quad (5.68)$$

Pour les résultats numériques, les modèles direct et adjoint sont intégrés en utilisant un schéma d'Euler en temps. Nous comparons les résultats obtenus par la méthode d'identification utilisée dans les chapitres antérieurs et ceux obtenus par la méthode de Newton (5.66), (5.67), (5.68). Les valeurs de X_0 , X_{obs} , K_{est} , et α sont fixées à 1, 1, 1 et 0.75 respectivement.

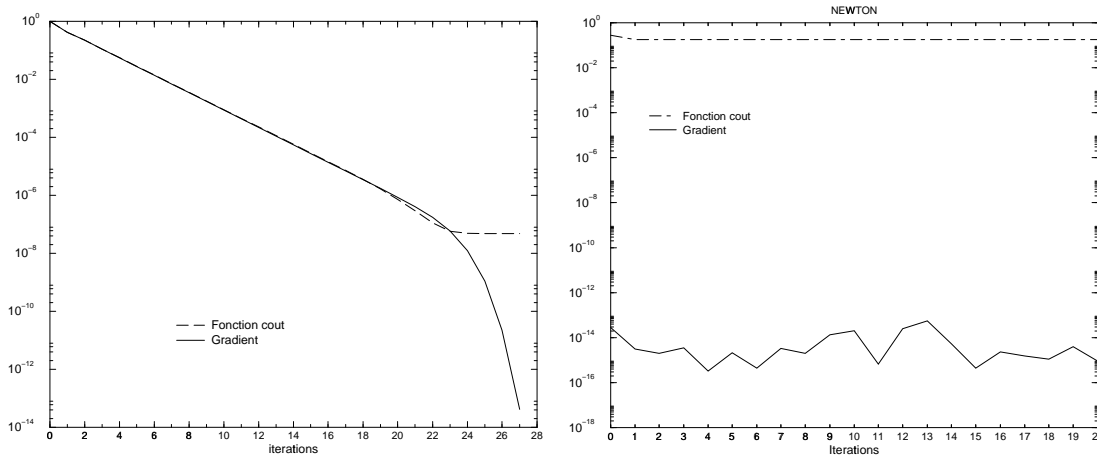


FIG. 5.1 – Evolution de la fonction coût et la norme du gradient au cours du processus d'itérations ; à gauche problème direct (itération classique), à droite au cours des itérations dans la méthode de Newton

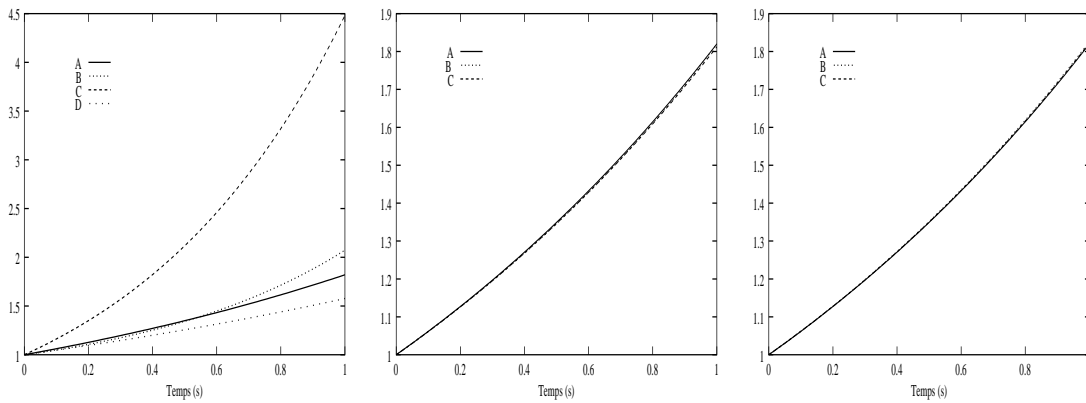


FIG. 5.2 – Evolution de l'état X au cours des itérations : dans la méthode de Newton à gauche 1ère itération, milieu 2ème itération et à droite 3ème itération. La légende A correspond à la courbe intégrée avec $K_{optimal}$ classique, C initialisation de la méthode de Newton, B $K_{optimal}$ obtenu par la méthode de Newton

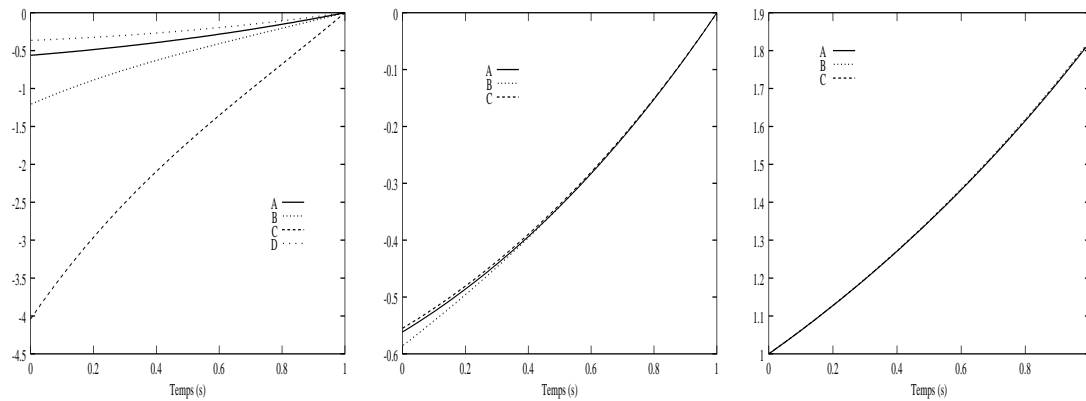


FIG. 5.3 – Evolution de l'état P au cours des itérations : dans la méthode de Newton à gauche 1ère itération, milieu 2ème itération et à droite 3ème itération. La légende A correspond à la courbe intégrée avec $K_{optimal}$ classique, C initialisation de la méthode de Newton, B $K_{optimal}$ obtenu par la méthode de Newton.

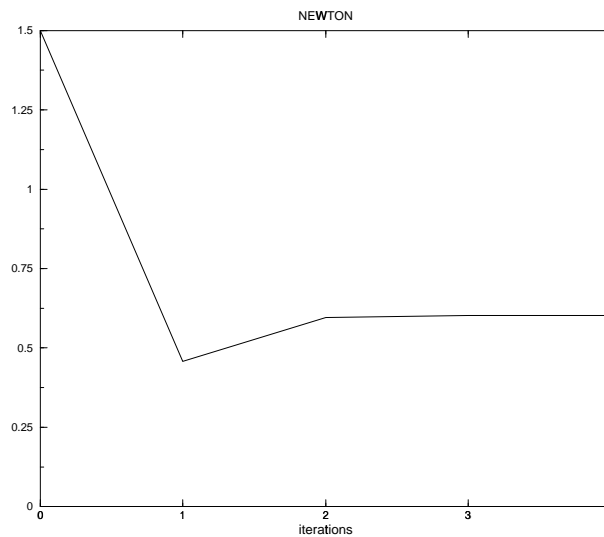


FIG. 5.4 – Paramètre optimal au cours des itérations de Newton

A partir de cet exemple, nous constatons l'influence de la non-linéarité du paramètre à identifier au niveau de la condition d'optimalité, dès lors que ce paramètre se trouve dans l'opérateur F (même si le modèle considéré est linéaire). Ainsi, pour un modèle «non-linéaire», on ne peut espérer une convergence rapide [27].

Remarque 5.1 Si le paramètre de contrôle du modèle (5.60) était réduit à la condition initiale X_0 , la condition initiale optimale, pour une fonction coût définie par

$$J(X_0) = \frac{\alpha}{2}(X_0 - x^0)^2 + \int_0^1 [X(t) - X_{obs}] dt, \text{ serait dans ce cas,}$$

$$\nabla J(X_0) = \alpha(X_0 - x^0) - P(0),$$

soit

$$X_{opt} = \alpha(X_0 - x^0) + \frac{2X_{obs}}{e^K + 1}$$

Nous constatons dans ce cas, la simplicité de l'expression de la condition d'optimalité comparativement à l'expression dans la troisième équation de (5.65).

5.8.2 Justification du choix du modèle

Sur l'exemple décrit au paragraphe 5.8, la phase d'identification du paramètre K en utilisant l'algorithme de minimisation présenté au chapitre 2 se déroule parfaitement, avec notamment une bonne décroissance de la fonction coût (10^{-6}) et de la norme du gradient (10^{-14}) (figure 5.1). L'application de l'algorithme de Newton fait ressortir des variations stationnaires de la fonction coût et de la norme de son gradient au cours des itérations. L'explication est toute simple, en effet le paramètre K apparaissant dans le second membre de l'équation (5.60), le problème de minimisation à résoudre à chaque étape de l'algorithme de Newton est non-linéaire et le résultat de l'identification dépend en partie du paramètre d'initialisation. Sur les courbes des graphes (5.2) et (5.3)

les états direct et adjoint au cours des itérations de Newton, coïncident à la troisième itération. La mise en œuvre de l'algorithme de Newton dans ce cas, nécessite la résolution à chaque étape d'un problème de minimisation non-linéaire.

Si N_c désigne le coût de la résolution du problème de minimisation associé au système d'optimalité (5.65), alors le coût dû à l'application de l'algorithme de Newton sera $N_c \times N_n$, N_n étant le nombre d'itérations (de Newton). On comprend très vite que l'application de l'algorithme de Newton pour un tel modèle est prohibitive. En revanche, si le problème d'assimilation de données est réduit à la recherche de la condition initiale, l'application de l'algorithme de Newton induira à chaque étape un problème de minimisation linéaire, comme le prouvent les résultats du paragraphe 5.4 ou encore la remarque 5.1. On a dans ce cas un problème quadratique et l'algorithme de Newton convergera en une itération.

5.9 Résultats numériques

Des expériences numériques ont été faites avec le modèle d'infiltration souterraine. Les observations (infiltration cumulée) sont simulées par le modèle direct : nous considérerons quatre cas de figures suivant leur distribution temporelle (*cas 1* toutes les données analytiques, *cas 2* discrètes toutes les 60 secondes, *cas 3* discrètes toutes les 300 secondes et *cas 4* discrètes toutes les 720 secondes). Le temps de simulation du modèle direct est de 1 heure, la profondeur de sol considérée de 1 mètre. Les pas de discrétisation sont $\Delta T = 10s$ et $\Delta Z = 1cm$. Le schéma numérique utilisé est le même que dans les chapitres précédents.

Pour les représentations graphiques en dimension trois, nous avons sur l'axe des abscisses la profondeur z et sur l'axe des ordonnées le temps de simulation.

Nous présentons dans un premier temps les résultats numériques du calcul de la condition initiale u_0 optimale qui nous fournira le point de départ dans l'algorithme de Newton. Les variables directe et adjointe initiales X_0 et P_0 sont obtenues en intégrant le modèle direct en prenant comme condition initiale u_0 . Ensuite la condition initiale obtenue au cours des itérations de Newton est utilisée pour intégrer les modèles direct et adjoint. Ensuite, nous présentons quelques cas d'évolution des modèles direct et adjoint au cours des itérations de Newton.

Nous terminerons ces expériences numériques en présentant les tests numériques pour la détermination de la condition initiale annulant le gradient de la fonction coût.

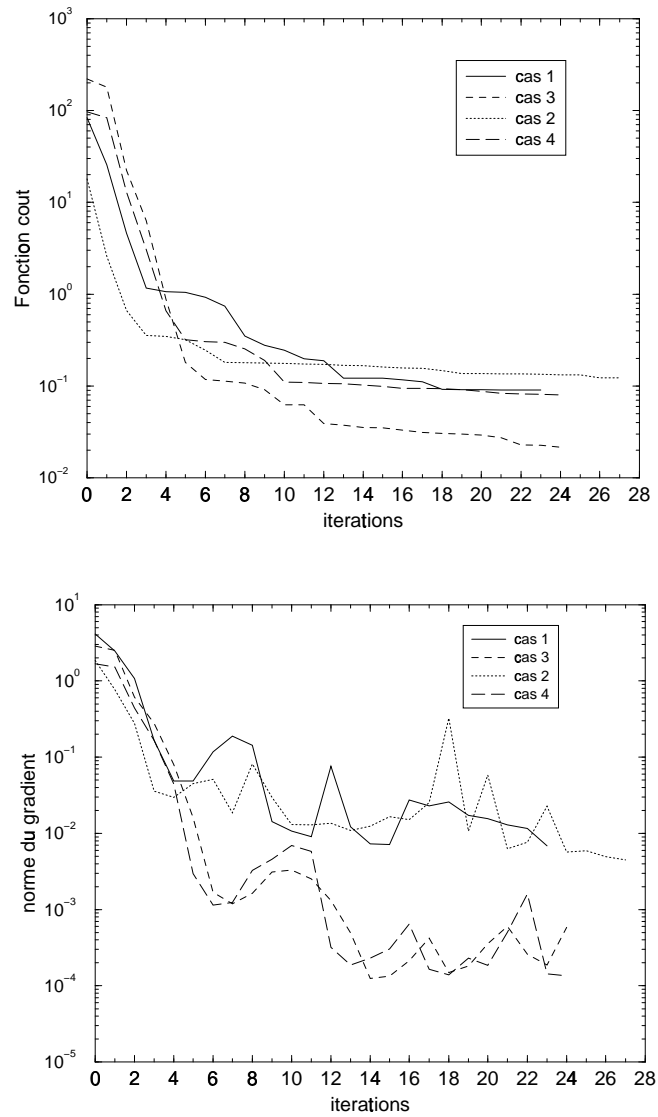


FIG. 5.5 – Fonction coût et norme du gradient au cours des itérations (utilisation de l'algorithme décrit au chapitre 2 paragraphe 2.3.4, page 41)

5.9.1 Evolution de l'état en fonction de la condition initiale optimale au cours des itérations de Newton

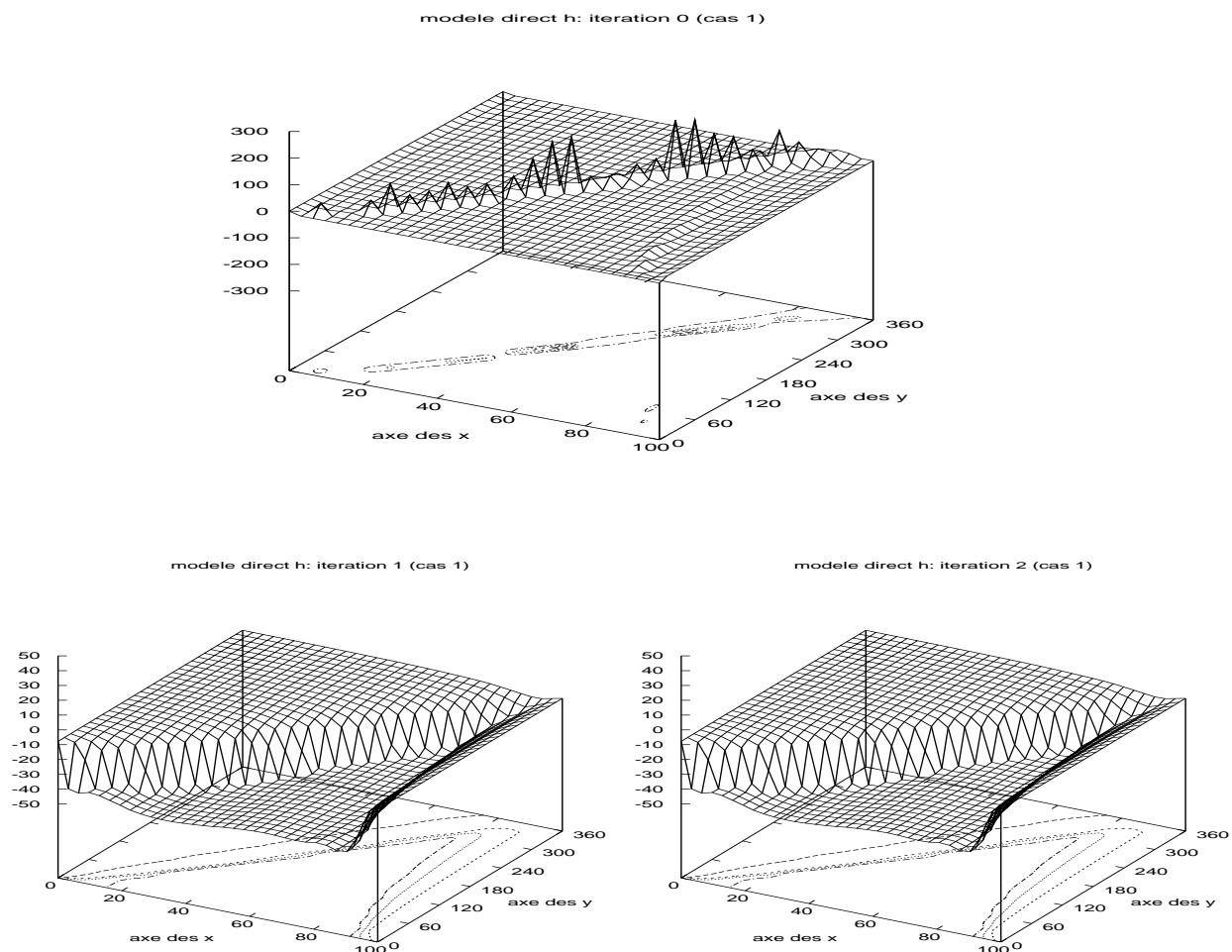


FIG. 5.6 – Etat H en fonction de la condition initiale optimale obtenue au cours des itérations de Newton : au dessus condition initiale de départ, à gauche première itération, à droite deuxième itération (*cas 1*)

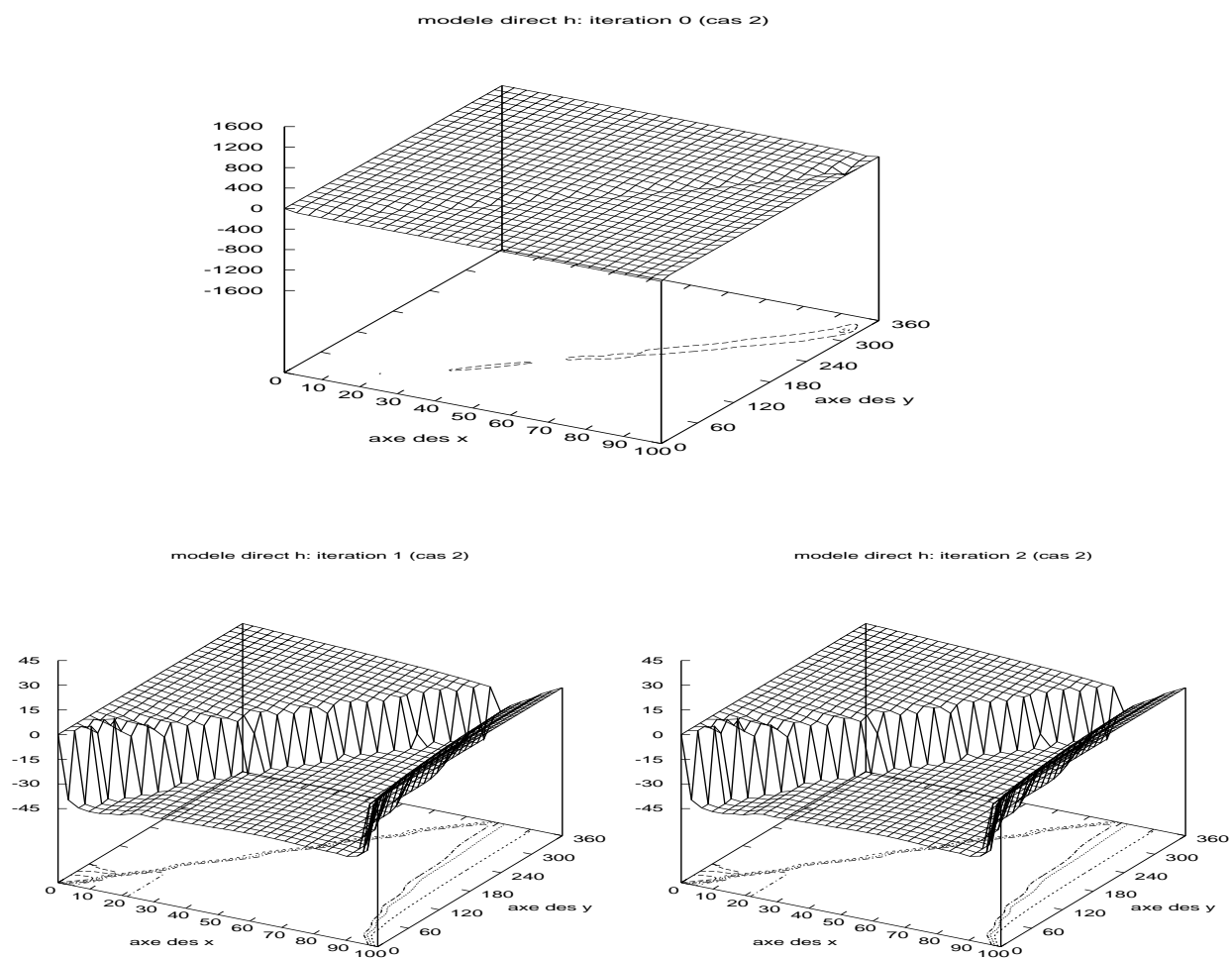


FIG. 5.7 – Etat H en fonction de la condition initiale optimale obtenue au cours des itérations de Newton : au dessus condition initiale de départ, à gauche première itération, à droite deuxième itération (*cas 2*)

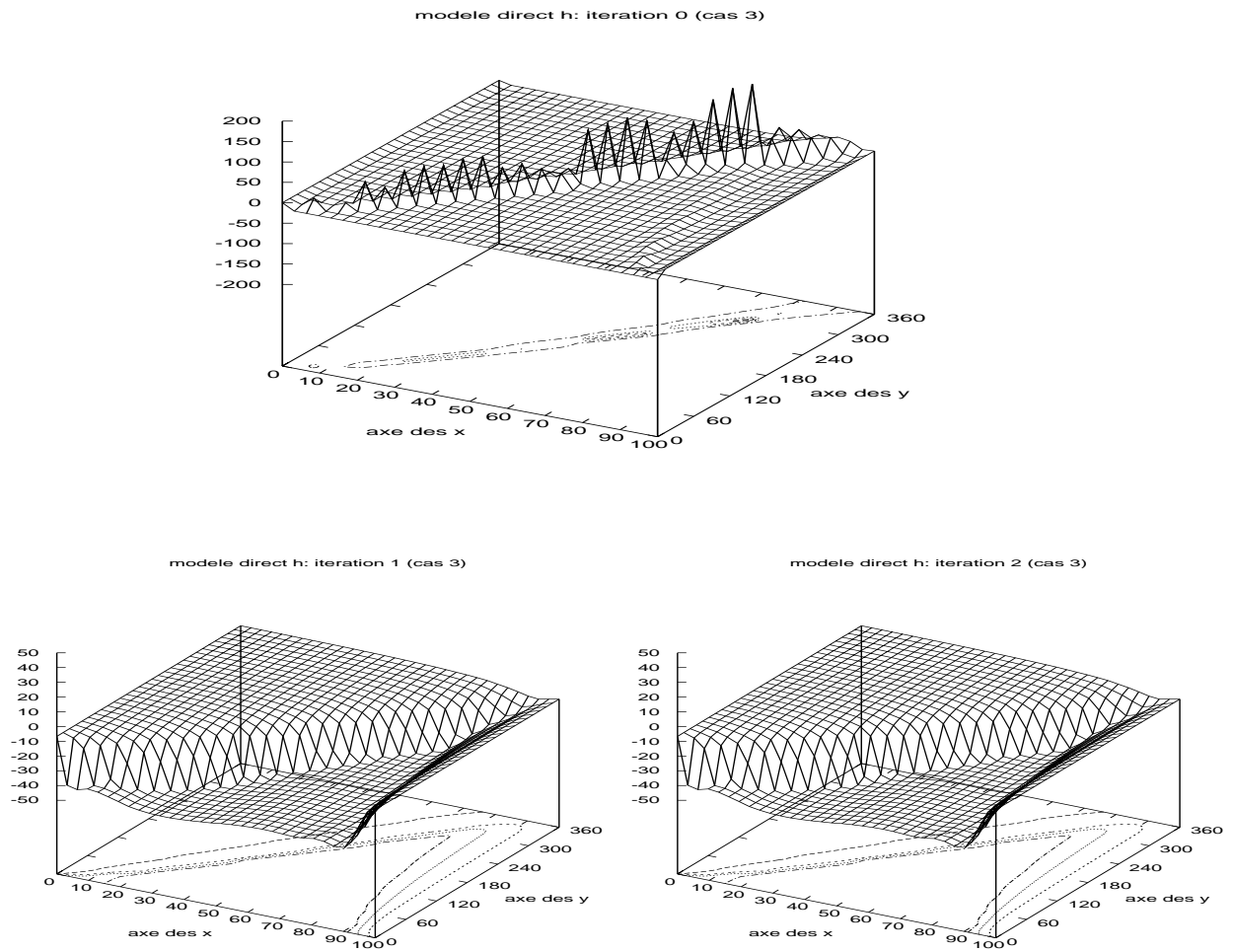


FIG. 5.8 – Etat H en fonction de la condition initiale optimale obtenue au cours des itérations de Newton : au dessus condition initiale de départ, à gauche première itération, à droite deuxième itération (*cas 3*)

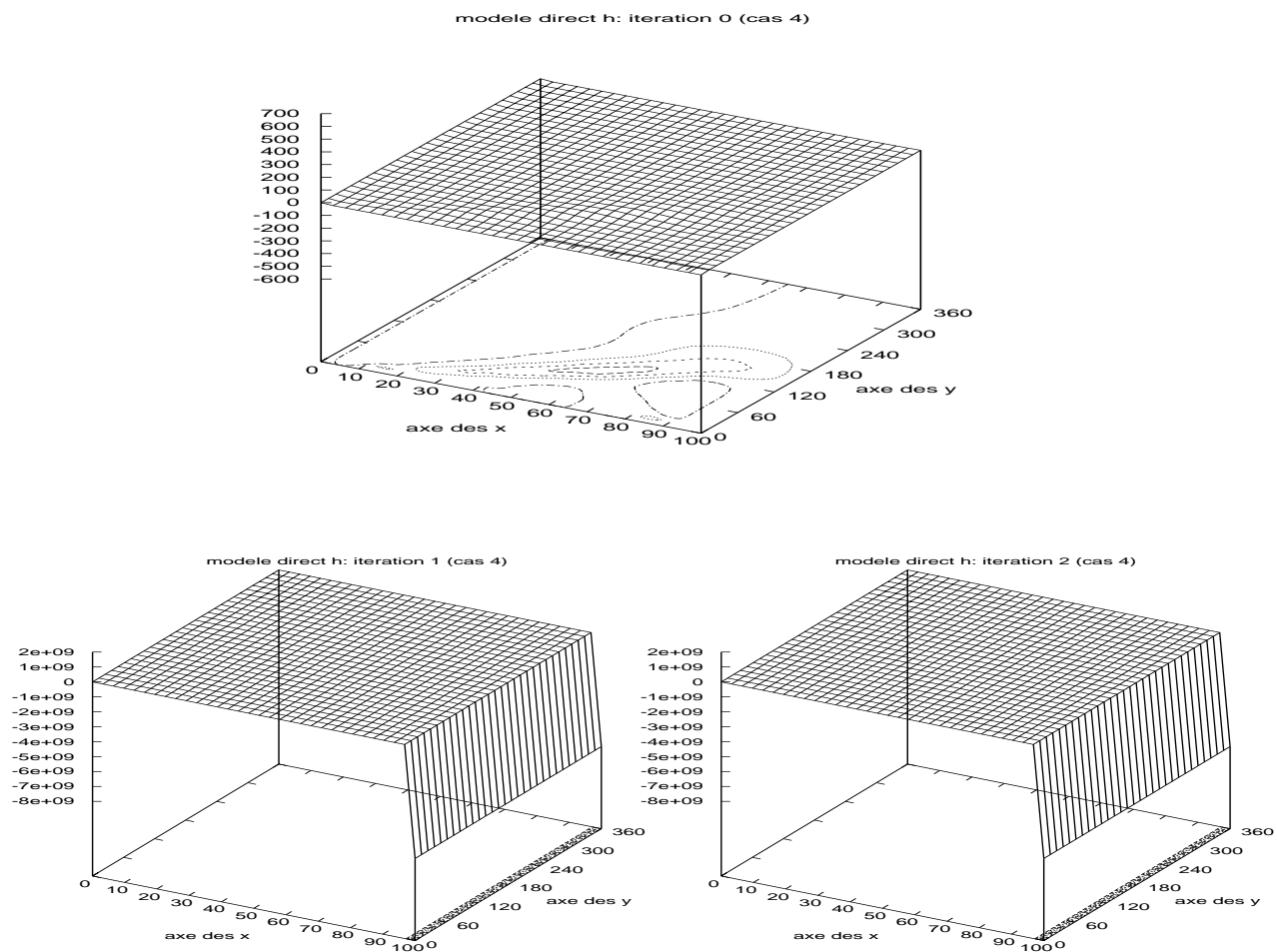


FIG. 5.9 – Etat H en fonction de la condition initiale optimale obtenue au cours des itérations de Newton : au dessus condition initiale de départ, à gauche première itération, à droite deuxième itération (*cas 4*)

5.9.2 Evolution du modèle adjoint en fonction de la condition initiale optimale au cours des itérations de Newton

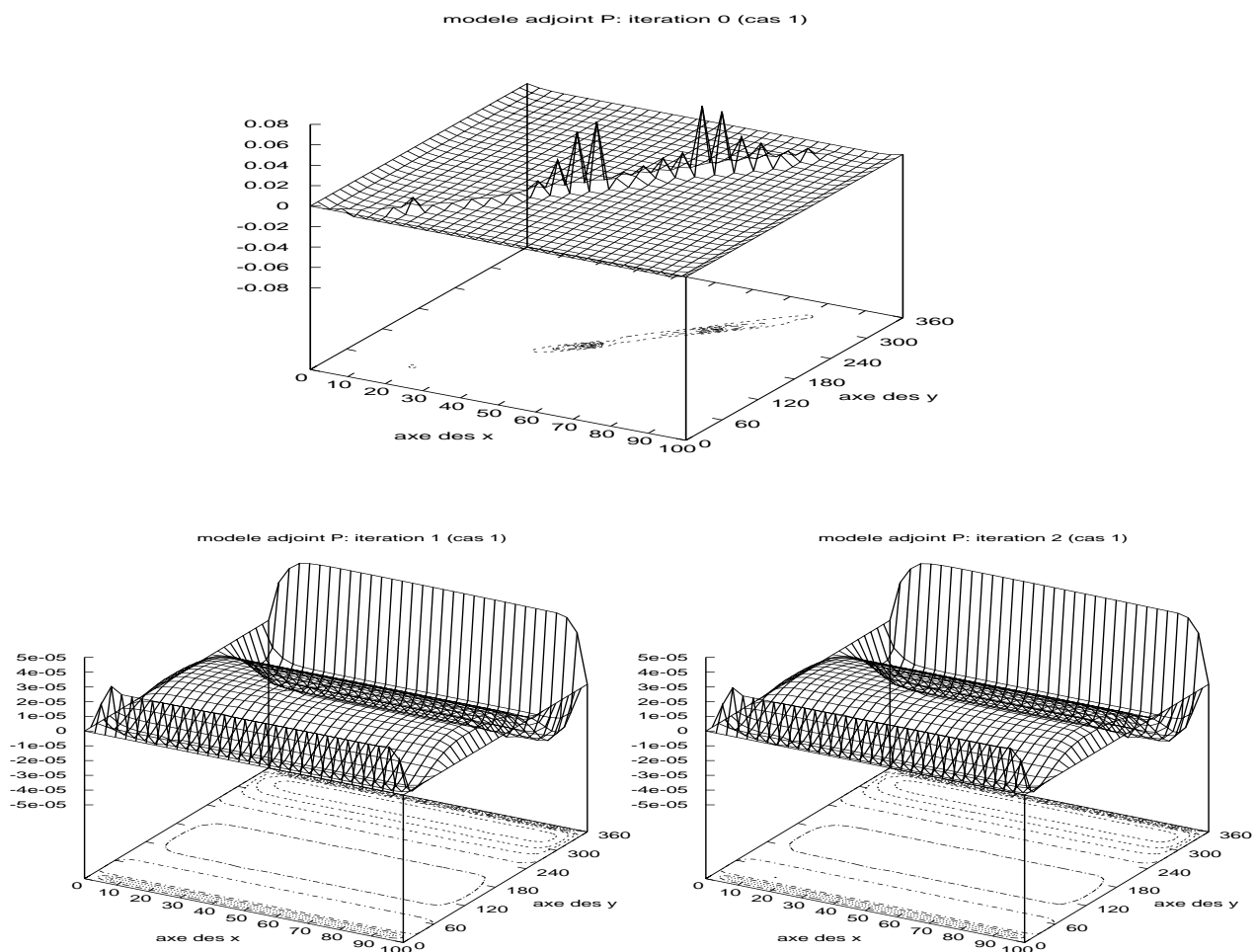


FIG. 5.10 – Adjoint P en fonction de la condition initiale optimale obtenue au cours des itérations de Newton : au dessus condition initiale de départ, à gauche première itération, à droite deuxième itération (*cas 1*)

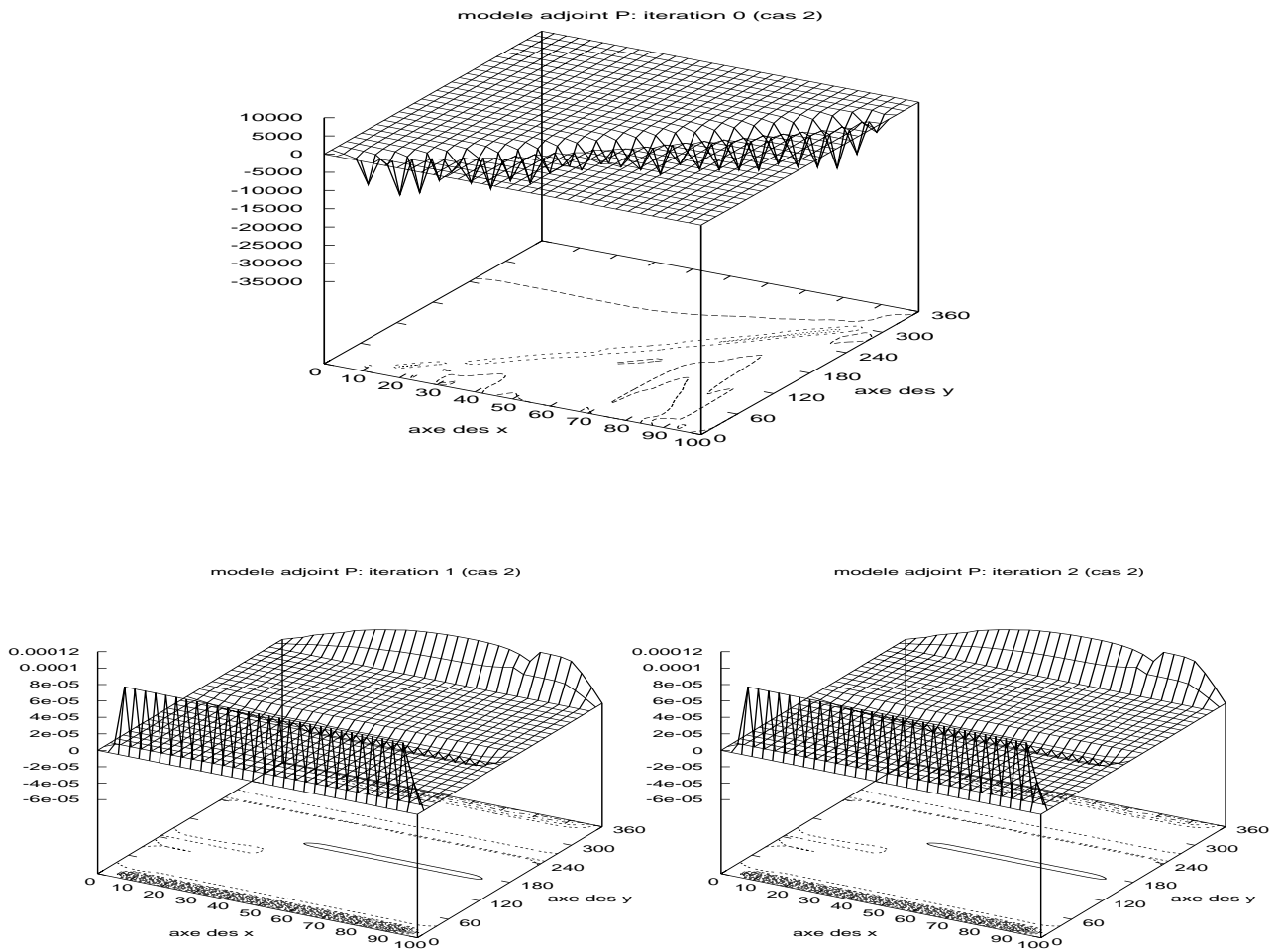


FIG. 5.11 – Adjoint P en fonction de la condition initiale optimale obtenue au cours des itérations de Newton : au dessus condition initiale de départ, à gauche première itération, à droite deuxième itération (*cas 2*)

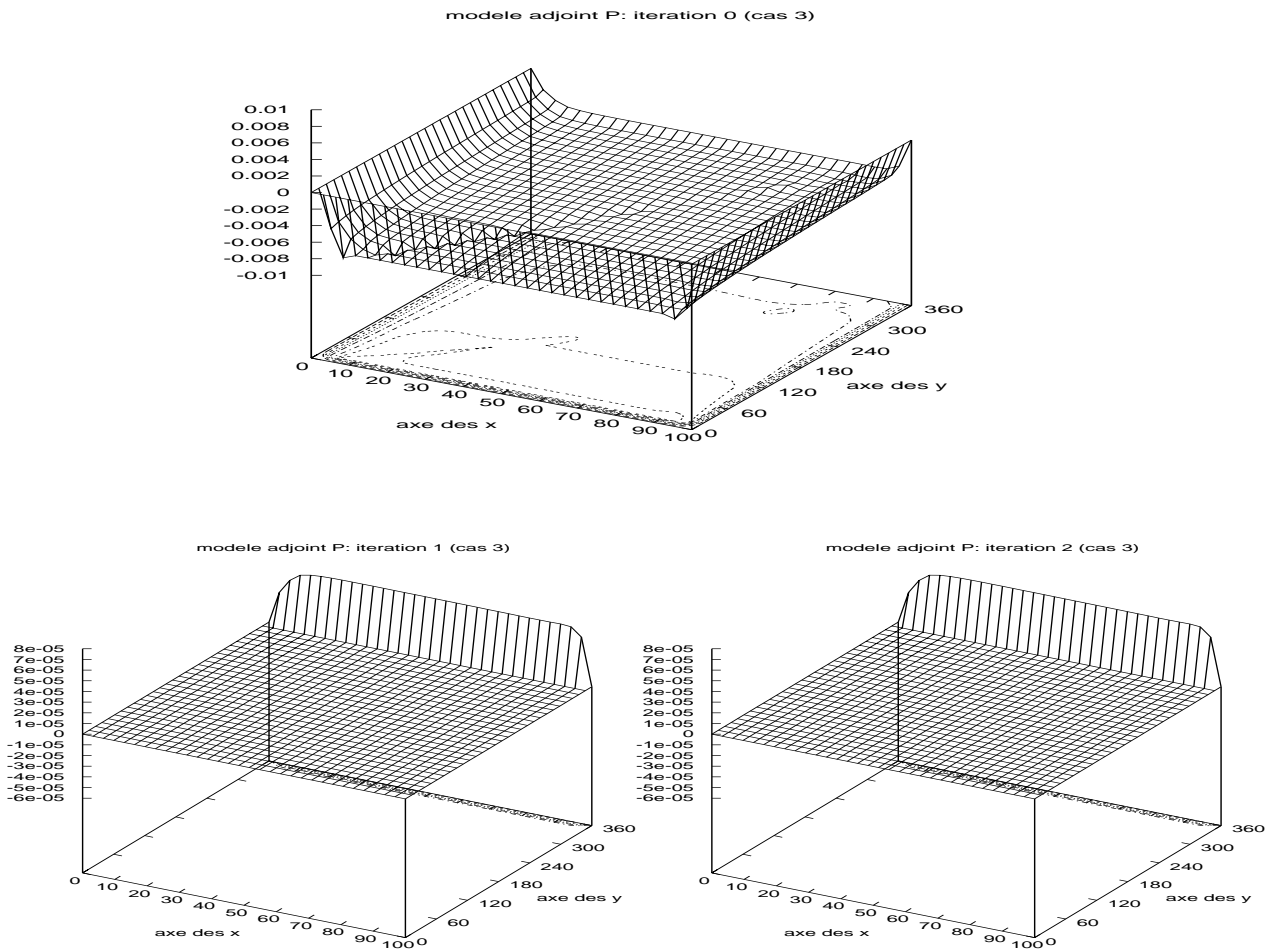


FIG. 5.12 – Adjoint P en fonction de la condition initiale optimale obtenue au cours des itérations de Newton : au dessus condition initiale de départ, à gauche première itération , à droite deuxième itération (*cas 3*)

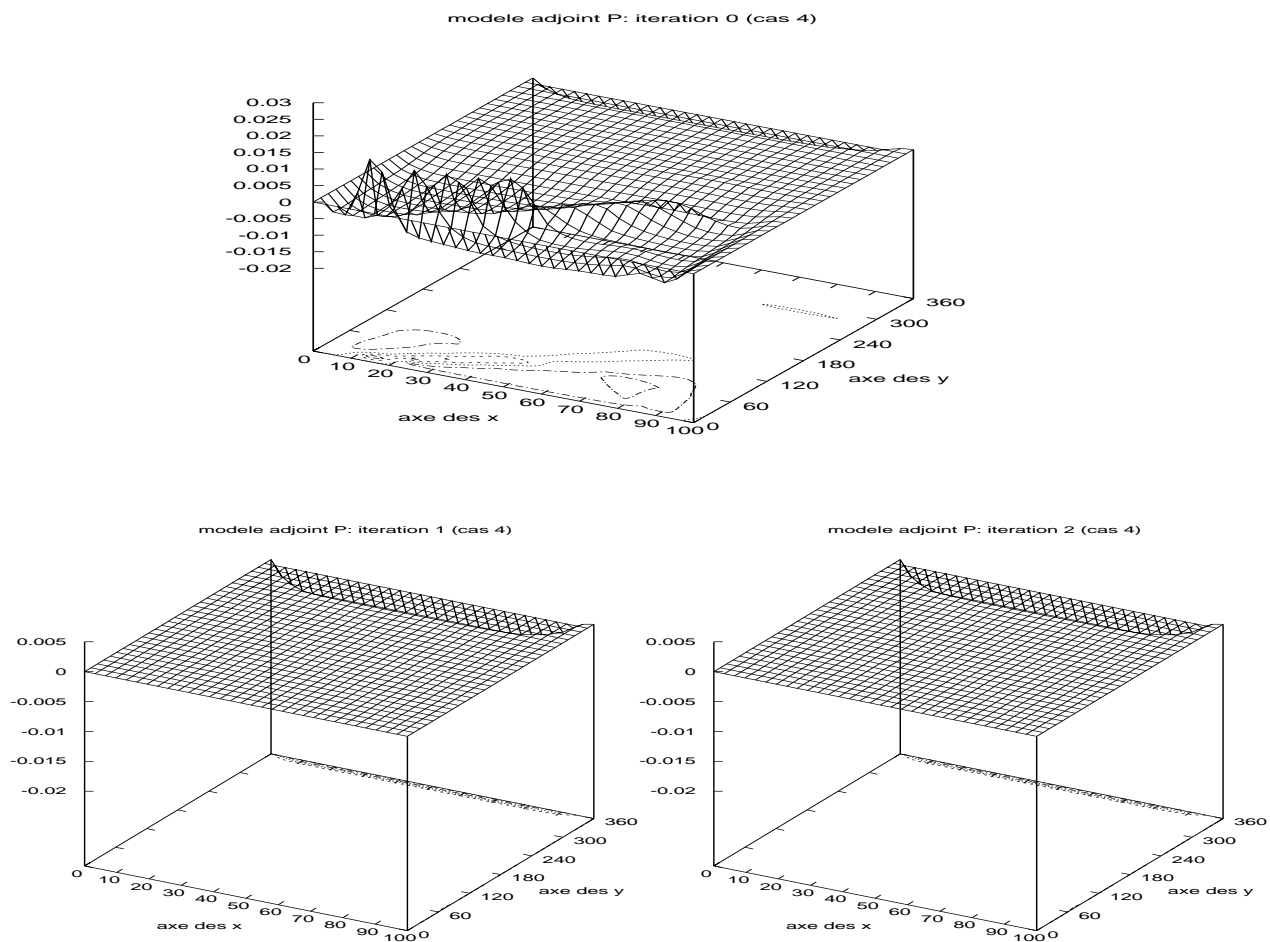


FIG. 5.13 – Adjoint P en fonction de la condition initiale optimale obtenue au cours des itérations de Newton : au dessus condition initiale de départ, à gauche première itération, à droite deuxième itération (*cas 4*)

5.9.3 Evolution de l'état et du modèle adjoint au cours des itérations de Newton

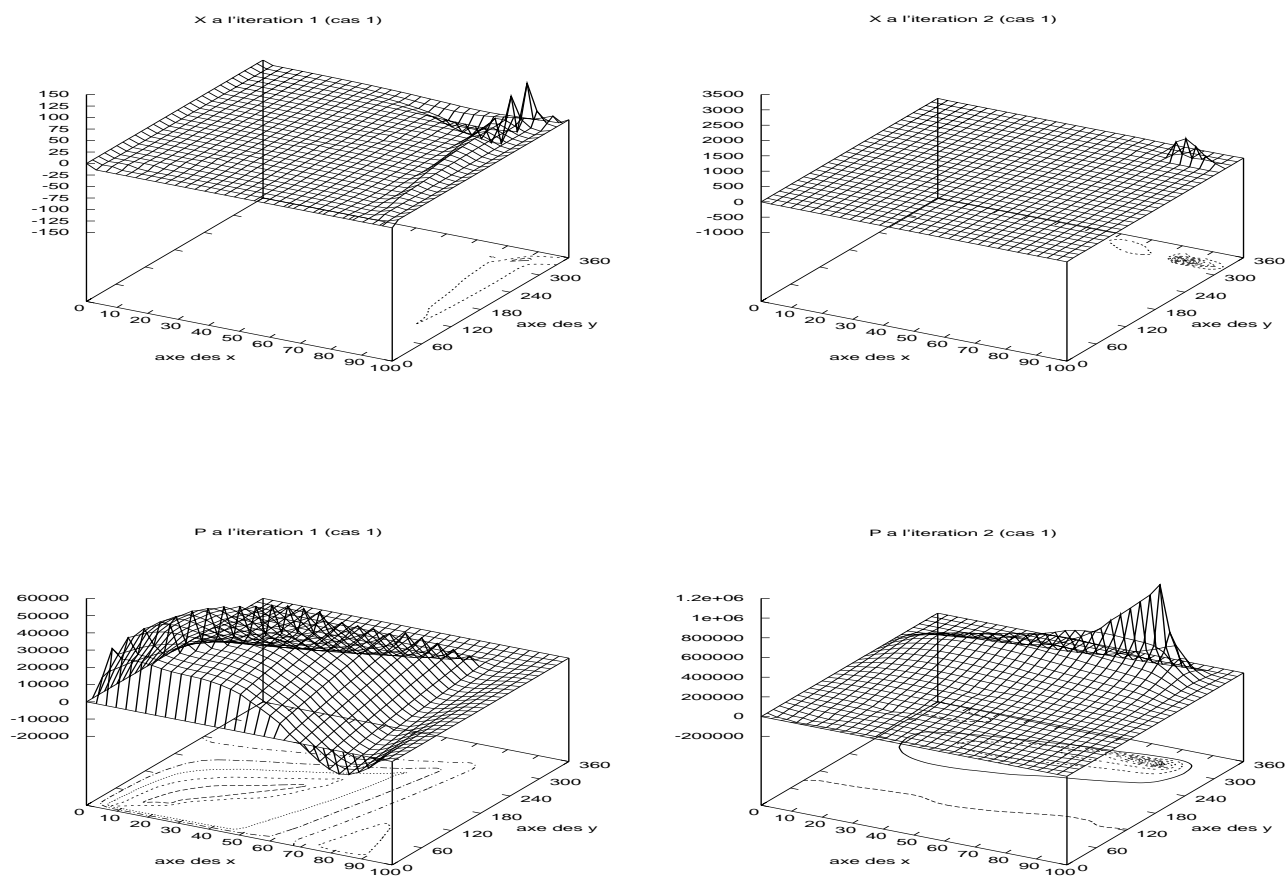
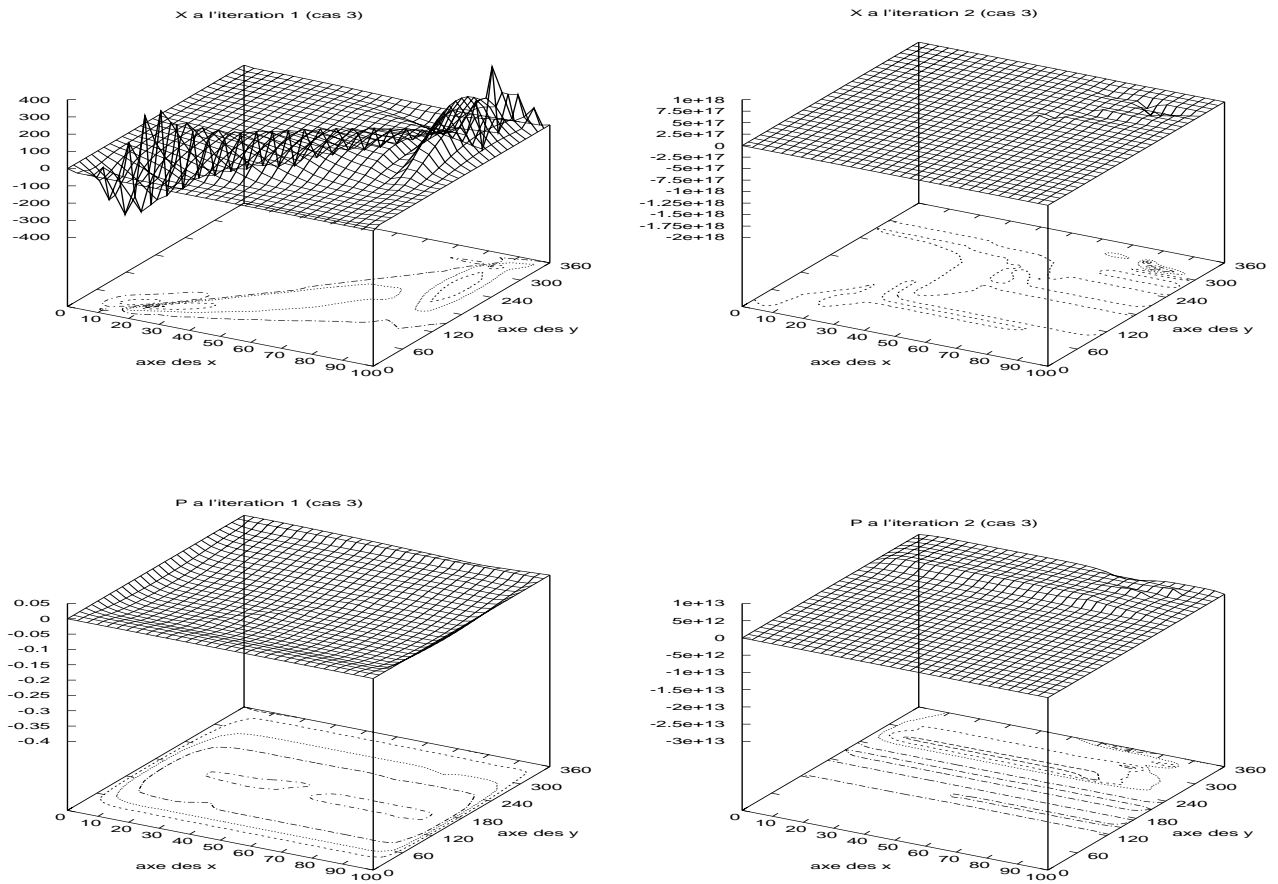


FIG. 5.14 – Evolution modèle adjoint et modèle direct (*cas 1*)

FIG. 5.15 – Evolution modèle adjoint et modèle direct (*cas 3*)

5.9.4 Résultats numériques pour la résolution de $\nabla J(u) = 0$

Pour ces tests numériques, nous considérons, les quatre configurations temporelles des observations correspondantes à quatre valeurs du vecteur de paramètres.

Le premier travail à réaliser consiste à trouver la condition initiale u_0 telle que le Hessien de la fonction coût en u_0 , $H(u_0)$, soit défini positif. Cette valeur de u_0 nous servira de point de départ dans l'algorithme (5.34)-(5.39) de résolution de $\nabla J(u) = 0$. Ce point de départ se trouve sans aucune difficulté car la résolution du système d'optimalité au début du paragraphe 5.9 (c.f. graphes 5.5) nous donne ce u_0 . En effet, en ce point u_0 , $H(u_0)$ est nécessairement défini positif ceci n'exprime rien d'autre que la condition suffisante d'existence d'une solution (au moins locale) unique au problème d'optimisation. Ce point u_0 nous sert de point de départ de l'algorithme de Newton.

Nous avons effectué la décomposition spectrale du Hessien suivant les quatre distributions temporelles des observations. Dans chaque cas, nous avons effectué 100 itérations de l'algorithme Lanczos. Cette étape est utilisée pour vérifier si la matrice hessienne au point u_0 est définie positive. On constate sur les courbes du graphique (5.16) que, quelque soit la configuration choisie, toutes les valeurs propres sont strictement positives, et donc le Hessien est défini positif au point u_0 .

Problèmes	λ_{min}	λ_{max}	Cond.	critère de convergence
Cas 1	0.643031	0.982707	1.528241	
Cas 2	0.878232	0.878984	1.000855	$ \lambda_n - \lambda_{n-1} \leq 10^{-10}$
Cas 3	0.8205396	1.053039	1.283350	n valeur de la nième itération
Cas 4	0.817760	0.9305687	1.1379480	

TAB. 5.1 – Valeurs de la plus petite valeur propre (λ_{min}), de la plus grande valeur propre (λ_{max}) et du conditionnement du Hessien (Cond.) de la fonction coût pris à la condition initiale optimale, servant de point de départ dans l'algorithme de Newton. Les quatre cas correspondent aux différentes configurations temporelles des données.

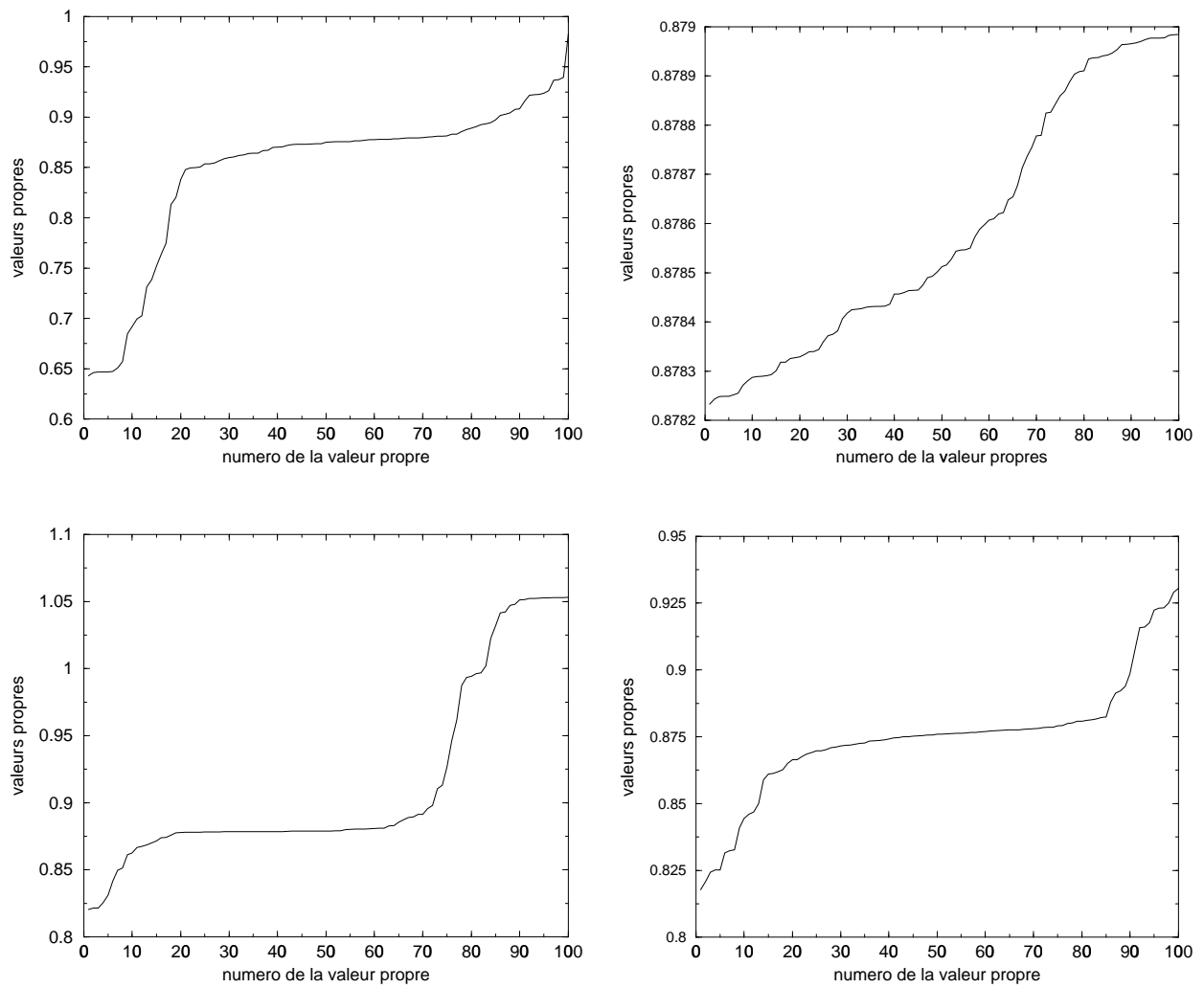


FIG. 5.16 – Toutes les valeurs propres correspondant aux quatre configurations temporelles des données : au dessus à gauche cas 1 et à droite cas 2 ; au dessous à gauche cas 3, à droite cas 4

Nous présentons à présent, les résultats obtenus en mettant en œuvre l'algorithme de Newton (5.34)-(5.39). On se fixe comme condition d'arrêt :

$$\|v_n\|_X = \|u_{n+1} - u_n\|_X \leq \varepsilon = 10^{-10} \quad (5.69)$$

Sur les graphiques (5.17), (5.19), (5.21) et (5.23), nous avons représenté pour les quatre configurations temporelles : à gauche la norme du gradient au cours des itérations, à droite l'évolution de la norme de u . Et sur les figures (5.18, 5.20, 5.22, 5.24), en trait continu, la norme du résidu au cours des itérations, dans le processus d'inversion du Hessien, en pointillé, la norme du résidu à lors de la dernière inversion. Cette inversion est faite à chaque étape en résolvant le problème de minimisation :

$$v^* = \inf_{v \in \mathcal{X}} g(v),$$

avec

$$g(v) = \frac{1}{2}(H(u_n)v, v)_{\mathcal{X}} - (\nabla J(u_n), v)_{\mathcal{X}},$$

ainsi, nous pouvons utiliser une méthode de type descente ou gradient conjugué pour la minimisation de g .

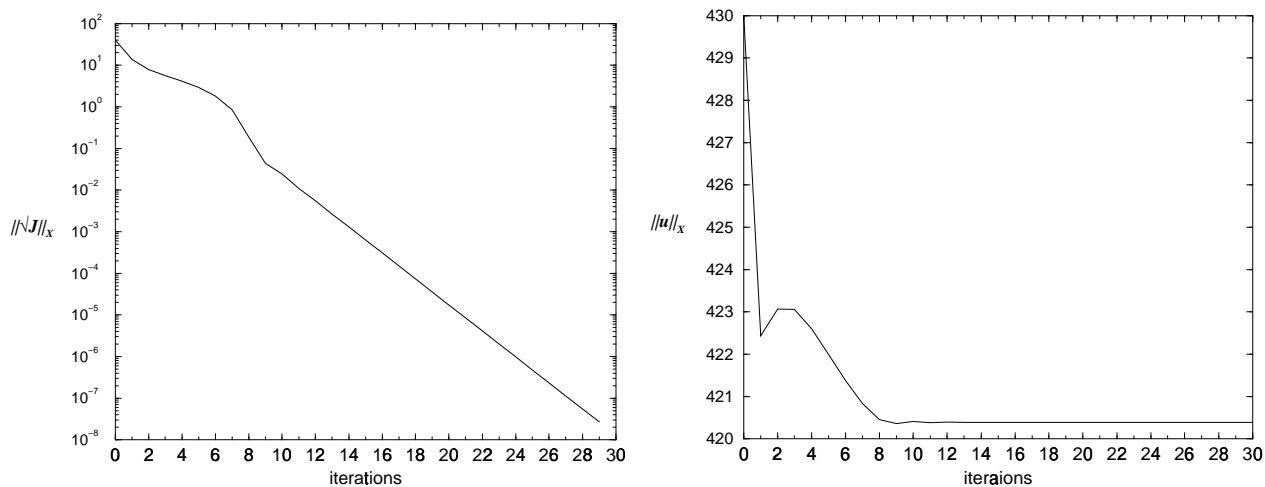


FIG. 5.17 – Evolution du gradient de la fonction coût (gauche) et de la norme de u (droite) au cours des itérations (*cas 1*)

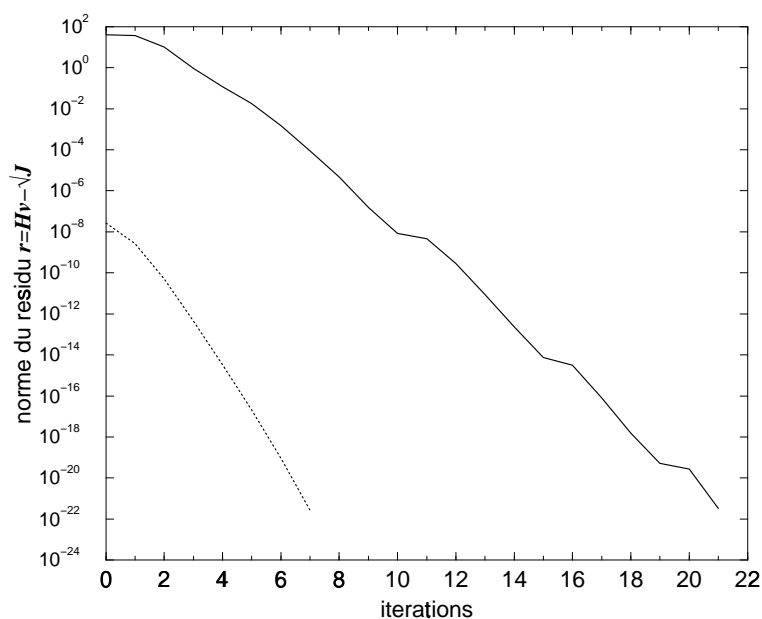


FIG. 5.18 – Norme du résidu au cours du processus d'inversion : en trait continu première inversion, en pointillés, dernière inversion (*cas 1*)

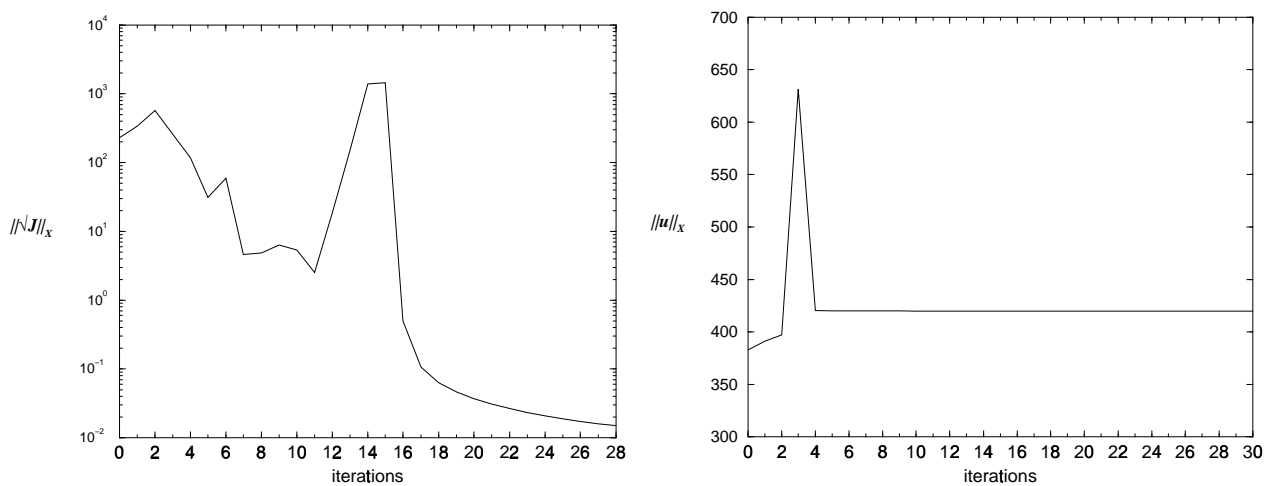


FIG. 5.19 – Evolution du gradient de la fonction coût (gauche) et de la norme de u (droite) au cours des itérations (*cas 2*)

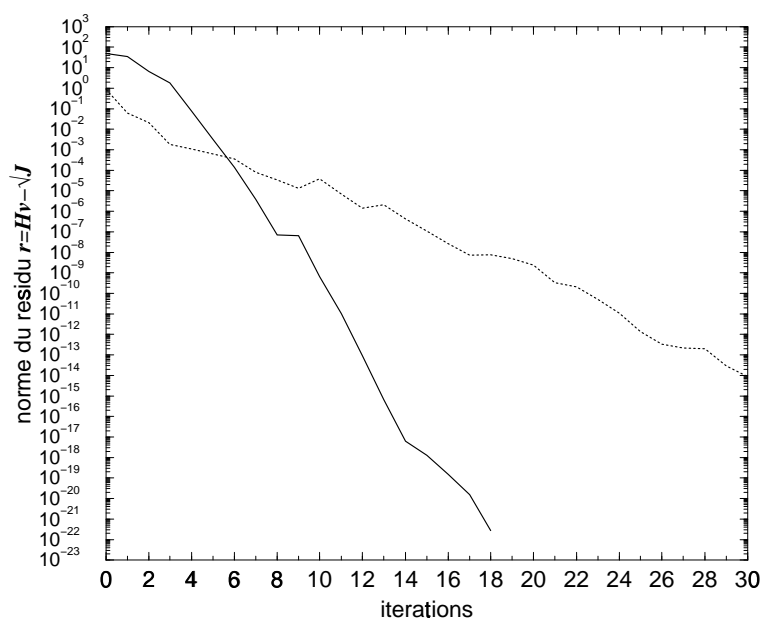


FIG. 5.20 – Norme du résidu au cours du processus d’inversion : en trait continu première inversion, en pointillés, dernière inversion (*cas 2*)

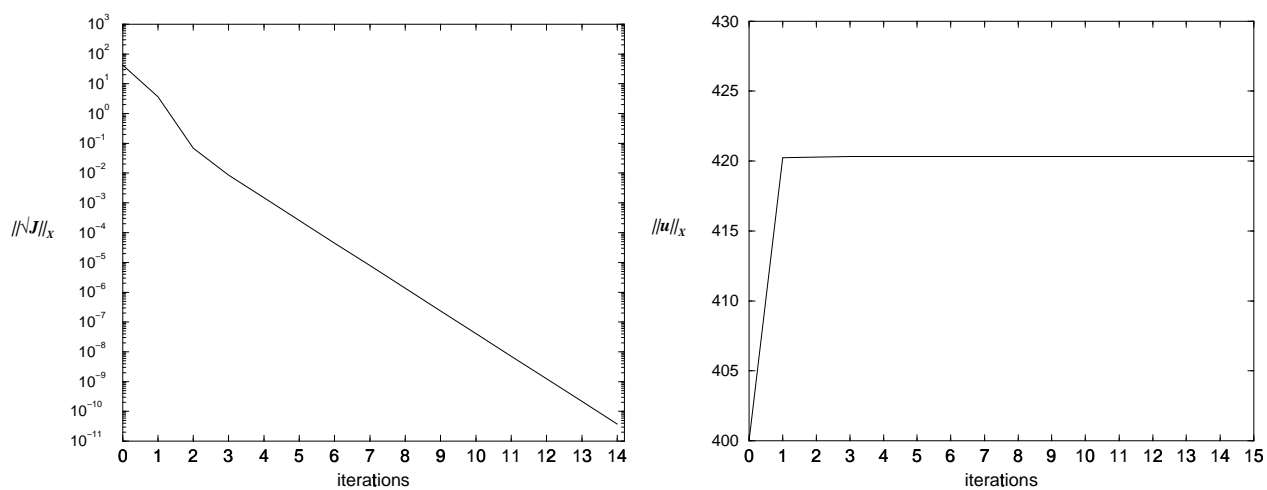


FIG. 5.21 – Evolution du gradient de la fonction coût (gauche) et de la norme de u (droite) au cours des itérations (*cas 3*)

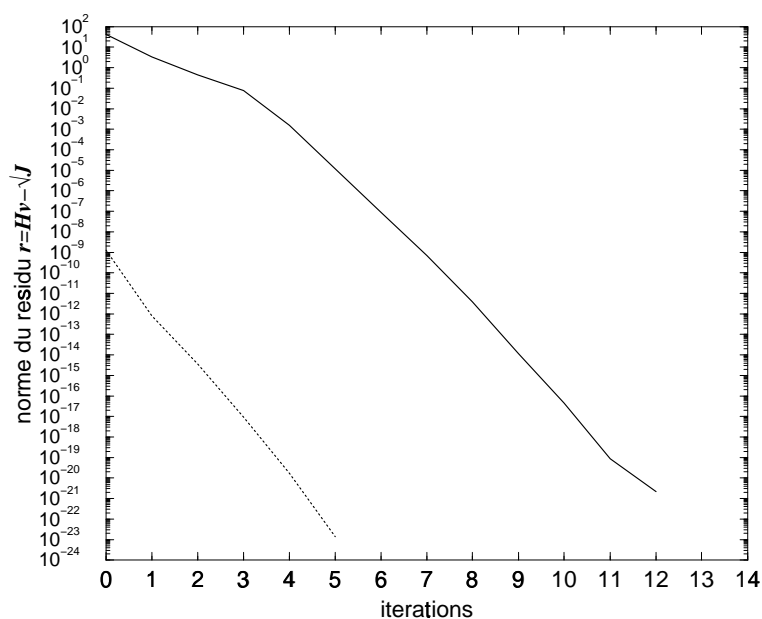


FIG. 5.22 – Norme du résidu au cours du processus d'inversion : en trait continu première inversion, en pointillés, dernière inversion (*cas 3*)

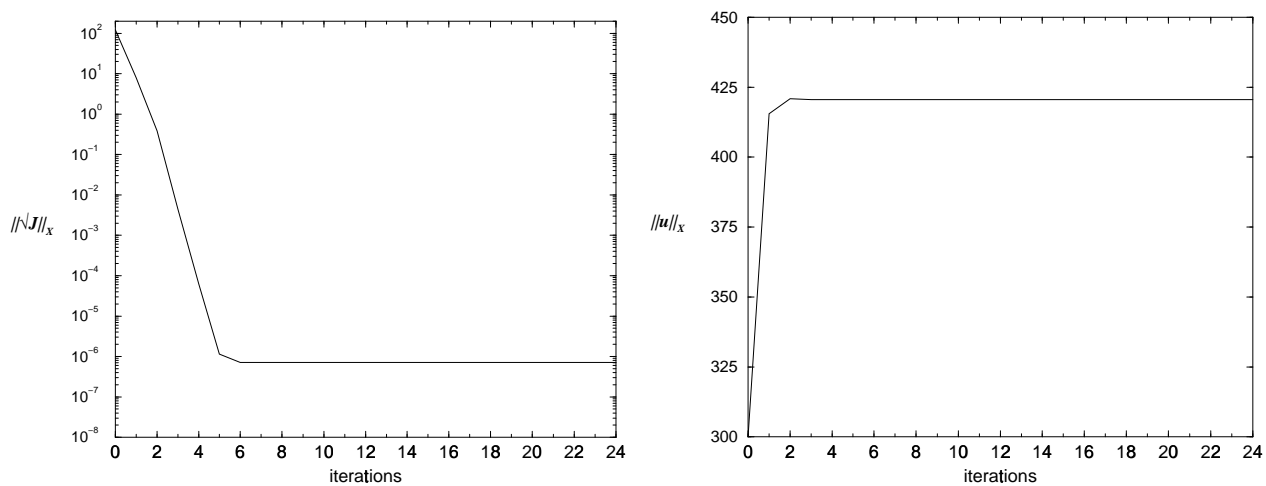


FIG. 5.23 – Evolution du gradient de la fonction coût (gauche) et de la norme de u (droite) au cours des itérations (*cas 4*)

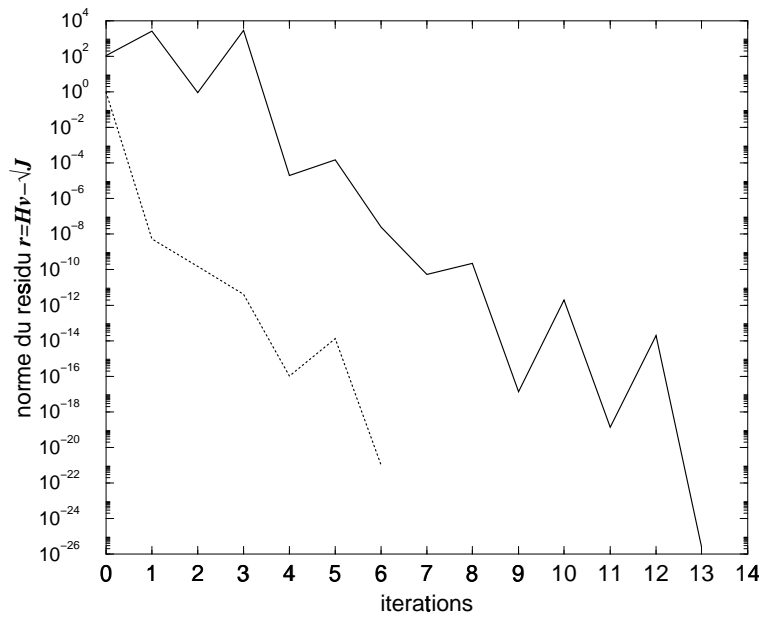


FIG. 5.24 – Norme du résidu au cours du processus d’inversion : en trait continu première inversion, en pointillés, dernière inversion (*cas 4*)

Commentaires

Nous constatons que la méthode de Newton globale converge au bout d’une itération ce qui confirme les résultats théoriques, en effet nous avons à résoudre un problème quadratique. Pour la résolution de $\nabla J(u)$, l’algorithme de Newton nous fournit des résultats très satisfaisants. On arrive à avoir une décroissance du gradient de la fonction coût jusqu’à 10^{-8} pour les cas 1 et 4, et 10^{-11} pour le cas 3 (figures 5.17, (5.21) et (5.23)). Ces résultats semblent bien meilleurs comparativement à l’algorithme d’optimisation de type descente (quasi-Newton) classiquement utilisé jusqu’à présent (c.f. [38]) et dans laquelle nous ne disposons d’aucune information sur le Hessien de la fonction coût. En fait dans ce type d’algorithme, le Hessien est approché par les variations successives du gradient de la fonction coût entre deux itérés. Le prix à payer dans la méthode de Newton mis en œuvre est l’utilisation de l’adjoint au second ordre obtenant de fait le Hessien (produit du Hessien par un vecteur) exact. La qualité des résultats obtenus ici est à ce prix. La méthode de Newton a en outre l’avantage de nous fournir une indication sur le choix du *first guess*, ce qui n’est pas le cas des algorithmes de type descente (quasi-Newton par exemple), cet avantage est non des moindres car, pour ce type d’algorithme utilisé en boîte noire, les résultats obtenus sont forcément liés à ce point de départ (*first guess*) notamment lorsque la fonctionnelle à minimiser n’est pas quadratique.

5.10 Conclusion

La méthode de Newton est un outil extrêmement puissant permettant entre autres applications de résoudre les problèmes d'assimilation variationnelle de données. Sa mise en œuvre nécessite l'utilisation des équations adjointes au second ordre. Pour les modèles géophysiques généralement fortement non-linéaires, c'est probablement un des outils qui prend en compte le mieux les caractéristiques de non-linéarités de ces modèles.

Conclusion

Dans les sciences environnementales, l'assimilation de données basée sur les techniques de contrôle optimal a montré son efficacité pour la reconstitution des champs à partir des observations et d'un modèle (principalement en météorologie et en océanographie). En hydrologie, cette méthode permet toujours à partir d'un modèle et des observations d'approcher les paramètres physiques qui ne sont pas toujours accessibles au travers des mesures expérimentales. Son application dans ces problèmes géophysiques a déjà donné de nombreux résultats satisfaisants et concrets et son utilisation devient de plus en plus courante voire indispensable.

L'analyse de sensibilité utilisant les équations adjointes au second ordre nous a permis de réaliser une analyse *a posteriori* de notre processus d'identification. Il était donc naturel de voir sous quelle contexte obtenir ces informations du second ordre via la différentiation automatique.

Sur le plan numérique et sous l'hypothèse de «l'exactitude» des modèles utilisés, l'utilisation de l'assimilation variationnelle donne de résultats d'identification qui sont «acceptables» sous réserve que l'on ne s'écarte pas trop des contraintes exigées par cette méthode.

Nous avons dans la première partie (chapitre 1) de ce travail réalisé une investigation du modèle physique ce qui nous permis de définir les différentes formulations des modèles d'écoulement en zone non-saturée, l'équation aux dérivées partielles non-linéaire de type parabolique quasilinéaire qui en découle a été résolue dans une classe spécifique d'espaces fonctionnels.

Pour la phase d'identification proprement dite abordée au chapitre 2 nous avons obtenu de bons résultats en utilisant les données synthétiques non bruitées et des résultats d'identification sur les données réelles prometteurs.

Dans la troisième partie (chapitre 3), grâce aux techniques d'analyse au second ordre et en suivant la démarche décrite dans [81, 26], nous avons réalisé une étude *a posteriori* de notre processus d'assimilation variationnelle de données. Cette étude est basée uniquement sur le Hessien de la fonction coût (produit par un vecteur) et son inversion permet de réaliser l'analyse de sensibilité par rapport aux observations. Cela nous a également permis de réaliser un travail portant sur la configuration temporelle des observations et de calculer la variation du conditionnement du Hessien en fonction

de la distribution des observations. Nous retenons de nos expériences numériques qu'il est indispensable de favoriser la densité temporelle des observations même si en pratique cela est très fastidieux et très difficile : c'est le prix à payer pour espérer avoir une bonne identification.

La difficulté dans les études entreprises dans les trois premières parties est essentiellement liée à l'écriture des codes adjoints notamment avec l'introduction des termes du second ordre. Au vu des récents progrès de la différentiation automatique, il nous a paru naturel de reprendre les études réalisées au premier et au second ordre par le différentiateur automatique *Odyssée* dans la quatrième partie (chapitre 4). Ce choix va de soit compte tenu non seulement des difficultés extrêmes inhérentes à la codification des dérivées manuelles mais aussi à l'impossibilité de coder à la main des dérivées exactes. Avec l'utilisation du générateur automatique de code *Odyssée* en mode linéaire tangent et en mode cotangent, nous avons repris les études entreprises antérieurement et nous avons obtenu des résultats satisfaisants avec pour point de départ, le modèle direct uniquement. Du fait que notre modèle direct était de taille réduite, l'encombrement mémoire en mode inverse est resté suffisamment raisonnable pour permettre le traitement des codes dérivés de notre modèle d'écoulement en zone non-saturée sur une station de travail. Nous avons toute fois noté dans nos applications numériques, que *Odyssée* consomme trois fois plus d'espace mémoire.

Nous avons terminé ce travail de thèse en utilisant les méthodes de Newton en assimilation de données. Pour ce faire, le problème a été au préalable redéfini de sorte à réduire le problème à un problème quadratique afin d'espérer une convergence rapide. La variable de contrôle se limitant uniquement à la condition initiale en utilisant les paramètres hydrodynamiques obtenus au chapitre 2.

Bibliographie

- [1] J. ABATE, C. BISCHOF, L. ROH, and A. CARLE. Algorithms and design for a second-order automatic differentiation module. *ACM, Inc*, page :7, 1997.
- [2] V.I. AGOSHKOV and G.I. MARCHUK. On solvability and numerical solution of data assimilation problems. *Russ J. Numer. Anal. Math. Modelling*, 8(1) :1–16, 1993.
- [3] C. BISCHOF, A. CARLE, P. KHADEMI, and A. MAUER. Adifor 2.0 : Automatic differentiation of fortran 77 programs. *IEEE Computational Science & Engineering*, 3(3) :18–32, 1996.
- [4] H. BREZIS. *Analyse fonctionnelle : théorie et applications*. Masson, Paris, 1983. Collection de mathématiques appliquées pour la Maîtrise. Sous la direction de P.G. Ciarlet et J.L. Lions.
- [5] R.H. BROOKS and A.T. COREY. Hydraulic properties of porous media. Technical report, Hydrol. Pap. 3. Colorado State Univ., Fort Collins, 1964.
- [6] D.G. CACUCI, P.G. MAUDLIN, and C.V. PARKS. Adjoint sensitivity analysis of extremum-type response in reactor safety. *Nuc. Sci. Eng.*, 88 :112–135, 1983.
- [7] M.A. CELIA, E.T. BOULOUTAS, and R. L. ZARBA. A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. *Water Resources Research*, 26(7) :1483–1496, 1990.
- [8] I. CHARPENTIER and M. GHEMIRE. Génération automatique de codes adjoints : Stratégies d’utilisation pour le logiciel *odyssée*. application au code météorologique meso-nh. Rapport de Recherche RR-3251, INRIA, Septembre 1997.
- [9] G. CHAVENT. *Identification of functional parameters in partial differential equations*, chapter In Identification of Parameters in Distributed System. Pergamon, 1974.
- [10] G. CHAVENT. Quasi-convex set and size \times curvature condition, application to non-linear inversion. *Appl. Math. Optim.*, 24 :129–169, 1991.
- [11] G. CHAVENT, M. DUPUY, and P. LEMONNIER. History matching by use of optimal control theory. *Soc. Petroleum Engrs. J.*, 15 :74–86, 1975.
- [12] G. CHAVENT and P. LEMONNIER. Identification de la non-linéarité d’une équation parabolique quasi-linéaire. *Applied Mathematics and Optimization*, 2(2) :212–162, 1974.
- [13] G. CHAVENT and J. ZHANG. Estimation of mobilities and capillary pressure from centrifuge experiments. *Inverse Problems in Engineering*, Bui, Tanaka et al (eds). Rotterdam, 28 :256–271, 1994.

-
- [14] P. COURTIER. *Application du contrôle optimal à la prévision numérique en météorologie*. PhD thesis, Université de Paris VI, 1987.
- [15] F.-X. LE DIMET. A global approach of variational objective analysis. Report, LAMP, Université de Clermont II, BP 45 63170 Aubière France, 1979.
- [16] F.-X. LE DIMET. Une étude générale d'analyse objective variationnelle des champs météorologiques. Rapport Scientifique LAMP 28, Université de Clermont II, BP 45 63170 Aubière France, 1980.
- [17] F.-X. LE DIMET. A general formalism of variational analysis. Report OK 73091 22, CIMMS, Norman, OK, 1986.
- [18] F.-X. LE DIMET. Quelques problèmes mathématiques en météorologie. *Gazette des Mathématiciens, Société mathématiques de France*, 32 :68–74, 1987.
- [19] F.-X. LE DIMET. Initialisation and data assimilation in meteorological models. In HIROSHI NIKI and MATSUTO KAWAHARA, editors, *Computational methods in flow analysis*, number 1, pages 79–86. Okayama, Okayama University of Science, 5–8 September 1988. Volume 1.
- [20] F.-X. LE DIMET. Optimization and optimal control in atmospheric sciences. In K.H., PHUA, C.M. WANG, W.Y. YEONG, and F.S. CHOU, editors, *Optimization : Techniques and applications*, pages 1220–1229. Singapour, New Jersey, London, Hong Kong, World Scientific 1992. Volume 2.
- [21] F.-X. LE DIMET. Optimization control methods and data assimilation. Technical report, Lecture notes, International summer school on assimilation of observations in Meteorology and Oceanography, Toulon France, 1993.
- [22] F.-X. LE DIMET and I. CHARPENTIER. Méthodes du second ordre en assimilation de donnée. In *Equation aux dérivées partielles et applications Geosciens*, pages 623–639. Elsevier, Paris, 1994. Article dédié au 70^e anniversaire de J. L Lions.
- [23] F.-X. LE DIMET, I.M. NAVON, and P. NGNEPIEBA. Second order methods for geophysical flows. In *AD'2000 : 3rd International Conference/Workshop on Automatic Differentiation to Optimization*, Nice, France, June 19–23 2000. (<http://at.yorku.ca/cgi-bin/amca/cads-59>).
- [24] F.-X. LE DIMET, I.M. NAVON, and D.N. DAESCU. Second order information in data assimilation. In *Mon. Wea. Rev.*, 2001. Accepté pour publication.
- [25] F.-X. LE DIMET, P. NGNEPIEBA, and V.P. SHUTYAEV. On error sensitivity in data assimilation. *Russ. J. Numer. Analys. Math. Modelling*, 2001. Soumis.
- [26] F.-X. LE DIMET, H.E. NGODOCK, B. LUONG, and J. VERRON. Sensitivity analysis in variational data assimilation. *J. Met. Soc. Jap.*, 75(1B) :pp 245–255, 1997.
- [27] F.-X. LE DIMET and V. SHUTYAEV. On newton methods in data assimilation. *Russ J. Numer. Anal. Math. Modelling*, 15(5) :419–434, 2000.
- [28] F.-X. LE DIMET and V.P. SHUTYAEV. On data assimilation for quasilinear parabolic problems. *Russ. J. Numer. Analys. Math. Modelling*, 16(3) :247–259, 2001.

-
- [29] F.-X. Le DIMET and O. TALAGRAND. Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations : theoretical aspects. *Tellus*, 38A :97–110, 1986.
- [30] R.D. ESPIINOZA. *Infiltration*, chapter 6. The Handbook of Groundwater Engineering, 1998.
- [31] F. EYSSETTE, C. FAURE, J.C. GILBERT, and N. ROSTAING-SCHMIDT. Applicabilité de la différentiation automatique à un système d'équations aux dérivées partielles régissant les phénomènes thermohydrauliques dans un tube chauffant. Rapport de Recherche RR-2795, INRIA, Février 1996.
- [32] C. FAURE and I. CHARPENTIER. Comparing strategies for coding adjoints. Rapport de Recherche RR-3811, INRIA, Novembre 1999.
- [33] C. FAURE and Y. PAPEGAY. *Odyssee* user's guide : *Version 1.7*. Rapport Technique RT-0224, INRIA, Septembre 1998.
- [34] S. FINSTERLE and NAJITA. Robust estimation of hydrogeologic model parameters. *Water Resources Research*, 34(11) :2939–2947, 1988.
- [35] A.R. GALLANT. Nonlinear regression. *am. Stat.*, 29 :73–81, 1975.
- [36] W.R. GARDNER. Some steady-state solutions of the unsaturated moisture flow equation with application to evaporation from a water table. *Soil Sci.*, 85 :228–232, 1958.
- [37] M.Th. VAN GENUCHTEN. A closed-forme equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science of America Journal*, 44 :892–898, 1980.
- [38] J.C GILBERT and C. LEMARECHAL. Some numerical experiments with variable storage quasi-newton algorithms. *Mathematical programming*, 45 :407–435, 1989.
- [39] J.C. GILBERT, G. LE VEY, and J. MASSE. La différentiation automatique des fonctions représentées par des programmes. Rapport de Recherche RR-1557, INRIA, 1991.
- [40] P.E. GILL and W. MURRAY. Newton-type methods for unconstrained and linearly constrained optimization. *Math. Prog.*, 28 :311–350, 1979.
- [41] A. GRIEWANK. A some bounds on the complexity of gradients, Jacobians, and Hessians. In *Complexity in Non-linear Optimization*, pages 128–161. P. M. PARDALOS, Ed. World Scientific Publishers, 1993.
- [42] A. GRIEWANK, D. JUEDES, J. SRINIVASANA, and C. TYNER. Adol-c, a package for the automatic differentiation of algorithms written in C/C++. *Transactions on Mathematical Software*, 22(2) :131–167, 1996.
- [43] M.C.G. HALL, D.G. CACUCI, and M.E SCHLESINGER. Incomplete observations and control of gravity waves in variational data assimilation. *Tellus*, 44A :273–2960, 1992.
- [44] R. HAVERKAMP. *Résolution numérique de l'équation de l'infiltration de l'eau dans le sol, approches analytiques et numériques*. PhD thesis, Thèse de l'USM-INP Grenoble, 1983.

-
- [45] R. HAVERKAMP, F. BOURAOUI, C. ZAMMIT, and R. ANGULO-JARAMILL. *Soil properties and moisture movement in the unsaturated zone*, chapter 5. The Handbook of Groundwater Engineering, 1998.
- [46] R. HAVERKAMP, J.-Y. PARLANGE, J.L. STARR, G. SCHMITZ, and C. FUENTES. Infiltration under pounded conditions : 3 a predictive equation based on physical parameters. *Soil Science*, 149(5) :292–300, 1990.
- [47] R. HAVERKAMP, M. VAUCLIN, J. TOUMA, P.J. WIERENGA, and G. VA-CHAUD. A comparaison of numericals simulation models for one-dimensionnal infiltration. *Soil Science of America Journal*, 41 :285–294, 1977.
- [48] R. HAVERKAMP, C. ZAMMIT, F. BOURAOUI, C. FUENTES, Z. SAÂDI, and G. SANDER. A physically-based approach for estimating water retention curve parameters. *Soil Science of America Journal*, 1999. (Submitted).
- [49] D. HENRY. *Geometric theory of semilinear parabolic equations*. N.Y. Springer, 1981.
- [50] D. HILLEL. *L'eau et le sol : principes et processus physiques*. Louvain-la-Neuve : Academia, Pédasup 5, 1988.
- [51] R.G. HILLS, B. HUDSON, I. PORRO, and P.J. WIERENGA. Modeling one-dimensional infiltration into very dry soils. *Model development and evaluation. Water Resources Research*, 25(6) :1259–1269, 1989a.
- [52] S. JÉGOU. *Estimations des perméabilités relatives dans des expériences de déplacements triphasiques en milieux poreux*. PhD thesis, Université de Paris IX Dauphine, 1997.
- [53] W. KAHAN and B.N PARLETT. How far should you go with the lanczos process. *Sparce matrix Computations*, pages 131–144, 1976. Acedemic Press, New-York.
- [54] P. K. KITANIDIS. *Geostatistics : Interpolation and inverse problems*, chapter 12. The Handbook of Groundwater Engineering, 1998.
- [55] J.B. KOOL and J.C. PARKER. Development and evaluation of closed form expressions for hysteresis soil properties. *Water Resources Research*, 23 :1 :105–114, 1987.
- [56] R. KULKARNI, A. TED WATSON, J.E. NORDTVEDT, and A. SYLTE. Two phase flow in porous media : property identification and model validation. *Fluid Mechanics and Transport Phenomena*, 44 :11 :2337–2350,, 1998.
- [57] P. LASCEAU and R. THEODOR. *Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingénieur*. Tome 2. Masson, 1986.
- [58] F. LEHMANN. *Hydrodynamique en milieux poreux hétérogènes non saturés : identification des paramètres par approche inverse*. Thèse de doctorat, Université Louis Pasteur de Strasbourg, 1996.
- [59] S. LEI and S. YANG. *The dynamics of soil water*. Tsinghua University Press, 1986.
- [60] J.L. LIONS. *Contrôle optimal des systèmes gouvernés par des équations aux dérivées partielles*. Dunod, 1968.

-
- [61] J.L. LIONS. *Quelques méthodes de résolution des problèmes aux limites non linéaires*. Dunod-Gauthier Villards, 1969.
- [62] J.L. LIONS and E. MAGENES. *Problèmes aux limites non homogènes et applications*. Dunod, 1968. Volume 1.
- [63] J. LIU. *Calcul formel et problème inverse*. PhD thesis, Université de Paris-Dauphine, 1989.
- [64] K. LOAGUE and R.E. GREEN. Statistical and graphical methods for evaluating solute transport models : Overview and application. *Journal of Contaminant Hydrology*, 7 :51–73, 1991.
- [65] A.C. LORENC. Analysis methods for numerical weather prediction. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 112 :1177–1194, 1986.
- [66] B. LUONG. *Techniques de contrôle optimal pour un modèle quasi-géostrophique de circulation océanique. Application à l'assimilation variationnelle de données altimétriques et satellitaires*. PhD thesis, Thèse de l'Université Joseph Fourier, Grenoble I : UJF, 1995.
- [67] J.M. MALÉ, N. ROSTAING-SCHMIDT, and N. MARCO. Automatic differentiation : an application to optimum shape design in aeronautics. *ECCOMAS 96*, 1996.
- [68] G.I. MARCHUK, V.P. AGOSHKOV, and V.P. SHUTYAEV. *Adjoint equations and perturbation algorithms in non-linear problems*. N.Y. : CRC Press Inc, 1996.
- [69] G.I. MARCHUK and V.V. PANENKO. Application of optimization methods problem of mathematical simulation of atmospheric processes and environment. In *Modelling and Optimization of Complex Systems : Proc. of the IFIP-TC7 Working conf.*, pages 240–252, New York : Springer, 1978.
- [70] P.C.D. MILLY. A mass-conservative procedure for time-stepping in models of unsaturated flow. *Advance in Water Resources*, 8 :32–36, 1985.
- [71] B. MOHAMMADI and O. PIRONNEAU. *Applied shape optimization for fluids*. CLARENDON PRESS. OXFORD, 2001.
- [72] Y. MUALEM. A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water Resources Research*, 12(3) :513–522, 1976.
- [73] I.M. NAVON and D.M. LEGLER. Conjugate-gradient methods for large-scale minimisation in meteorology. *Mon. Wea. Rev.*, 115 :1479–1502, 1987.
- [74] I.M. NAVON and X. ZOU. Application of the adjoint model in meteorology. In *A. GRIENWANNEK and G. CORLISS, editors, Automatic differentiation of algorithms : theory, implementation and applications*, pages 202–207. Philadelphia, 1991.
- [75] P. NGNEPIEBA and F.-X. LE DIMET. Information du second ordre en assimilation de données : application à l'identification des paramètres d'un modèle hydrologique monodimensionnel. Rapport de Recherche N° 12, Université des Nations Unies–Université de Yaoundé 1, Novembre 1998.

-
- [76] P. NGNEPIEBA and F.-X. LE DIMET. Information du second ordre et analyse de sensibilité une application au modèle hydrologique d'infiltration. In *32ème Congrès d'Analyse Numérique, CANum'2000*, Port d'Albert (Landes), France, 2000.
- [77] P. NGNEPIEBA and F.-X. LE DIMET. Dérivation automatique et identification : une application en hydrologie. In *1^{er} Congrès National de Mathématiques Appliquées et Industrielles, SMAI'2001*, Pompadour (Corrèze), France, 2001.
- [78] P. NGNEPIEBA, F.-X. LE DIMET, A. BOUKONG, and G. NGUETSENG. Inverse problem formulation for parameters determination using the adjoint method. In *Proceedings of CARI-2000 : 5^{ème} Colloque Africain sur la Recherche en Informatique*, pages 195–202, Antananarivo, Madagascar, October 16–19, 2000.
- [79] P. NGNEPIEBA, F.-X. LE DIMET, A. BOUKONG, and G. NGUETSENG. Identification de paramètres : une application à l'équation de Richards. In *CPRSR : Calculateurs Parallèles, Réseaux et Systèmes Répartis, Revue Hermès*, 2001. Accepté pour publication.
- [80] P. NGNEPIEBA, F.-X. LE DIMET, and V.P. SHUTYAEV. On error sensitivity in variational data assimilation. Rapport de Recherche RR-4220, INRIA, Juillet 2001.
- [81] H.E. NGODOCK. *Assimilation de données et analyse de sensibilité : une application à la circulation océanique*. PhD thesis, Thèse de l'Université Joseph Fourier, Grenoble I : UJF, 1996.
- [82] O.A., LADYZENSKAYA, V. A. SOLONNIKOV, and N.N. URALTZEVA. *Linear and quasilinear equations of parabolic type*. American Mathematical Society, 1968. Traduit du Russe.
- [83] B.N PARTLETT and D.S SCOTT. The lanczos algorithm with the selective orthogonalization. *Mathematics of Computation*, 33(145) :217–238, 1979.
- [84] J.R. PHILIP. The theory of infiltration : 1. the infiltration equation and its solutions. *Soil Sci.*, 83 :345–357, 1957a.
- [85] J.R. PHILIP. Similarity hypothesis for capillary hysteresis in porous materials. *J. Geophys. Res.*, 69 :1553–1562, 1964.
- [86] K. RATHFELDER and L. ABRIOLO. Mass conservative numerical solutions of the head-base Richards equation. *Water Resources Research*, 30(9) :2579–2586, 1994.
- [87] R.HAVERKAMP and M. VAUCLIN. A note on estimating finite difference interblock hydraulic conductivity values for transient unsaturated flows problems. *Water resour. Res.*, 15 :181–187, 1983.
- [88] L.A. RICHARDS. Capillary conduction of liquids through porous mediums. *Physics*, 1 :318–333, 1931.
- [89] N. ROSTAING-SCHMIDT and E. HASSOLD. Basic function representation of programs for automatic differentiation in the *odyssée* system. In *F-X LE DIMET editor, High performance Computing in the Geosciens*, pages 207–222. Kluwer Academic Publishers B.V. NATO ASI SERIES, 1994.

-
- [90] Y.K. SASAKI. An objective analysis based on the variational method. *J. Met. Soc. Jap.*, II(36) :77–88, 1958.
- [91] V.P. SHUTYAIEV. Some properties of the control operator in the problem of data assimilation and iterative algorithms. *Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling.*, 10(4) :357–371, 1995.
- [92] W. SQUIRE and G. TRAPP. Using complexe variables to estimate derivatives of real functions. *SIAM Review*, 10(1) :110–112, 1998.
- [93] O. TALAGRAND. A study of mathematics of four dimensional data assimilation. *Tellus*, 33 :43–60, 1981a.
- [94] O. TALAGRAND. On the mathematics of data assimilation. *Tellus*, 33 :321–339, 1981b.
- [95] O. TALAGRAND. Assimilation of observations : An introduction. Technical report, Lecture notes, International summer school on assimilation of observations in Meteorology and Oceanography, Toulon France, 1993.
- [96] O. TALAGRAND. Statistical linear estimation, part i and ii. Technical report, Lecture notes, International summer school on assimilation of observations in Meteorology and Oceanography, Toulon France, 1993.
- [97] O. TALAGRAND and P. COURTIER. Formalisme de la méthode du modèle adjoint, applications météorologiques. EERM internal Report 117, Météo-France, 42, Av. Coriolis, Toulouse France, 1985.
- [98] O. TALAGRAND and P. COURTIER. Variational assimilation of meteorological observation with the adjoint vorticity equation i : theory. *Q. J. R Meteorol. Soc.*, 113 :1311–1328, 1987.
- [99] W.C. THACKER. The role of hessian matrix in fitting models to measurements. *J. Geophys. Res.*, 94(C5) :6177–6196, 1989.
- [100] J.N. THÉPAUT and P. COURTIER. Four-dimensional data assimilation using the adjoint of multilevel primitive-equation model. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 117 :1225–1254, 1991.
- [101] Y. TREMOLET. *Parallélisation d’algorithmes variationnels d’assimilation de données en météorologie*. PhD thesis, Université Joseph Fourier Grenoble 1, 1995.
- [102] M.M. VAINBERG. *Variational methods for the study of nonlinear operators*. London Holden-Day, Inc., 1964.
- [103] M. VAUCLIN and J.-L. CHOPART. L’infiltrométrie pour la détermination *in situ* des caractéristiques hydrodynamiques de la surface d’un sol gravillonnaire de côte-d’ivoire. *L’Agronomie tropicale*, 46(4) :259–271, 1992.
- [104] Z. WANG, I.M. NAVON, F.-X. LE DIMET, and X. ZOU. The second order adjoint analysis : theory and application. *Met. Atmos. Phys.*, 50 :3–20, 1992.
- [105] E.P. WIGNER. Effet of small perturbations on pile period. Technical Report CP-G 3048, Chicago Report, 1945.

- [106] J. YANG. *Assimilation de données variationnelle pour les problèmes de transport de sédiments en rivières*. PhD thesis, Thèse de l'Université Joseph Fourier de Grenoble I et de l'Université Wuhan R. P. Chine, 1999.
- [107] X. ZOU, A. BARICILON, I.M. NAVON, J. WHITAKER, and D.G CACUCL. An adjoint sensitivity study of bloking in a two-layer isentropic model. *Mon. Wea. Rev.*, 121 :2833–28573, 1993.
- [108] X. ZOU, I.M., NAVON, M. BERGER, K.H. PHUA, T. SCHLICK, and F.-X. LE DIMET. Numerical experiment with the limited-memory quasi-newton and truncated newton methods. *Siam J. Optimization*, 3(3) :582–608, 1993.

Résumé

La détermination de certains paramètres hydrodynamiques dans les modèles d'écoulement en zone non-saturée (et plus généralement dans certains modèles géophysiques) requiert l'utilisation d'un modèle et de données d'observations. Le but de ce travail est de proposer une méthode d'assimilation variationnelle de données permettant de reconstituer ces paramètres en tenant compte des observations et du modèle. La méthode proposée est fondée sur les techniques de contrôle optimal.

Le travail mené dans cette étude porte sur l'identification de paramètres sur le modèle de Richards monodimensionnel ainsi que sa mise en œuvre numérique. Au préalable, une investigation de la physique liée à notre problématique est explorée. Les données à assimiler sont les mesures d'infiltration cumulée et le vecteur de contrôle choisi est constitué de la condition initiale, des conditions aux limites et des paramètres hydrodynamiques. C'est ainsi que suivant certaines distributions des observations (infiltration cumulée observée), le paramètre de contrôle est reconstitué. Cette phase est suivie par une étude *a posteriori* basée sur les études au second ordre qui permettent d'estimer l'erreur de l'identification, l'influence de la configuration temporelle des observations sur la qualité de l'identification ainsi qu'une bonne compréhension du processus de minimisation. La dérivation automatique à l'aide du logiciel de différentiation automatique *Odyssée* est utilisée pour déduire les informations du premier et du second ordre. Enfin, en se servant des études au second ordre réalisées, nous appliquons l'algorithme de Newton au système d'optimalité.

Mots-clés : équation de Richards, assimilation variationnelle de données, modèle adjoint, système d'optimalité, infiltration cumulée, adjoint au second ordre, analyse de sensibilité, dérivation automatique.

Abstract

Some hydrodynamic parameters for unsaturated flow models cannot be measured, they have to be tuned with respect to the observations and the output of the model. The objective of this work is to propose a variational data assimilation method allowing to retrieve these parameters by combining the model and the observation. The method is based on optimal control theory.

The work deals with the problems of parameters identification with monodimensional Richard's model. As a preliminary, an investigation of the physics related to the problem is explored. The data to be assimilated are measurements of cumulative infiltration and the control vector selected is the initial condition, the boundary conditions and the hydrodynamic parameters. Thus according to certain distributions of the observations (observed cumulative infiltration), the control parameter is retrieved. This phase is followed by an *a posteriori* study based on the use of second order adjoint which allows to estimate the discrepancy, the influence of the temporal configuration of the observations on the quality of the identification as well as a good understanding of the minimization process. Automatic derivation through the differentiator *Odyssée* is used to compute first and the second order information. Lastly, by using previous second order studies realized, Newton algorithm is applied to the optimality system.

Key-words : Richard's equation, variational data assimilation, adjoint model, optimality system, cumulative infiltration, second order adjoint, sensitivity analysis, automatic differentiation.