

GDR MOMAS

**Sur un problème inverse
de détermination
de coefficients de diffusion**

Grégoire ALLAIRE, Diogo SILVA, Olivier PANTZ

CMAP
École Polytechnique
91128 Palaiseau Cedex
FRANCE

Abstract

The numerical simulation of nuclear waste storage requires the knowledge of the physical parameters of the geologic structure of the site in order to determine the impact of a possible propagation of radionuclides. Since those parameters (porosity, permeability, etc.) are not directly accessible, a possible method is to recover them by solving an inverse problem. The idea is to inject chemical species in the ground, and to measure their respective concentration. Then, a geologic configuration, compatible with the observation, could be determined. This work is devoted to a numerical study in 2-d of this reconstruction problem. Using the finite element package FreeFem++ we investigate the zoning problem by a method of boundary variations.

Résumé

La modélisation numérique du stockage des déchets nucléaires nécessite de connaître les paramètres physiques des couches géologiques afin d'évaluer l'impact d'une éventuelle propagation d'agents radioactifs dans le sol. Comme ces paramètres (porosité, perméabilité, etc.) ne sont pas directement accessibles, une des méthodes envisagées consiste à les retrouver en résolvant un problème inverse. Le principe est d'injecter dans le sol différents traceurs chimiques et à mesurer l'évolution de leur concentration. La résolution d'un problème inverse permet alors de déterminer une configuration géologique correspondant aux observations. Ce travail est dédié à l'étude numérique en 2-d de ce problème de reconstruction. À l'aide du logiciel d'éléments finis FreeFem++ on présente une approche du problème de zonage par méthode de variations de frontière.

Remerciements Ce travail a été effectué dans le cadre du GdR MoMaS CNRS-2439 supporté financièrement par l'ANDRA, le BRGM, le CEA et l'EDF que nous remercions à cette occasion.

Contents

1	Introduction	1
1.1	L'expérience du Mont Terri	2
2	Modèle simplifié	4
2.1	Le problème direct	4
2.1.1	Résolution numérique du problème direct	5
2.2	Problème Inverse	5
3	Optimisation	7
3.1	Optimisation paramétrique	7
3.1.1	Calcul des gradients par état adjoint	7
3.1.2	Algorithme Numérique	8
3.2	Optimisation Levelset et Géométrie	9
3.2.1	Calcul de la dérivée	10
3.2.2	Optimisation Levelset	12
3.2.3	Optimisation Géométrie	13
4	Application numérique	15
4.1	Optimisation paramétrique, résultats numériques	15
4.2	Optimisation géométrique, résultats numériques	17
5	Résolution du problème non stationnaire	21
5.1	Le problème direct	21
5.2	Optimisation	23
5.3	Régularisation	24
5.4	Application Numérique pour l'optimisation dans le cas non stationnaire	24
6	Conclusion	26

Chapter 1

Introduction

Le stockage des déchets nucléaires nécessite une bonne connaissance des couches géologiques afin d'évaluer l'impact d'une éventuelle propagation d'éléments radioactifs (ou radionucléides) dans le sol. A cet effet, l'une des méthodes envisagée consiste à injecter dans le sol différents éléments et à mesurer l'évolution de leur concentration. On détermine ensuite une configuration géologique correspondant aux observations. Une telle expérience a notamment été effectuée sur le Mont Terri [2] et [3]. Des simulations numériques 1-d ont aussi été effectuées sur ce problème [2] et [3]. Dans ce travail nous faisons une étude de faisabilité de tels calculs en 2-d à l'aide du logiciel d'éléments finis FreeFem++ [4]. Nous étudions principalement le problème du zonage qui consiste, connaissant les valeurs possibles des coefficients de porosité et de perméabilité, à retrouver les zones (ou sous-domaines) qui sont les supports de ces coefficients. Il s'agit d'un problème très proche des questions d'optimisation de formes et l'idée est de s'en inspirer et d'utiliser des techniques de variation de frontière, et plus précisément la méthode des lignes de niveaux [5], pour le résoudre.

Nous nous sommes donc attachés, dans ce rapport, à déterminer, sur un exemple simple, la faisabilité d'une telle méthode et ses limitations. A cet effet, nous avons étudié un problème modèle, où la concentration en éléments est régie par une simple équation de diffusion. De plus, nous nous limitons au cas bidimensionnel. Nous travaillons avec des données synthétiques pour ce problème inverse. Autrement dit, dans un premier temps, nous choisissons une forme précise des coefficients de diffusions du domaine et nous calculons la concentration résultante en résolvant le problème direct de diffusion. Dans un deuxième temps, on cherche à retrouver ces coefficients de diffusion, à partir de la seule donnée des concentrations sur tout ou partie du domaine. A cet effet, on cherche à minimiser la différence quadratique entre les champs de concentrations actuel et cible, calculé lors de la première étape. Le fait que les données du problème inverse ne sont pas issues de mesures effectuées sur le terrain mais d'une simulation numérique a un double avantage: on peut utiliser un modèle physique simplifié, et on peut comparer le champ de diffusion solution du problème inverse au champ de diffusion initial (qui est en pratique inconnu).

Notre rapport s'articule ainsi. Dans la première partie nous présentons succinctement l'expérience du Mont Terri qui a suscité notre étude. Le deuxième chapitre est consacré à la présentation du modèle étudié, du problème direct et du problème inverse. Dans le troisième chapitre, on introduit différentes méthodes numériques permettant la résolution du problème inverse dans le cas stationnaire. Il est suivi

d'un chapitre présentant les résultats numériques obtenus. Le cas instationnaire est abordé au chapitre cinq.

1.1 L'expérience du Mont Terri

L'expérience du Mont Terri consiste à suivre pendant une année, la diffusion de deux traceurs chimiques non réactifs dans l'argile à Opalinus afin de caractériser le comportement diffusif de la roche. Le site du Mont Terri est susceptible d'accueillir le stockage des déchets de longue durée de vie radioactive.

Le milieu pourrait présenter une zone endommagée avec variation des paramètres de porosité et de diffusion de part et d'autre de cette zone, dont la position exacte reste à préciser. Une étude de sensibilité par rapport à la position de cette coupure ainsi que la variation des paramètres induite par la modification de cette position est nécessaire.

Le traceur est injecté dans un forage de 0.035m de rayon entre deux packers séparés d'une distance h_1 de 0.548m. La géométrie du système est présentée sur la figure 1.1. Deux types de traceurs ont été utilisés: l'iode (non radioactif) et le tritium pour lequel le coefficient de décroissance radioactive vaut $1,78.10^{-9}s^{-1}$.

L'évolution de la concentration a été suivie dans la chambre d'injection durant toute la durée de l'expérience. D'autres mesures de concentration en fonction de la distance r ont également été obtenues en fin d'expérience.

L'expérience ayant été réalisée de manière à n'avoir qu'un problème de diffusion pur, l'évolution de la concentration en traceur suit la relation classique de diffusion dans un milieu poreux:

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x, t) - \operatorname{div}(D(x)\nabla c(x, t)) + \lambda w(x)c(x, t) = 0 \quad (1.1)$$

Où $c(x, t)$ est la concentration qui dépend de la position et du temps, $w(x)$ la porosité, $D(x)$ la diffusion et λ le coefficient de décroissance radioactive.

Nous devons ajouter des conditions aux limites et aussi de conditions initiales. Pour la condition initiale, la concentration est nulle à l'instant initiale $t = 0$. Pour les conditions aux limites, on suppose que le flux est partout nul, sauf au niveau de la chambre d'injection dans laquelle la concentration diminue au cours du temps, c'est à dire:

$$D\nabla c(x, t) \cdot n = g \quad \text{sur } \Gamma_{inj} \quad (1.2)$$

Nous cherchons à déterminer les champs D et w de diffusion et de porosité étant donnée la concentration c en traceur, mesurée sur tout ou partie du domaine.

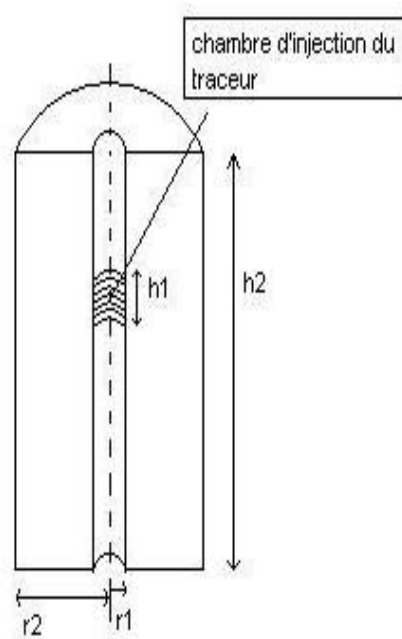


Figure 1.1: Géométrie du système

Chapter 2

Modèle simplifié

Dans ce chapitre nous considérons uniquement le cas stationnaire bidimensionnel et introduisons les problèmes direct et inverse.

2.1 Le problème direct

Soit Ω un ouvert borné. On suppose que la frontière $\partial\Omega$ se décompose en trois parties disjointes

$$\partial\Omega = \Gamma_{inj} \cup \Gamma_N \cup \Gamma_D.$$

La frontière Γ_{inj} correspond à la chambre d'injection, le long de laquelle le flux est donné par une fonction g . On impose de plus des conditions de type Neumann homogène sur Γ_N et Dirichlet homogène sur Γ_D . La condition de type Dirichlet homogène, si elle peut sembler artificielle vis à vis du problème étudié est nécessaire afin d'assurer l'existence d'une solution dans le cas stationnaire. A l'équilibre, la concentration $c(x)$ est régie par l'équation de diffusion,

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(D\nabla c) + \lambda wc = 0 & \text{dans } \Omega \\ D\nabla c \cdot n = g & \text{sur } \Gamma_{inj} \\ D\nabla c \cdot n = 0 & \text{sur } \Gamma_N \\ c = 0 & \text{sur } \Gamma_D \end{cases} \quad (2.1)$$

où $D(x)$ et $w(x)$ sont respectivement les coefficients de diffusion et de porosité, tandis que λ est le coefficient de décroissance radioactive. On suppose que de plus que D et w sont minorés par une borne strictement positive. La formulation variationnelle associée à l'équation aux dérivées partielles (2.1), consiste à déterminer

$$c \in V := \{H^1(\Omega); c = 0 \text{ sur } \Gamma_D\}$$

tel que

$$\int_{\Omega} (D\nabla c \cdot \nabla \phi + \lambda wc\phi) dx = \int_{\Gamma_{inj}} g\phi ds \text{ pour tout } \phi \in V \quad (2.2)$$

Posons $a(c, \phi) = \int_{\Omega} (D\nabla c \cdot \nabla \phi + \lambda wc\phi) dx$ et $L(\phi) = \int_{\Gamma_{inj}} g\phi ds$. La forme bilinéaire a est continue, coercive sur l'espace de Hilbert V . Ainsi, le théorème de Lax-Milgram assure l'existence et l'unicité d'une solution au problème variationnel (2.2) et par

conséquence l'existence et l'unicité d'une solution de (2.1). On note $c(D, w)$ cette solution.

2.1.1 Résolution numérique du problème direct

On utilise la méthode d'approximation de Galerkin afin de résoudre numériquement le problème variationnel (2.2). On note V_h un espace d'éléments finis de Lagrange P_1 ou P_2 inclus dans V et c_h l'unique élément de V_h tel que

$$\int_{\Omega} (D \nabla c_h \cdot \nabla \phi_h + \lambda w c_h \phi_h) dx = \int_{\Gamma_{inj}} g \phi_h ds \text{ pour tout } \phi_h \in V_h \quad (2.3)$$

Le problème discret est résolu à l'aide du logiciel libre **FreeFem++** [4]. La figure 2.2 représente la concentration c obtenue, où $\Omega =]-1, 1[\times]0, 1[$ est représenté à la figure 2.1, La zone d'injection est $\Gamma_{inj} = \{1\} \times]0, 0.3[$,

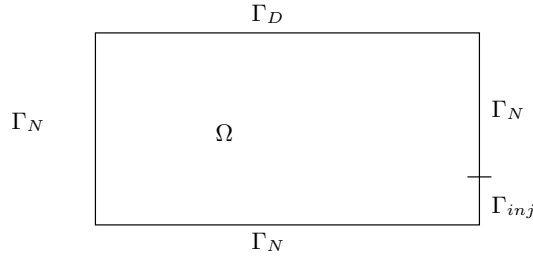


Figure 2.1: Domaine de travail

les coefficients de diffusion et de porosité sont donnés par

$$D(x) = \begin{cases} 2 & \text{si } -1 < x < 1 \text{ et } 0.2 < y < 0.8 \\ 0.5 & \text{sinon} \end{cases}$$

$$w(x) = e^{x+y},$$

enfin, le coefficient de décroissance radioactive est

$$\lambda = 1.$$

2.2 Problème Inverse

La résolution pratique du problème inverse consiste à minimiser une fonctionnelle coût, erreur quadratique entre les données calculées et les données “observées”. A cet effet, une méthode de type gradient est utilisée.

Dans notre travail nous considérons deux types de fonctionnelles, l'une évaluant l'erreur quadratique sur une partie Γ_0 du bord, l'autre sur tout le domaine Ω ,

$$J_1(D, w) = \|c(D, w) - c_d\|_{L^2(\Omega)}^2, \quad (2.4)$$

soit

$$J_2(D, w) = \|c(D, w) - c_d\|_{L^2(\Gamma_0)}^2 \quad (2.5)$$

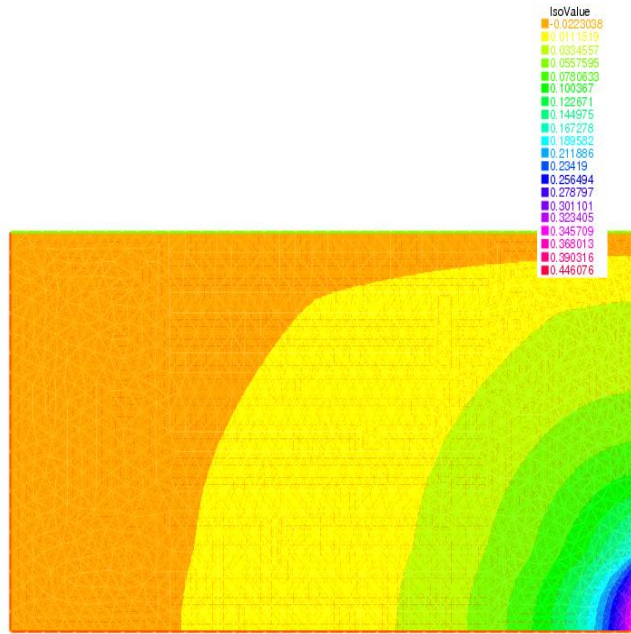


Figure 2.2: Solution du problème direct

où $c_d = c(D_d, w_d)$ est la concentration de référence, solution du problème direct pour des coefficients de diffusion et de porosité D_d et w_d donnés a priori. Nous abordons deux types de méthodes d'optimisation différentes, paramétrique et géométrique.

Chapter 3

Optimisation

Dans ce chapitre nous allons considérer deux types d'optimisation, l'optimisation paramétrique où nous supposons que les coefficients w et D sont assez réguliers et l'optimisation géométrique où ces coefficients présentent des discontinuités. Nous étudions aussi quelques aspects concernant la régularisation du gradient.

3.1 Optimisation paramétrique

L'optimisation paramétrique est bien adaptée lorsque les champs de diffusion et de porosité sont réguliers. Afin d'implémenter une méthode de type gradient en vue de minimiser J_1 ou J_2 , il est nécessaire de déterminer (au moins formellement) leurs dérivées par rapport aux paramètres D et w .

3.1.1 Calcul des gradients par état adjoint

Dans cette section, nous déterminons formellement les dérivées de J_1 et J_2 par rapport aux paramètres D et w . Seul le calcul de la différentielle de J_1 est détaillé, celle de J_2 s'obtenant de manière similaire.

Soit

$$j_1(c) = \|c - c_d\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

Le problème de minimisation de J_1 équivaut à minimiser $j_1(c)$, sous la contrainte “ c est solution de l'équation d'état (2.2)”. Le Lagrangien associé est défini par

$$\mathcal{L}(D, w, c, p) = j_1(c) - \int_{\Omega} (D \nabla c \cdot \nabla p + \lambda w c p) dx + \int_{\Gamma_{inj}} g p ds \quad (3.1)$$

En dérivant (3.1) par rapport à c suivant un élément $q \in V$ nous trouvons

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial c}, q \right\rangle = \int_{\Omega} 2(c - c_d) q ds - \int_{\Omega} (D \nabla p \cdot \nabla q + \lambda w p q) dx. \quad (3.2)$$

Si cette dérivée (3.2) s'annule, on obtient la formulation variationnelle du problème dit adjoint, dont la solution est notée $p(D, w)$,

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(D(x) \nabla p(x)) + \lambda w(x) p(x) = 2(c - c_d) & \text{dans } \Omega \\ D \nabla p \cdot n = 0 & \text{sur } \Gamma_N \cup \Gamma_{inj} \\ p = 0 & \text{sur } \Gamma_D \end{cases} \quad (3.3)$$

où $c = c(D, w)$.

La dérivée du Lagrangien par rapport à c s'annule en $(D, w, c(D, w), p(D, w))$. Or, pour tout p , on a

$$J_1(D, w) = \mathcal{L}(D, w, c(D, w), p).$$

Ainsi, pour toute fonction test E , on a

$$\langle \frac{\partial J_1}{\partial D}(D, w), E \rangle = \langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial D}(D, w, c(D, w), p), E \rangle + \langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial c}(D, w, c(D, w), p), \langle \frac{\partial c}{\partial D}(D, w), E \rangle \rangle.$$

En particulier, pour $p = p(D, w)$, on obtient

$$\langle \frac{\partial J_1}{\partial D}(D, w), E \rangle = \langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial D}(D, w, c(D, w), p(D, w)), E \rangle$$

et finalement

$$\langle \frac{\partial J_1}{\partial D}, E \rangle = - \int_{\Omega} (\nabla c \cdot \nabla p) E dx \quad (3.4)$$

où $c = c(D, w)$ et $p = p(D, w)$. De même, on obtient que pour toute fonction test v ,

$$\langle \frac{\partial J_1}{\partial w}, v \rangle = - \int_{\Omega} (\lambda p c) v dx \quad (3.5)$$

Dans le cas de la fonctionnelle J_2 , nous obtenons les mêmes expressions pour les dérivées, seul change l'état adjoint défini par

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(D(x)\nabla p(x)) + \lambda w(x)p(x) = 0 & \text{dans } \Omega \\ D\nabla p \cdot n = 0 & \text{sur } \Gamma_{inj} \cup \Gamma_N \setminus \Gamma_0 \\ D\nabla p \cdot n = 2(c - c_d) & \text{sur } \Gamma_0 \\ p = 0 & \text{sur } \Gamma_D \end{cases}, \quad (3.6)$$

où l'on a supposé que $\Gamma_0 \subset \Gamma_{inj} \cup \Gamma_N$.

3.1.2 Algorithme Numérique

Nous pouvons mettre en oeuvre une méthode de gradient afin de minimiser J_1 ou J_2 . On se limite à un ensemble admissible de la forme

$$\mathcal{U}_{ad} = \{D, w \in L^\infty(\Omega), w_{min} \leq w \leq w_{max}, D_{min} \leq D \leq D_{max}\}.$$

Soit $\mu > 0$ le pas de descente nous calculons D_n et w_n par la récurrence suivante.

1. Nous choisissons des conditions initiales $w_0, D_0 \in \mathcal{U}_{ad}$
2. Pour $n \geq 0$:

$$\begin{pmatrix} w_{n+1} \\ D_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \max(w_{min}, \min(w_{max}, w_n - \mu_n \frac{\partial J}{\partial w})) \\ \max(D_{min}, \min(D_{max}, D_n - \mu_n \frac{\partial J}{\partial D})) \end{pmatrix}$$

où $J = J_1$ ou J_2 .

Dans cet algorithme nous supposons que le pas de descente μ est fixe, mais nous pouvons aussi le faire varier afin d'accélérer la convergence. Par exemple nous pouvons utiliser le critère suivante pour mettre à jour le pas de descente:

1. Pour $n \geq 0$, on calcule c_{n+1} et p_{n+1} et on compare la fonction objective J_{n+1} avec J_n .
 - Si $J_{n+1} > J_n$, alors on recalcule D_{n+1} , w_{n+1} et c_n en utilisant un pas plus petit, disons $\frac{\mu}{2}$.
 - Si $J_{n+1} \leq J_n$, alors on garde les valeurs rencontrés et de plus on augmente le pas, par exemple on peut prendre $1.1 \times \mu$.

3.2 Optimisation Levelset et Géométrie

Lors de l'optimisation paramétrique nous avons supposé que les coefficients w et D sont des fonctions régulières. Dans cette section nous considérons le cas de coefficients constants par morceaux. Pour simplifier l'exposé, on suppose w fixe et déterminé. Ainsi, J_1 et J_2 ne dépendent que de D . On recherche D de la forme

$$D_0\chi + (1 - \chi)D_1, \quad (3.7)$$

où χ est donnée par:

$$\chi(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in \omega \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

et ω est un ouvert inclus dans Ω (voir figure (3.1)).

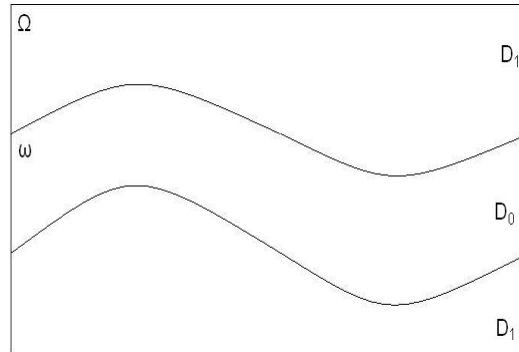


Figure 3.1: exemple diffusion constante par morceaux.

L'ensemble des configurations admissibles n'est plus un espace vectoriel. Il faut donc donner un nouveau sens à la dérivation de la fonction objectif. Pour cela on suit la méthode d'Hadamard [6].

Soit θ un champ de vecteurs sur Ω tel que $\theta \cdot n = 0$ sur le bord. On note $X : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \Omega$ la solution de l'équation

$$\begin{cases} \frac{\partial X}{\partial t}(x, t) = -\theta(x), & \text{pour tout } x, t \in \Omega \times \mathbb{R} \\ X(x, 0) = x, & \text{pour tout } x \in \Omega. \end{cases}$$

Pour tout champ de diffusion D et tout réel t , on note $D_\theta(t)$ le champ de diffusion obtenu en transportant D par θ . En d'autres termes,

$$D_\theta(t)(x) = D(X(x, t)).$$

On pose alors $J_\theta(t) = J(D_\theta(t))$ et on note

$$\left\langle \frac{\partial J}{\partial D}(D_0), \theta \right\rangle = \frac{dJ_\theta}{dt}(0).$$

En toute rigueur, il faudrait introduire une notation différente de la notation utilisée pour la dérivation classique dans la section 3.1. Cependant, les fonctions tests étant de nature différente, il n'y a pas ambiguïté.

3.2.1 Calcul de la dérivée

On propose deux méthodes distinctes afin de calculer les dérivées de J_1 et de J_2 dans le cas d'un champ D constant par morceaux. Un calcul similaire a été effectué dans [1] mais nous trouvons un résultat différent qui nous semble juste.

Méthode 1

Le calcul de la nouvelle dérivée introduite se déduit des calculs effectués précédemment. Supposons que le champ de coefficients de diffusion D soit régulier et non discontinu. Dans ce cas,

$$\frac{dD_\theta}{dt}(0) = -\nabla D \cdot \theta.$$

Ainsi, d'après l'expression (3.4) de la dérivée de J_1 par rapport à D , il vient

$$\left\langle \frac{\partial J_1}{\partial D}, \theta \right\rangle = \int_{\Omega} (\nabla c \cdot \nabla p)(\nabla D \cdot \theta) dx.$$

On suppose de plus qu'il existe un champ de vecteurs n tel que, si τ est le champ de vecteur orthogonal à n , $D\nabla u \cdot n$, $D\nabla p \cdot n$, $\nabla u \cdot \tau$ et $\nabla p \cdot \tau$ sont des fonctions régulières. On a

$$\nabla c \cdot \nabla p = (\nabla c \cdot n)(\nabla p \cdot n) + (\nabla c \cdot \tau)(\nabla p \cdot \tau).$$

On obtient ainsi l'expression suivante de la dérivée de J_1

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial J_1}{\partial D}, \theta \right\rangle &= \int_{\Omega} (\nabla c \cdot \tau)(\nabla p \cdot \tau) \nabla D \cdot \theta + (D\nabla c \cdot n)(D\nabla p \cdot n)(D^{-2} \nabla D \cdot \theta) dx \\ &= \int_{\Omega} (\nabla c \cdot \tau)(\nabla p \cdot \tau) \nabla D \cdot \theta - (D\nabla c \cdot n)(D\nabla p \cdot n)(\nabla D^{-1} \cdot \theta) dx. \end{aligned}$$

Par intégration par partie, on obtient

$$\left\langle \frac{\partial J_1}{\partial D}, \theta \right\rangle = - \int_{\Omega} \operatorname{div}((\nabla c \cdot \tau)(\nabla p \cdot \tau)\theta) D - \operatorname{div}((D\nabla c \cdot n)(D\nabla p \cdot n)\theta) D^{-1} dx. \quad (3.8)$$

Jusqu'à présent, on a supposé D régulier. Si on considère un champ de diffusion D de la forme (3.7), il est raisonnable de considérer qu'on peut construire une suite régulière de champs $(D_k)_{k \geq 1}$ convergeant vers D telle que $\nabla c_k \cdot \tau$, $\nabla p_k \cdot \tau$, $D_k \nabla c_k \cdot n$ et $D_k \nabla p_k \cdot n$ convergent, le champ de vecteur n étant un prolongement du champ de vecteur normal au bord de ω . En effet, si D est de la forme (3.7), et que la frontière de ω est régulière, les fonctions précédentes sont régulières. En particulier, il n'y a

pas de saut de $D\nabla c \cdot n$ et $D\nabla p \cdot n$ à l'interface. En passant à la limite dans (3.8), on obtient suite à une intégration par partie sur ω et son complémentaire

$$\left\langle \frac{\partial J_1}{\partial D}, \theta \right\rangle = \int_{\partial\omega} (\nabla c \cdot \tau)(\nabla p \cdot \tau)(\theta \cdot n)[D]_{\partial\omega} - (D\nabla c \cdot n)(D\nabla p \cdot n)(\theta \cdot n)[D^{-1}]_{\partial\omega} ds,$$

où n est la normale extérieure à ω et $[\cdot]_{\partial\omega}$ désigne le saut de la fonction située entre crochet le long de la frontière de ω

$$[D]_{\partial\omega} = D_1 - D_0, \text{ et } [D^{-1}]_{\partial\omega} = D_1^{-1} - D_0^{-1}.$$

Si on choisit $D_1 = 0$ dans la formule précédente, on reconnaît la dérivée de forme "classique", étant donné que $\nabla p \cdot n = \nabla u \cdot n = 0$ sur le bord de ω . Ces résultats se généralisent sans mal lorsqu'on considère la dérivée par rapport à w et les dérivées de J_2 . Notons que la dérivée de J_1 par rapport à D n'est en général pas correctement définie, les fonctions $\nabla c \cdot \tau$, $\nabla p \cdot \tau$, $D\nabla c \cdot n$ et $D\nabla p \cdot n$ n'appartenant qu'à $H^{-1/2}(\partial\omega)$.

Méthode 2

On note $\Omega_0 = \omega$ et $\Omega_1 = \Omega \setminus \bar{\omega}$ et γ l'interface entre les deux milieux. On suppose que $\Gamma_{inj} \subset \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega$. On introduit le Lagrangien

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\gamma, c_0, c_1, p_0, p_1) = & \int_{\Omega_0} |c - c_0|^2 dx + \int_{\Omega_1} |c - c_1|^2 dx \\ & - \int_{\Omega_0} D_0 \nabla c_0 \cdot \nabla p_0 dx - \int_{\Omega_1} D_1 \nabla c_1 \cdot \nabla p_1 dx + \int_{\Gamma_{inj}} gp_1 ds \\ & - \frac{1}{2} \int_{\gamma} \left(D_0 \frac{\partial p_0}{\partial n_0} - D_1 \frac{\partial p_1}{\partial n_1} \right) (c_1 - c_0) + \left(D_0 \frac{\partial c_0}{\partial n_0} - D_1 \frac{\partial c_1}{\partial n_1} \right) (p_1 - p_0) dx, \end{aligned}$$

où c_0 , c_1 , p_0 et p_1 sont des fonctions $H^1(\Omega)$, nulles sur Γ_D , et n_0 est la normale extérieur à Ω_0 et n_1 est la normale extérieur à Ω_1 . Dans la suite on notera $n = n_0 = -n_1$ (même si cela détruit la forme symétrique du Lagrangien). Soit $c(\gamma)$ la concentration associée à une position γ de l'interface. Soit c_0 et c_1 tels que $c_0 = c(\gamma)$ sur Ω_0 et $c_1 = c(\gamma)$ sur Ω_1 . On a

$$\begin{aligned} & - \int_{\Omega_0} D_0 \nabla c_0 \cdot \nabla p_0 dx - \int_{\Omega_1} D_1 \nabla c_1 \cdot \nabla p_1 dx + \int_{\Gamma_{inj}} gp_1 ds \\ & + \frac{1}{2} \int_{\gamma} \left(D_0 \frac{\partial p_0}{\partial n} + D_1 \frac{\partial p_1}{\partial n} \right) (c_1 - c_0) + \left(D_0 \frac{\partial c_0}{\partial n} + D_1 \frac{\partial c_1}{\partial n} \right) (p_1 - p_0) dx \\ & = \int_{\Omega_0} \nabla \cdot (D_0 \nabla c_0) p_0 dx + \int_{\Omega_1} \nabla \cdot (D_1 \nabla c_1) p_1 dx - \int_{\gamma} \left(D_0 \frac{\partial c_0}{\partial n} p_0 - D_1 \frac{\partial c_1}{\partial n} p_1 \right) ds \\ & \quad + \int_{\Gamma_{inj}} \left(g - D_1 \frac{\partial c_1}{\partial n} \right) p_1 ds \\ & - \frac{1}{2} \int_{\gamma} \left(\left(D_0 \frac{\partial p_0}{\partial n} + D_1 \frac{\partial p_1}{\partial n} \right) (c_1 - c_0) + \left(D_0 \frac{\partial c_0}{\partial n} + D_1 \frac{\partial c_1}{\partial n} \right) (p_1 - p_0) \right) ds \end{aligned}$$

Or $\nabla \cdot (D\nabla c) = 0$ dans $\Omega_0 \cup \Omega_1$, $D_1 \partial c_1 / \partial n = g$ sur Γ_{inj} . De plus, $c_0 = c_1$ et $D_0 \partial c_0 / \partial n = D_1 \partial c_1 / \partial n$ à l'interface γ . On en déduit que pour toute fonction p_0 et

p_1 , on a

$$\begin{aligned} & - \int_{\Omega_0} D_0 \nabla c_0 \cdot \nabla p_0 dx - \int_{\Omega_1} D_1 \nabla c_1 \cdot \nabla p_1 dx + \int_{\Gamma_{inj}} g p_1 ds \\ & + \frac{1}{2} \int_{\gamma} \left(D_0 \frac{\partial p_0}{\partial n} + D_1 \frac{\partial p_1}{\partial n} \right) (c_1 - c_0) + \left(D_0 \frac{\partial c_0}{\partial n} + D_1 \frac{\partial c_1}{\partial n} \right) (p_1 - p_0) dx = 0 \end{aligned}$$

On vérifie sans mal que l'état adjoint (3.3) annule les dérivées partielles de $\mathcal{L}$ par rapport à c_0 et c_1 . Ainsi,

$$J_1(D) = \mathcal{L}(\gamma, c, c, p, p),$$

où c et p sont solutions de l'équation d'état et de l'équation adjointe. De plus,

$$\left\langle \frac{\partial J_1}{\partial D}, \theta \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \gamma}(\gamma, c, c, p, p), \theta \right\rangle.$$

Afin d'obtenir l'expression de la dérivée de J_1 , il suffit donc de calculer la dérivée de J_1 par rapport à γ en (γ, c, c, p, p) . On a

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \gamma}, \theta \right\rangle &= - \int_{\gamma} (D_0(\nabla c_0 \cdot \nabla p_0) - D_1(\nabla c_1 \cdot \nabla p_1)) (\theta \cdot n) ds \\ &- \frac{1}{2} \int_{\gamma} \frac{\partial}{\partial n} \left(\left(D_0 \frac{\partial p_0}{\partial n} + D_1 \frac{\partial p_1}{\partial n} \right) (c_1 - c_0) + \left(D_0 \frac{\partial c_0}{\partial n} + D_1 \frac{\partial c_1}{\partial n} \right) (p_1 - p_0) \right) (\theta \cdot n) ds. \end{aligned}$$

Notons que les termes de courbures apparaissant dans la dérivation de l'intégrale le long de γ sont nuls. Enfin, en utilisant que $c_0 = c_1$ et que $p_0 = p_1$ sur γ , il vient

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \gamma}, \theta \right\rangle &= - \int_{\gamma} (D_0(\nabla c_0 \cdot \nabla p_0) - D_1(\nabla c_1 \cdot \nabla p_1)) (\theta \cdot n) ds \\ &- \frac{1}{2} \int_{\gamma} \left(\left(D_0 \frac{\partial p_0}{\partial n} + D_1 \frac{\partial p_1}{\partial n} \right) \left(\frac{\partial c_1}{\partial n} - \frac{\partial c_0}{\partial n} \right) + \left(D_0 \frac{\partial c_0}{\partial n} + D_1 \frac{\partial c_1}{\partial n} \right) \left(\frac{\partial p_1}{\partial n} - \frac{\partial p_0}{\partial n} \right) \right) (\theta \cdot n) ds. \end{aligned}$$

En utilisant la continuité de la dérivée tangentielle et du flux à l'interface, on obtient

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \gamma}, \theta \right\rangle &= - \int_{\gamma} \left((D_0^{-1} - D_1^{-1}) D \frac{\partial c}{\partial n} D \frac{\partial p}{\partial n} + (D_0 - D_1) \frac{\partial c}{\partial \tau} \frac{\partial p}{\partial \tau} \right. \\ &\quad \left. - D \frac{\partial p}{\partial n} (D_1^{-1} - D_0^{-1}) D \frac{\partial c}{\partial n} - D \frac{\partial c}{\partial n} (D_1^{-1} - D_0^{-1}) D \frac{\partial p}{\partial n} \right) (\theta \cdot n) ds. \end{aligned}$$

Soit

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \gamma}, \theta \right\rangle = \int_{\gamma} \left([D]_{\gamma} (\nabla c \cdot \tau) (\nabla p \cdot \tau) - [D^{-1}]_{\gamma} (\nabla c \cdot n) (\nabla p \cdot n) \right) (\theta \cdot n) ds.$$

On retrouve l'expression de la dérivée de J_1 obtenue par la première méthode.

3.2.2 Optimisation Levelset

On suppose que les coefficients de diffusion ne prennent que deux valeurs D_0 et D_1 , c'est à dire sont de la forme (3.7). Dans ce cas, il peut être décrit par une fonction $\psi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ où

$$D(\psi) = \chi_{\psi > 0} D_0 + (1 - \chi_{\psi > 0}) D_1,$$

et $\chi_{\psi>0}$ est la fonction à valeurs dans $\{0, 1\}$, égale à 1 sur l'ensemble des x tels que $\psi(x) > 0$. On rappelle que la dérivée de la fonction coût (par exemple de J_1) est de la forme

$$\left\langle \frac{\partial J_1}{\partial D}, \theta \right\rangle = \int_{\partial\omega} v(\theta \cdot n) ds,$$

où

$$v = ((\nabla c \cdot \tau)(\nabla p \cdot \tau)[D]_{\partial\omega} - D(\nabla c \cdot n)D(\nabla p \cdot n)[D^{-1}]_{\partial\omega}).$$

De plus, on a

$$[D]_{\partial\omega} = D_1 - D_0, \quad [D^{-1}]_{\partial\omega} = D_1^{-1} - D_0^{-1},$$

la normal n à $\partial\omega$ peut être définie par

$$n = \nabla\psi / |\nabla\psi|.$$

En utilisant ces expressions, v peut être défini sur tout Ω et pas seulement sur la frontière de ω .

Enfin, si la frontière de la forme ω est transportée à la vitesse $-vn$, la fonction coût décroît jusqu'à un minimum local. La forme étant décrite par la fonction ψ , il suffit de transporter chaque lignes de niveau de ψ suivant une vitesse normale égale à $-v$. La fonction ψ est alors solution de l'équation d'Hamilton-Jacobi

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} - v|\nabla\psi| = 0, \tag{3.9}$$

où t est un temps virtuel. En effet, si $x(t)$ est un point d'un ligne de niveau se déplaçant à la vitesse $-vn$, on a $\psi(t, x(t)) = 0$. En dérivant cette équation et d'après l'expression de n en fonction de ψ , on obtient (3.9).

3.2.3 Optimisation Géométrique

Dans la méthode d'optimisation par levelset, on a supposé que la valeur de la diffusion ne pouvait prendre que deux valeurs distincte. Nous n'effectuons plus d'hypothèse de ce type lors de l'optimisation géométrique décrite ci-après. Afin de minimiser J_1 ou J_2 par rapport à D , on souhaite utiliser une méthode de type gradient. Considérons par exemple le cas de la minimisation de J_1 . A chaque étape, D_{n+1} est défini est fonction de D_n par

$$D_{n+1} = D_{\theta_n, D_n}(\mu),$$

où μ est un petit pas de temps et θ_n un champ de vecteur tel que

$$\left\langle \frac{\partial J_1}{\partial D}(D_n), \theta_n \right\rangle < 0.$$

Ainsi, D_{n+1} est obtenu en convectant D_n le long du champ θ_n . Notons que D_{n+1} peut-être calculé simplement sous **FreeFem++** à l'aide de la fonction **convect**. S'il n'existe pas de tel champ θ_n , on a atteint un minimum local. Si un tel champ existe, il n'est pas unique. Il reste à sélectionner une "bonne direction de descente". On peut définir θ_n comme solution d'un problème variationnel du type

$$(\theta_n, \theta)_W = -\left\langle \frac{\partial J_1}{\partial D}(D_n), \theta \right\rangle, \tag{3.10}$$

où W est un espace de Hilbert et $(.,.)_W$ son produit scalaire. Le choix de W et du produit scalaire à utiliser est délicat. Nous avons opté pour

$$W := \{\theta \in H^1(\Omega)^2 : \theta \cdot n = 0 \text{ sur } \partial\Omega\},$$

et

$$\|\theta\|_W^2 = \alpha \|\nabla \theta\|_{L^2}^2 + \|\theta\|_{L^2}^2.$$

Le paramètre α est un réel positif qui nous permet de contrôler la régularité de θ_n . Plus α est grand, plus θ_n sera régulier, mais plus la convergence sera lente. Un procédé similaire peut être utilisé afin de régulariser les directions de descente dans le cas paramétrique.

Chapter 4

Application numérique

Le but de ce chapitre est de tester l'efficacité de notre méthode pour la détermination des coefficients w et D . Nous présentons quelques résultats obtenus par la méthode d'optimisation paramétrique, puis géométrique. L'implantation des algorithmes a été effectuée sous **FreeFem++**[4]. Le domaine de calcul utilisé est identique à celui introduit dans la section 2.1.1. De plus, on évalue J_2 sur la partie $\Gamma_0 = \{1\} \times]0.3, 1[$ du bord. Tous les calculs ont été effectués avec adaptation de maillage. La résolution des problèmes directs et adjoints à l'aide d'éléments finis de Lagrange P2.

4.1 Optimisation paramétrique, résultats numériques

Notre but est de calculer les coefficients w et D qui minimisent la fonctionnelle J_2 (2.5) où on n'utilise que les données sur le bord Γ_0 du domaine.

Nous avons considéré le cas où w_d et D_d étaient définis par:

$$w_d = x^2 + y^2 + \varepsilon \quad \text{et} \quad D_d = 2x^2 + 3y^2 + \varepsilon$$

avec $\varepsilon = 0.0001$, nous allons utiliser l'algorithme de descente à pas variable décrit dans la section 3.1.2, après régularisation de la direction de descente. Les conditions initiales pour w^0 et D^0 choisies sont $w_0 = D_0 = 0.5$. De plus nous avons fixé $w_{min} = 0.001$, $D_{min} = 0.01$, $w_{max} = 2.1$ et $D_{max} = 2$. La figure 4.1 compare les coefficients de diffusion obtenus avec les coefficients donnés D_d . La figure 4.2 compare les coefficients de porosité des deux configurations. Enfin, la figure 4.3 compare la valeur des concentrations c obtenues. La reconstruction n'est pas parfaite, même si les grandes tendances sont respectées.

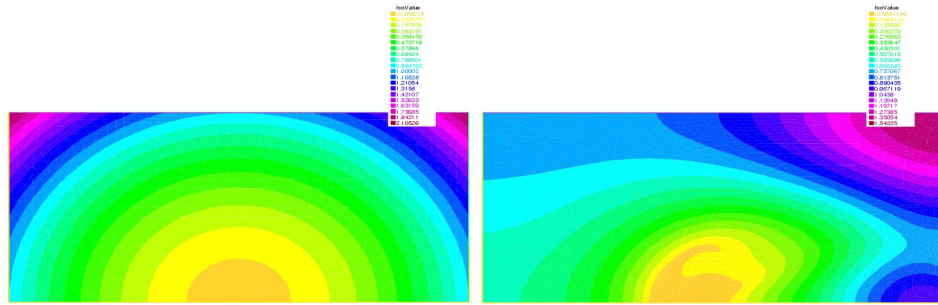


Figure 4.1: valeurs du coefficient de diffusion D_d donné (à gauche) et calculé D (à droite)

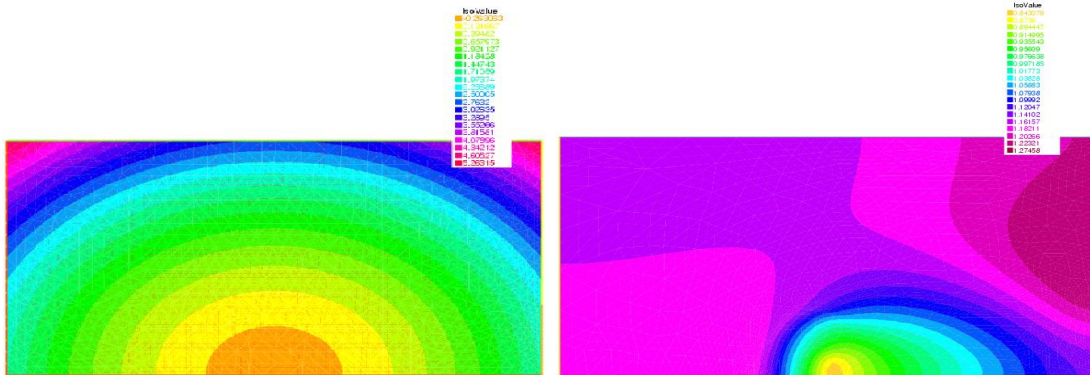


Figure 4.2: valeurs du coefficient de porosité w_d donné (à gauche) et calculé w (droite)

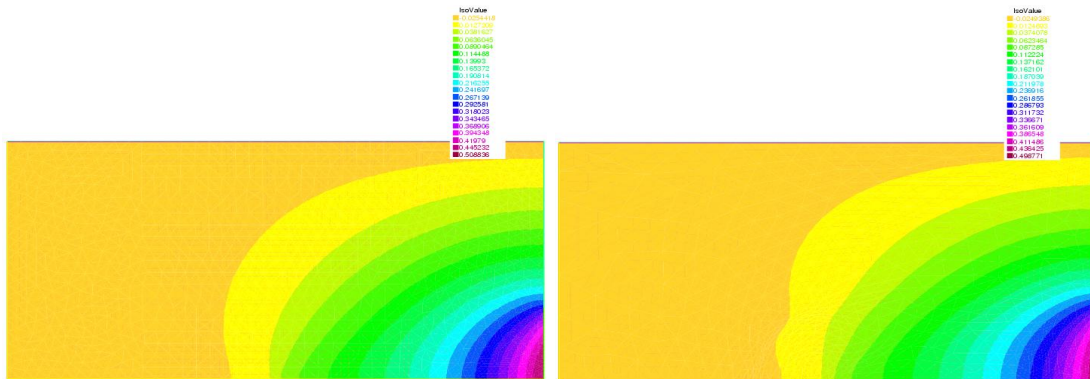


Figure 4.3: concentration “mesurée” $c(D_d, w_d)$ (à gauche), comparée à la concentration calculée $c(D, w)$ (à droite)

4.2 Optimisation géométrique, résultats numériques

On suppose le coefficient de porosité w nul et que le champ de coefficients de diffusion donné D_d est de la forme

$$D_d = \begin{cases} 2 & \text{si } 0.2 \leq y \leq 0.8 \\ 0.5 & \text{sinon} \end{cases}$$

Dans un premier temps, on choisit comme champ de diffusion initial D_0 proche des données:

$$D_0 = \begin{cases} 2 & \text{si } 0.34 \leq y \leq 0.68 \\ 0.5 & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.1)$$

La figure 4.4 compare les valeurs des coefficients de diffusion cibles c_d et calculés par la méthode d'optimisation géométrique de la fonctionnelle J_1 où on utilise les données sur tout le domaine Ω . La figure 4.5 compare les concentrations associées. Les figures 4.6 et 4.7 fournissent les mêmes données dans le cas de l'optimisation de J_2 où on utilise les données sur une partie du bord seulement. Comme on pouvait s'y attendre, la forme optimisée est plus proche de la forme cible lorsqu'on minimise J_1 plutôt que J_2 . La fonctionnelle J_1 contient plus d'informations que la fonctionnelle J_2 , puisqu'elle compare les concentrations sur tout le domaine Ω , alors que J_1 n'évalue que l'écart quadratique sur une partie du bord.

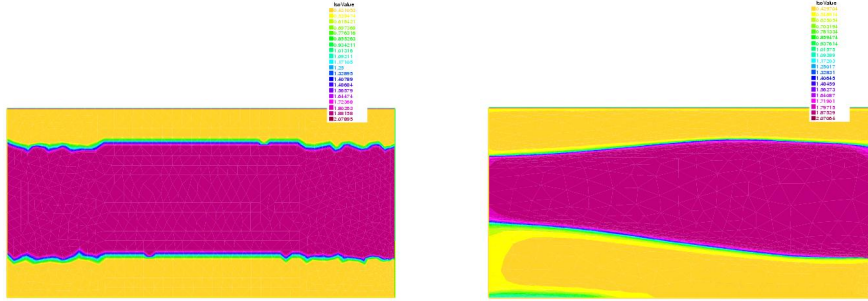


Figure 4.4: valeur du coefficient du problème direct D (gauche) et valeur du coefficient du problème inverse (droite) avec $J_1 = \|c - c_d\|_{L^2(\Omega)}^2$.

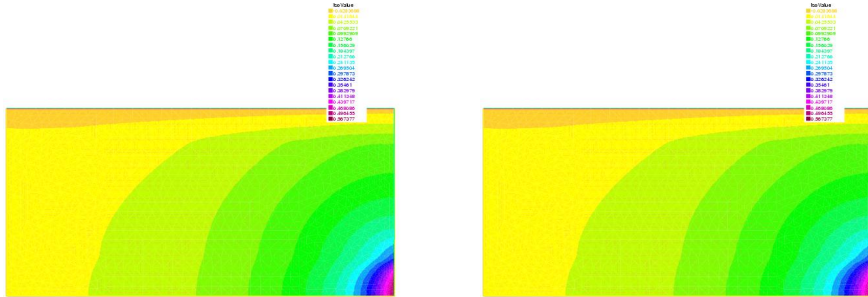


Figure 4.5: valeur trouvée de la concentration pour le problème direct (gauche) et pour le problème inverse (droite) avec $J_1 = \|c - c_d\|_{L^2(\Omega)}^2$.

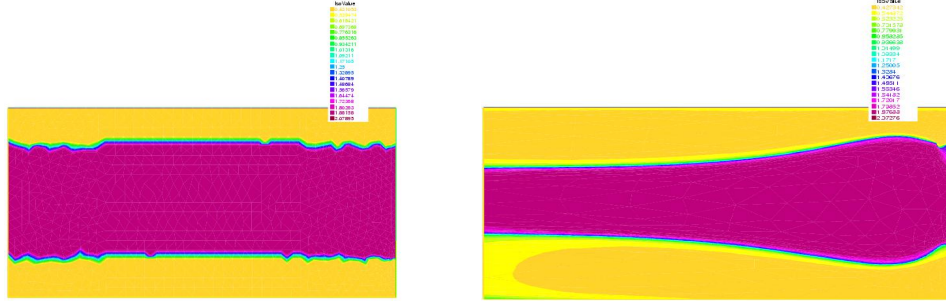


Figure 4.6: valeur du coefficient du problème direct D (gauche) et valeur du coefficient du problème inverse (droite) avec $J_2 = \|c - c_d\|_{L^2(\Gamma_0)}^2$.

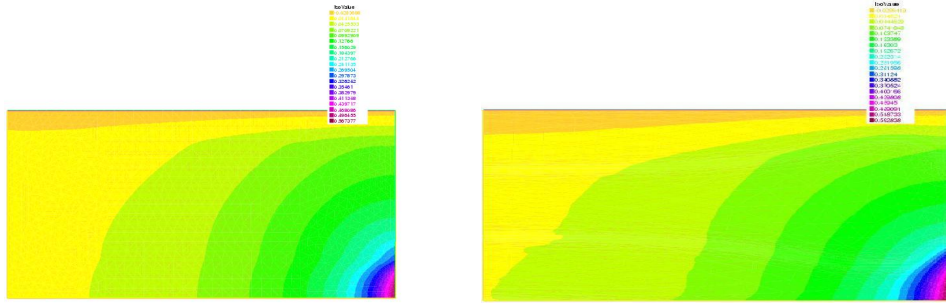


Figure 4.7: valeur trouvée de la concentration pour le problème direct (gauche) et pour le problème inverse (droite) avec $J_2 = \|c - c_d\|_{L^2(\Gamma_0)}^2$.

Lors des simulations précédentes nous avons choisi une bonne initialisation des coefficients de diffusion, proche des coefficients cibles. Une initialisation moins bien adaptée conduit à des résultats différents. Ceci pour deux raisons. Tout d'abord, le processus itératif peut se trouver bloqué en un minimum local. D'autre part, il peut converger vers un minimum global, annulant la fonction coût, mais différent de la cible. En d'autres termes, le problème de minimisation de J_1 (et encore moins de J_2) n'admet nécessairement un unique minimum. Ainsi, plusieurs solutions peuvent être obtenues. La Figure 4.9 représente la solution obtenue par optimisation géométrique de la fonctionnelle J_2 en utilisant les mêmes données que dans les simulations précédentes, mais avec une initialisation des coefficients de diffusion D donnés par la forme 4.8. Les résultats obtenus sont très différents non seulement des coefficients cibles D_a , mais aussi des résultats de la Figure 4.6 obtenus précédemment (basés sur l'initialisation $D = D_0$ de 4.1). Cependant, la fonction coût J_2 atteint des valeurs très faibles (de l'ordre de 10^{-4}), bien que supérieures aux valeurs obtenues lors de la simulation précédente (de l'ordre de 10^{-6}).

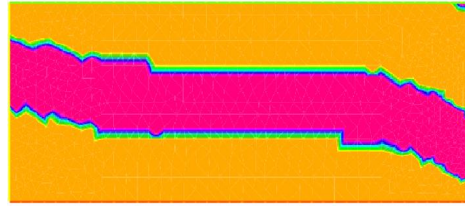


Figure 4.8: forme initiale

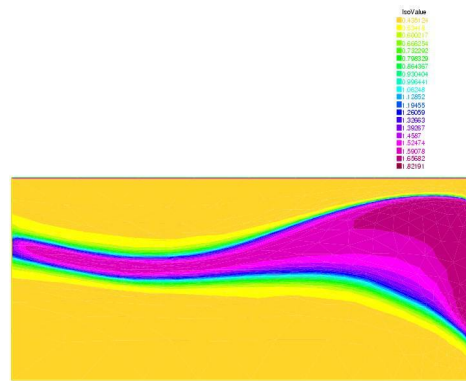
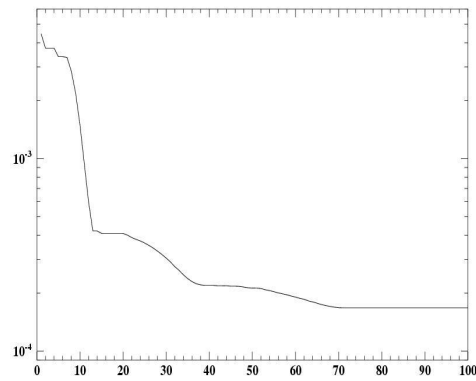


Figure 4.9: coefficient de diffusion

Figure 4.10: fonction objectif J_2 en fonction des itérations dans une échelle logarithme, la forme initiale étant donnée par la Figure 4.8

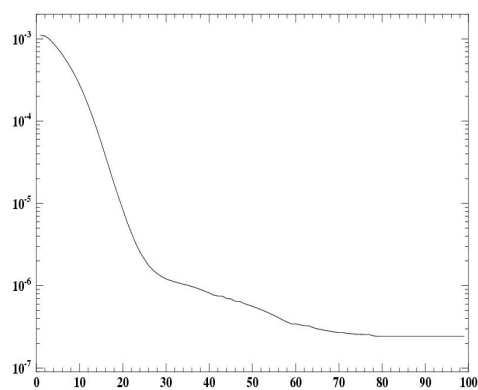


Figure 4.11: fonction objectif J_2 en fonction des itérations dans une échelle logarithme, où D est initialisé par D_0 (4.1)

Chapter 5

Résolution du problème non stationnaire

On s'intéresse dorénavant à un problème similaire de détermination des coefficients de diffusion dans un cadre instationnaire. La concentration en radionucléides est alors décrite par l'équation parabolique (1.1).

Dans ce chapitre nous commençons par poser le problème direct. Ensuite, nous introduisons le problème inverse, calculons la dérivée de la fonction coût et abordons quelques questions de régularisation. Finalement, une application numérique est présentée.

5.1 Le problème direct

Nous commençons par définir le problème direct dans le cas non stationnaire. Nous considérons l'équation parabolique

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x, t) - \operatorname{div}(D(x)\nabla c(x, t)) + \lambda w(x)c(x, t) = 0 \quad (5.1)$$

avec les conditions aux limites et initiales suivantes

$$\begin{cases} c(t = 0, x) = c^0 = 0 & \text{dans } \Omega \\ D\nabla c \cdot n = g & \text{sur } \Gamma_{inj} \\ D\nabla c \cdot n = 0 & \text{sur } \Gamma_N \\ c = 0 & \text{sur } \Gamma_D \end{cases} \quad (5.2)$$

Nous allons chercher $c(x, t)$ solution de (5.2) dans l'espace $\mathcal{C}^0([0, T]; L^2(\Omega)) \cap L^2([0, T]; V)$ avec

$$V := \{c \in H^1(\Omega); c = 0 \text{ sur } \Gamma_D\}.$$

La formulation variationnelle associée consiste à trouver $c \in \mathcal{C}^0([0, T]; L^2(\Omega)) \cap L^2([0, T]; V)$ tel que $c(t = 0) = c^0$ et

$$\int_{\Omega} \left(\frac{dc}{dt} + D\nabla c \cdot \nabla \phi + \lambda w c \phi \right) dx = \int_{\Gamma_{inj}} g \phi ds \quad \text{pour tout } \phi \in V \quad (5.3)$$

Pour la résolution numérique de la formulation variationnelle (5.3), nous discrétisons la dérivée temporelle

$$\frac{dc}{dt} \approx \frac{c^n - c^{n-1}}{\Delta t}.$$

Ainsi, c^n , approximation de la concentration au temps $n\Delta t$ est solution du problème variationnel

$$\int_{\Omega} \frac{c^n(x) - c^{n-1}}{\Delta t} \phi + D \nabla c^n \nabla \phi + \lambda w c^n dx = \int_{\Gamma_{inj}} g \phi ds$$

pour tout $\phi \in V$. Cette dernière formulation est résolue à l'aide d'une approximation par éléments finis de Lagrange P1 (sans adaptation de maillage). Pour, $w = 0$ et $D = 0.5\chi + (1 - \chi)2$, où $\chi = 1_{0.2 \leq x \leq 0.8}$, $c^0 = 0$ et $\Delta t = 0.01$, nous obtenons les résultats suivants:

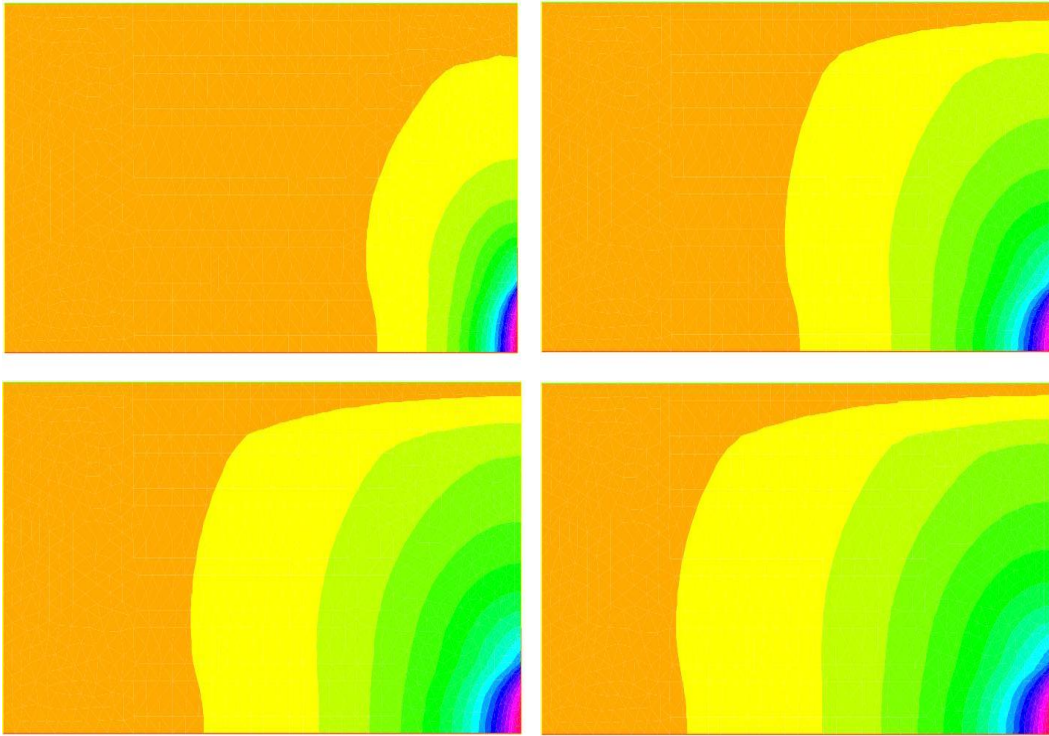


Figure 5.1: Évolution de la concentration c

5.2 Optimisation

A nouveau, on cherche à déterminer D et w correspondant à une concentration donnée c_d . On introduit la fonctionnelle

$$J_1^{t_f}(D, w) = \int_{\Gamma_0} (c(x, t_f) - c_d(x, t_f))^2 ds + \int_0^{t_f} \int_{\Gamma_0} (c(x, t) - c_d(x, t))^2 ds dt,$$

où c est la solution de (5.1). Afin de déterminer les dérivées de $J_1^{t_f}$ par rapport à D et w , nous introduisons le Lagrangien

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(D, \omega, c, p) = & \int_{\Gamma_0} (c(x, t_f) - c_d(x, t_f))^2 ds + \int_0^{t_f} \int_{\Gamma_0} (c(x, t) - c_d(x, t))^2 ds dt \\ & - \int_0^{t_f} \int_{\Omega} p \frac{\partial c}{\partial t} + D \nabla p \cdot \nabla c + \lambda w c p ds dt + \int_0^{t_f} \int_{\Gamma_{inj}} p g ds dt \end{aligned}$$

Pour obtenir l'équation de l'état adjoint, nous procédons de la même manière que dans le cas stationnaire, nous calculons la dérivée $\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial c}, q \rangle$ où $q \in \mathcal{C}^0([0, T]; L^2(\Omega)) \cap L^2(]0, T[; V)$, et $q(t=0) = 0$,

$$\begin{aligned} \langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial c}, q \rangle = & \int_{\Gamma_0} 2(c(x, t_f) - c_d(x, t_f)) q(x, t_f) ds + \int_0^{t_f} \int_{\Gamma_0} 2(c(x, t) - c_d(x, t)) q(x, t) ds dt \\ & - \int_0^{t_f} \int_{\Omega} p \frac{\partial q}{\partial t} + D \nabla p \cdot \nabla q + \lambda w q p ds dt. \end{aligned}$$

On en déduit l'équation d'état adjoint

$$\begin{cases} -\frac{\partial p}{\partial t} - \operatorname{div} D(x) \nabla p(x, t) + \lambda w(x) p(x, t) = 0 & \text{dans }]0, t_f[\times \Omega \\ D \nabla p \cdot n = 2(c - c_d) & \text{sur } \Gamma_0 \\ D \nabla p \cdot n = 0 & \text{sur } \Gamma_{inj} \cup \Gamma_N - \Gamma_0 \\ p = 0 & \text{sur } \Gamma_D \\ p(t_f, x) = 2(c - c_d)(t_f, x) \delta_{\Gamma_0} & \text{dans } \Omega \end{cases} \quad (5.4)$$

On note $p(D, w)$ la solution de ce problème. La dérivée de $J_1^{t_f}$ par rapport à D s'exprime alors simplement en fonction de $p(D, w)$ et $c(D, w)$, en effet

$$\langle \frac{\partial J_1^{t_f}}{\partial D}, E \rangle = - \int_0^{t_f} \int_{\Omega} \nabla c \cdot \nabla p E ds dt. \quad (5.5)$$

De plus, la dérivée obtenue en transportant la concentration D par un champ de vecteur θ est

$$\begin{aligned} \langle \frac{\partial J_1^{t_f}}{\partial D}, \theta \rangle &= \int_0^{t_f} \int_{\Omega} \nabla c \cdot \nabla p (\nabla D \cdot \theta) ds dt \\ &= - \int_0^{t_f} \int_{\Omega} \operatorname{div} (\nabla c \cdot \nabla p \theta) D ds dt. \end{aligned}$$

Les dérivées par rapport à w s'obtiennent de manière similaire. Remarquons que le calcul de la dérivée de $J_1^{t_f}$ nécessite la résolution de deux problèmes d'évolution et s'avère donc bien plus coûteux que dans le cas stationnaire. En particulier, il faut stocker l'état c sur tout $[0, t_f] \times \Gamma_0$ avant de pouvoir résoudre l'état adjoint en temps rétrograde.

5.3 Régularisation

L'équation de l'état adjoint fait intervenir une donnée initiale (i.e au temps $t = t_f$, l'équation étant rétrograde) non régulière. Pour pallier cet inconvénient, on peut utiliser une fonction coût évaluant l'erreur quadratique sur tout le domaine Ω (ou sur un voisinage de Γ_0)

$$J_2^{t_f}(D, w) = \int_0^{t_f} \int_{\Omega} (c(x, t) - c_d(x, t))^2 ds dt \quad (5.6)$$

L'état adjoint p est alors solution de l'équation

$$\begin{cases} -\frac{\partial p}{\partial t} - \operatorname{div} D(x) \nabla p(x, t) + \lambda w(x) p(x, t) = 2(c - c_d) & \text{dans }]0, t_f[\times \Omega \\ D \nabla p \cdot n = 0 & \text{sur } \Gamma_N \cup \Gamma_{inj} \\ p = 0 & \text{sur } \Gamma_D \\ p(t_f, x) = 2(c - c_d)(t_f, x) & \text{dans } \Omega \end{cases} \quad (5.7)$$

Notons à nouveau que le calcul des dérivées de $J_2^{t_f}$ ou de $J_1^{t_f}$ nécessite le stockage de la concentration c et de l'état adjoint p à tous les instants $n\Delta t$, ce qui s'avère coûteux dès que le pas de discrétisation Δt est petit.

Comme dans le cas stationnaire nous devons déterminer un champ θ tel que $\partial J / \partial D \cdot \theta < 0$ (si on minimise par rapport à D). A cet effet, on résout le problème variationnel consistant à déterminer

$$\theta \in W = \{\theta \in H^1(\Omega)^2 : \theta \cdot n = 0 \text{ sur } \partial\Omega\}$$

tel que

$$(\theta, \beta)_W = \left\langle \frac{\partial J}{\partial D}, \beta \right\rangle,$$

pour tout $\theta \in W$, où

$$\|\theta\|_W^2 = \alpha \|\nabla \theta\|_{L^2}^2 + \|\theta\|_{L^2}^2.$$

5.4 Application Numérique pour l'optimisation dans le cas non stationnaire

Nous avons appliqué la méthode proposée avec des données (D_d , w_d et D_0) identiques à celles utilisées lors de la première simulation numérique présentée dans le cas stationnaire. Lors de cette simulation, nous avons effectué dix itérations en temps, avec un pas $\Delta t = 0.001$ et effectué 50 itérations dans la boucle d'optimisation (ce qui nécessite tout de même la résolution de plus de mille problèmes variationnels).

Pour cette simulation nous faisons 10 itérations en temps avec un pas $\Delta t = 0.001$ et 50 itérations pour la boucle d'optimisation.

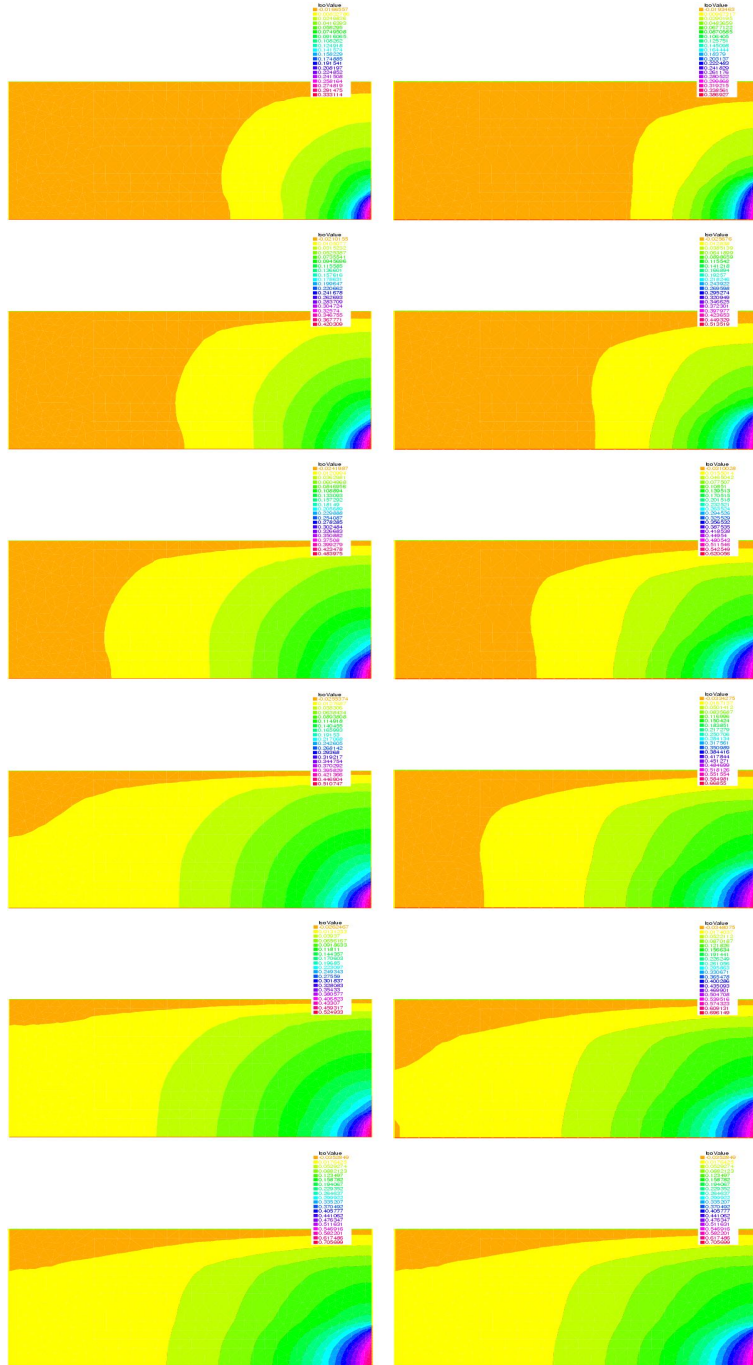


Figure 5.2: dans la premier colonne la concentration du problème direct et dans la deuxième la concentration du problème inverse

Chapter 6

Conclusion

La méthode d'optimisation géométrique utilisée dans ce travail a permis d'obtenir une bonne décroissance de la fonction de moindres carrés correspondant à des approximations globalement satisfaisantes du champ de diffusion, sans être toutefois très précises. Nous avons aussi étudié un problème d'optimisation paramétrique (bien que cela ne soit pas très réaliste car les coefficients de diffusion et de porosité présentent de fortes discontinuités) afin de vérifier que la qualité moyenne des approximations vient plus du choix de la fonction objectif (qui contient assez peu d'informations) que du type d'optimisation considéré. Un point très important concerne donc le choix de la fonction coût. Celle faisant intervenir l'erreur quadratique sur tout le domaine nous donne des résultats plus précis et fournit un état adjoint correctement défini. Malheureusement, on ne peut pas en général effectuer de mesures sur tout le domaine, mais sur une partie limitée seulement.

Remarquons aussi que, d'un point de vue pratique, la méthode d'optimisation géométrique est très sensible aux conditions initiales. Lorsque l'initialisation est très éloignée des coefficients réels, l'algorithme converge vers une configuration très éloignée de la configuration souhaitée. Ainsi, cette méthode ne semble pertinente que lorsqu'on a d'ores et déjà une idée assez précise du champ de diffusion et être employée comme simple correctif.

Enfin, plusieurs améliorations peuvent être apportées à l'algorithme proposé. Tout d'abord, on peut combiner optimisation géométrique et paramétrique, ce qui peut être intéressant si le champ de diffusion est constant par morceaux, sans que l'on connaisse les valeurs possibles des coefficients. Enfin, la détermination du champ de convection θ fait intervenir un produit scalaire dépendant d'un coefficient α arbitraire. Il serait intéressant de déterminer le produit scalaire optimal. Il pourrait par ailleurs être intéressant d'utiliser un espace fonctionnel autre que H^1 dans lequel chercher θ .

Bibliography

- [1] Ch. Bernardi, O. Pironneau, *Sensitivity of Darcy's law to discontinuities*, Chinese Ann. Math. Ser. B 24, no. 2, 205–214 (2003).
- [2] A. Cartalade, P. Montarnal, B. Cavanna, J. Blum, *Paramétrisation automatique des coefficients de transport d'un milieu poreux, approche par état adjoint*, Rapport DM2S/SFME/MTMS/RT/03-002/A, CEA Saclay (2003).
- [3] F. Clément, N. Khvoenkova, A. Cartalade, P. Montarnal *Analyse de sensibilité et estimation de paramètres de transport pour une équation de diffusion: approche par état adjoint*, Rapport de recherche INRIA, n. 5132, (2004).
- [4] F. Hecht, O. Pironneau *FreeFem++* <http://www.freefem.org>.
- [5] G. Allaire, F. Jouve, A.M Toader *Structural optimization using sensivity analysis and a level-set method*, J. Comp. Phys. Vol 194/1, pp.363-393 (2004).
- [6] G. Allaire *Conception optimale de structures*, Editions de l'Ecole Polytechnique (2003).