Systematisation du calcul des sensibilites dans le TEF

(STB-Septembre 1998)

Avant propos : Ce texte n'est jamais passe par un correcteur ortographique de quelques natures qu'il soit. En consequence il n'y a pas d'accents.

Le but est de mettre sur le papier un certein nombre de chose qui ont ete faite, sur la sytematisation du calcul des sensibilites. Il n'y a rien de nouveau par rapport a ce que l'on connait, simplement est introduit la dependance de φ a φ. Pour alleger l'ecriture, le formalisme est ecrit pour une cellule α, mais les indices ne sont pas traines. A la fin un petit exemple permet de se faire une idee de ceux que l'on peut attendre de cette methode d'un point de vue des precisions.

1 Point de depart

On part du systeme suivant dans lequel on a decide de mettre π (le parametre) dans un transfert:

$$\frac{\partial \vec{\eta}}{\partial t} = \vec{G}(\vec{\eta}, \vec{\varphi}) \tag{1}$$

$$\vec{\varphi} = \vec{f}(\vec{\eta}, \vec{\varphi}, \pi) \tag{2}$$

en posant $\vec{s} = \frac{\partial \vec{\eta}}{\partial \pi}$ et $\vec{\sigma} = \frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial \pi}$ il vient pour le modele de sensibilite :

$$\frac{\partial \vec{s}}{\partial t} = \frac{\overline{\overline{\partial G}}}{\partial \eta}\vec{s} + \frac{\overline{\overline{\partial G}}}{\partial \varphi}\vec{\sigma} \tag{3}$$

$$\vec{\sigma} = \frac{\partial \vec{f}}{\partial \pi} + \frac{\overline{\overline{\partial f}}}{\partial \eta}\vec{s} + \frac{\overline{\overline{\partial f}}}{\partial \varphi}\vec{\sigma} \tag{4}$$

2 Linearisation et integration du modele de sensibilite

2.1 premiere methode

On appelle 0 le point autour duquel on fait la linearisation. Les grandeurs indices 0 sont prises a cet instant la.

La linearisation au premier ordre de l'equation 3 permet d'ecrire :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \vec{s}}{\partial t} &= \left.\overline{\overline{\frac{\partial G}{\partial \eta}}}\right|_0 \vec{s}_0 + \left.\overline{\overline{\frac{\partial G}{\partial \varphi}}}\right|_0 \vec{\sigma}_0 + \left.\overline{\overline{\frac{\partial G}{\partial \eta}}}\right|_0 \vec{\delta s} + \left.\overline{\overline{\frac{\partial G}{\partial \varphi}}}\right|_0 \vec{\delta\sigma} \\
&+ \left[\left.\overline{\overline{\frac{\partial (\frac{\partial G}{\partial \eta})}{\partial \eta}}}\right|_0 \vec{\delta\eta} + \left.\overline{\overline{\frac{\partial (\frac{\partial G}{\partial \eta})}{\partial \varphi}}}\right|_0 \vec{\delta\varphi} \right] \vec{s}_0 \\
&+ \left[\left.\overline{\overline{\frac{\partial (\frac{\partial G}{\partial \varphi})}{\partial \eta}}}\right|_0 \vec{\delta\eta} + \left.\overline{\overline{\frac{\partial (\frac{\partial G}{\partial \varphi})}{\partial \varphi}}}\right|_0 \vec{\delta\varphi} \right] \vec{\sigma}_0 \qquad (5)
\end{aligned}$$

La linearisation de l'equation 4 se fait de la meme maniere. On peut noter que si l'on a pris soin de mettre le parametre dans un transfert ($\varphi = \pi$), le vecteur $\frac{\partial \vec{f}}{\partial \pi}$ n'a qu'une composante non nulle, en l'occurence egale a 1. Il vient donc :

$$\begin{aligned}
\vec{\delta\sigma} &= \left.\overline{\overline{\frac{\partial f}{\partial \eta}}}\right|_0 \vec{\delta s} + \left.\overline{\overline{\frac{\partial f}{\partial \varphi}}}\right|_0 \vec{\delta\sigma} \\
&+ \left[\left.\overline{\overline{\frac{\partial (\frac{\partial f}{\partial \eta})}{\partial \eta}}}\right|_0 \vec{\delta\eta} + \left.\overline{\overline{\frac{\partial (\frac{\partial f}{\partial \eta})}{\partial \varphi}}}\right|_0 \vec{\delta\varphi} \right] \vec{s}_0 \\
&+ \left[\left.\overline{\overline{\frac{\partial (\frac{\partial f}{\partial \varphi})}{\partial \eta}}}\right|_0 \vec{\delta\eta} + \left.\overline{\overline{\frac{\partial (\frac{\partial f}{\partial \varphi})}{\partial \varphi}}}\right|_0 \vec{\delta\varphi} \right] \vec{\sigma}_0 \qquad (6)
\end{aligned}$$

A ce stade du devellopement, il est possible d'integrer sur un pas de temps le systeme d'equations (5 et 6) en l'etat. L'inconvenient majeur provient du fait qu'il est neccesaire de calculer les derivees secondes, ce qui ne permet pas la systematisation du calcul du modele de sensibilite, ou du moins pas simplement. L'idee est donc de s'affranchir de ce calcul en posant pour l'integration sur un pas de temps :

$$\begin{aligned}
\delta\left(\overline{\overline{\frac{\partial f}{\partial \eta}}}\right) &\backsimeq \left.\overline{\overline{\frac{\partial (\frac{\partial f}{\partial \eta})}{\partial \eta}}}\right|_0 \vec{\delta\eta} + \left.\overline{\overline{\frac{\partial (\frac{\partial f}{\partial \eta})}{\partial \varphi}}}\right|_0 \vec{\delta\varphi} \\
\delta\left(\overline{\overline{\frac{\partial f}{\partial \varphi}}}\right) &\backsimeq \left.\overline{\overline{\frac{\partial (\frac{\partial f}{\partial \varphi})}{\partial \eta}}}\right|_0 \vec{\delta\eta} + \left.\overline{\overline{\frac{\partial (\frac{\partial f}{\partial \varphi})}{\partial \varphi}}}\right|_0 \vec{\delta\varphi}
\end{aligned}$$

il en est de meme pour $\delta\left(\overline{\overline{\frac{\partial G}{\partial \eta}}}\right)$ et $\delta\left(\overline{\overline{\frac{\partial G}{\partial \varphi}}}\right)$.

Il vient donc :

$$\begin{aligned}
\vec{\delta s} &= \int_{t_0}^{t_1} \left[\left.\overline{\overline{\frac{\partial G}{\partial \eta}}}\right|_0 \vec{s}_0 + \left.\overline{\overline{\frac{\partial G}{\partial \varphi}}}\right|_0 \vec{\sigma}_0 \right] d\tau + \int_{t_0}^{t_1} \left[\left.\overline{\overline{\frac{\partial G}{\partial \eta}}}\right|_0 \vec{\delta s} + \delta\left(\overline{\overline{\frac{\partial G}{\partial \eta}}}\right) \vec{s}_0 \right] d\tau \\
&+ \int_{t_0}^{t_1} \left[\left.\overline{\overline{\frac{\partial G}{\partial \varphi}}}\right|_0 \vec{\delta\sigma} + \delta\left(\overline{\overline{\frac{\partial G}{\partial \varphi}}}\right) \vec{\sigma}_0 \right] d\tau \qquad (7) \\
\vec{\delta\sigma} &= \left.\overline{\overline{\frac{\partial f}{\partial \eta}}}\right|_0 \vec{\delta s} + \left.\overline{\overline{\frac{\partial f}{\partial \varphi}}}\right|_0 \vec{\delta\sigma} + \delta\left(\overline{\overline{\frac{\partial f}{\partial \eta}}}\right) \vec{s}_0 + \delta\left(\overline{\overline{\frac{\partial f}{\partial \varphi}}}\right) \vec{\sigma}_0
\end{aligned}$$

Avec une integration de type trapeze, on fait apparaitre la variation des matrices Jacobiennes sur un pas de temps ($\int_{t_0}^{t_1} \delta(J)d\tau = \frac{\delta t}{2}(J_1 - J_0)$), l'indice 1 designe l'instant $t_0 + \delta t$).

Le systeme precedent se reecrit sous la forme :

$$
\begin{aligned}
\left(1 - \frac{\delta t}{2} \left.\frac{\overline{\overline{\partial G}}}{\partial \eta}\right|_0\right) \vec{\delta s} - \frac{\delta t}{2} \left.\frac{\overline{\overline{\partial G}}}{\partial \varphi}\right|_0 \vec{\delta \sigma} &= \frac{\delta t}{2} \left(\left.\frac{\overline{\overline{\partial G}}}{\partial \eta}\right|_1 + \left.\frac{\overline{\partial G}}{\partial \eta}\right|_0 \right) \vec{s}_0 + \frac{\delta t}{2} \left(\left.\frac{\overline{\overline{\partial G}}}{\partial \varphi}\right|_1 + \left.\frac{\overline{\overline{\partial G}}}{\partial \varphi}\right|_0 \right) \vec{\sigma}_0 \\
\left(1 - \left.\frac{\overline{\overline{\partial f}}}{\partial \varphi}\right|_0\right) \vec{\delta \sigma} - \left.\frac{\overline{\overline{\partial f}}}{\partial \eta}\right|_0 \vec{\delta s} &= \left(\left.\frac{\overline{\overline{\partial f}}}{\partial \eta}\right|_1 - \left.\frac{\overline{\overline{\partial f}}}{\partial \eta}\right|_0 \right) \vec{s}_0 + \left(\left.\frac{\overline{\overline{\partial f}}}{\partial \varphi}\right|_1 - \left.\frac{\overline{\overline{\partial f}}}{\partial \varphi}\right|_0 \right) \vec{\sigma}_0
\end{aligned} \tag{8}
$$

2.2 deuxieme methode

Il s'agit cette fois ci d'integrer directement le modele de sensibilite (eq. 3 et 4) en supposant une evolution lineaire sur le pas de temps des grandeurs *"Jacobiens * (vecteur des variables associes)"*.

Avec $\int_{t_0}^{t_1} J * X d\tau = \frac{\delta t}{2}(J_1 X_1 + J_0 X_0)$ il vient :

$$
\begin{aligned}
\vec{\delta s} &= \frac{\delta t}{2} \left[\left.\frac{\overline{\overline{\partial G}}}{\partial \eta}\right|_0 \vec{s}_0 + \left.\frac{\overline{\overline{\partial G}}}{\partial \eta}\right|_1 (\vec{s}_0 + \vec{\delta s}) \right] + \frac{\delta t}{2} \left[\left.\frac{\overline{\overline{\partial G}}}{\partial \varphi}\right|_0 \vec{\sigma}_0 + \left.\frac{\overline{\overline{\partial G}}}{\partial \varphi}\right|_1 (\vec{\sigma}_0 + \vec{\delta \sigma}) \right] \\
\vec{\delta \sigma} &= \left[\left.\frac{\overline{\overline{\partial f}}}{\partial \eta}\right|_0 \vec{s}_0 - \left.\frac{\overline{\overline{\partial f}}}{\partial \eta}\right|_1 (\vec{s}_0 + \vec{\delta s}) \right] + \left[\left.\frac{\overline{\overline{\partial f}}}{\partial \varphi}\right|_0 \vec{\sigma}_0 - \left.\frac{\overline{\overline{\partial f}}}{\partial \varphi}\right|_1 (\vec{\sigma}_0 + \vec{\delta \sigma}) \right]
\end{aligned} \tag{9}
$$

En rearangeant ce dernier systeme on peut ecrire :

$$
\begin{aligned}
\left(1 - \frac{\delta t}{2} \left.\frac{\overline{\overline{\partial G}}}{\partial \eta}\right|_1\right) \vec{\delta s} - \frac{\delta t}{2} \left.\frac{\overline{\overline{\partial G}}}{\partial \varphi}\right|_1 \vec{\delta \sigma} &= \frac{\delta t}{2} \left(\left.\frac{\overline{\overline{\partial G}}}{\partial \eta}\right|_1 + \left.\frac{\overline{\overline{\partial G}}}{\partial \eta}\right|_0 \right) \vec{s}_0 + \frac{\delta t}{2} \left(\left.\frac{\overline{\overline{\partial G}}}{\partial \varphi}\right|_1 + \left.\frac{\overline{\overline{\partial G}}}{\partial \varphi}\right|_0 \right) \vec{\sigma}_0 \\
\left(1 - \left.\frac{\overline{\overline{\partial f}}}{\partial \varphi}\right|_1\right) \vec{\delta \sigma} - \left.\frac{\overline{\overline{\partial f}}}{\partial \eta}\right|_1 \vec{\delta s} &= \left(\left.\frac{\overline{\overline{\partial f}}}{\partial \eta}\right|_1 - \left.\frac{\overline{\overline{\partial f}}}{\partial \eta}\right|_0 \right) \vec{s}_0 + \left(\left.\frac{\overline{\overline{\partial f}}}{\partial \varphi}\right|_1 - \left.\frac{\overline{\overline{\partial f}}}{\partial \varphi}\right|_0 \right) \vec{\sigma}_0
\end{aligned} \tag{10}
$$

Il est interessant de noter la similarite d'ecriture des systemes 8 et 10. Les second menbres sont parfaitement identiques. La difference concerne uniquement l'instant d'evaluations des matrices Jacobiennes dans le premier membre.

3 Resolution du systeme algebrique

Pour simplifier l'ecriture on rappelle ici l'expression des matrices defini dans le TEF :

$$
\begin{aligned}
A &= 1 - \frac{\delta t}{2} \frac{\overline{\overline{\partial G}}}{\partial \eta} \qquad B = -\frac{\delta t}{2} \frac{\overline{\overline{\partial G}}}{\partial \varphi} \\
C^+ &= \frac{1}{\delta t} \frac{\overline{\overline{\partial f}}}{\partial \eta} \qquad D = -\frac{\overline{\overline{\partial f}}}{\partial \varphi}
\end{aligned}
$$

Les systemes 8 et 10 peuvent se reecrire sous la forme :

$$
\begin{aligned}
A_i\vec{\delta s} + B_i\vec{\delta\sigma} &= (2 - A_1 - A_0)\vec{s}_0 - (B_1 + B_0)\vec{\sigma}_0 \\
\delta t C_i^+\vec{\delta s} - (1 + D_i)\vec{\delta\sigma} &= -\delta t(C_1^+ - C_0^+)\vec{s}_0 - (D_0 - D_1)\vec{\sigma}_0
\end{aligned}
\tag{11}
$$

L'indice i peut prendre la valeur 1 ou 0 en fonction de la methode d'integration choisie, comme on l'a vu precedement.

Pour essayer de retrouver une forme algebrique similaire a celle du TEF on pose :

$$
\begin{aligned}
\Gamma_S\delta t &= (2 - A_1 - A_0)\vec{s}_0 - (B_1 + B_0)\vec{\sigma}_0 \\
\Omega_S\delta t &= -\delta t(C_1^+ - C_0^+)\vec{s}_0 - (D_0 - D_1)\vec{\sigma}_0
\end{aligned}
$$

En eliminant alors l'equation 1 du systeme 11, il vient :

$$
\begin{aligned}
\vec{\delta s} &= A_i^{-1}\Gamma_S\delta t - A_i^{-1}B_i\vec{\delta\sigma} \\
(1 + D_i + \delta t C_i^+ A_i^{-1}B_i)\vec{\delta\sigma} &= \delta t C_i^+ A_i^{-1}\Gamma_S\delta t - \Omega_S\delta t
\end{aligned}
\tag{12}
$$

On peut faire ici plusieurs remarques. Tout d'abord, il est interessant de noter que cette ecriture permet de faire apparaitre la meme matrice de couplage que celle associe au modele d'evolution. Par consequent il est envisageable d'utiliser une structure identique pour la resolution. Il apparait cependant que du fait que dans ZOOM on utilise une resolution directe du systeme algebrique final (et donc qui oblige a inverser la matrice de couplage) on pourrait directement utiliser la matrice inverse et obtenir les solutions pour les sensibilites. Ceci doit permetre, en plus du caractere systematisable, de ne pas multiplier les temps de calculs associe a la pure inversion. Il faut noter cependant que le calcul necessite d'avoir simultanement les matrices Jacobiennes en debut et en fin de pas de temps. Deplus, l'ecriture des "second membre (Γ_S et Ω_S)" impose que soit stocke separement les matrices A et B.

Il faut noter par ailleurs que le calcul des sensibilites par cette methode, meme s'il semble que numeriquement on soit au meme ordre, est dependant du decoupage en variables d'etat et de transfert du modele d'evolution initial.

On peut noter aussi que l'evaluation des termes Γ_S et Ω_S demande de calculer la valeur a l'instant initial du vecteur des sensibilites de transfert $\vec{\sigma}_0$. De l'equation 4 on tire :

$$
\vec{\sigma}_0 = \left(1 - \left.\overline{\overline{\frac{\partial f}{\partial \varphi}}}\right|_0\right)^{-1} \left(\frac{\partial \vec{f}}{\partial \pi} + \left.\overline{\overline{\frac{\partial f}{\partial \eta}}}\right|_0 \vec{s}_0\right) \tag{13}
$$

Soit

$$
\vec{\sigma}_0 = (1 + D_0)^{-1}\left(\frac{\partial \vec{f}}{\partial \pi} + \delta t C_0^+\vec{s}_0\right) \tag{14}
$$

4 Test de precision sur un exemple

Le test est effectue avec MiniKer (traduction du tef pour une cellule en un mini-noyau ecrit en fortran). L'avantage est que l'on peut facilement mettre en oeuvre des procedures de test sur la sytematisation a l'aide d'exemples simples. *(le source est disponible et a mon avis facilement manipulable)*

L'exemple choisi ici pour faire un petit test sur la validite de la methode de systematisation est la partie reactive d'un modele autocatalitique (sense decrire les mecanismes a l'origine des taches sur les pelages des animaux) dans lequel est decrit la competition entre des processus d'activation et d'inibition. Dans la version simplifiee utilise ici, le modele mathematique se compose de deux equations differentielles ordinaires non-lineaires.

$$\frac{\partial X_1}{\partial t} = A - B\,X_1 + \frac{X_1^2}{X_2} \quad (15)$$

$$\frac{\partial X_2}{\partial t} = X_1^2 - X_2 \quad (16)$$

Ce systeme d'equation est resolu dans le TEF. Le modele de sensibilite (le parametre choisi ici est la grandeur B) associe resolu completement (cad en prenant comme il se doit les derivees secondes...) sert de reference.

La courbe 1 donne l'evolution dans le temps des variables X_1 et X_2, ainsi que les sensibilites de ces variables au parametre B.

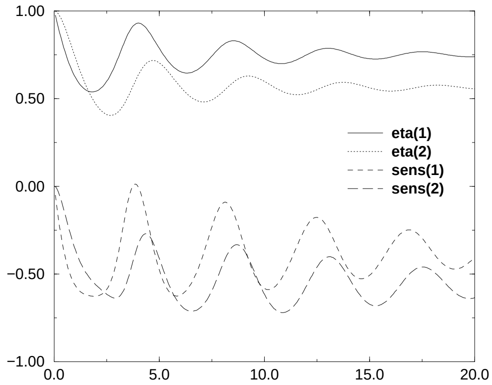
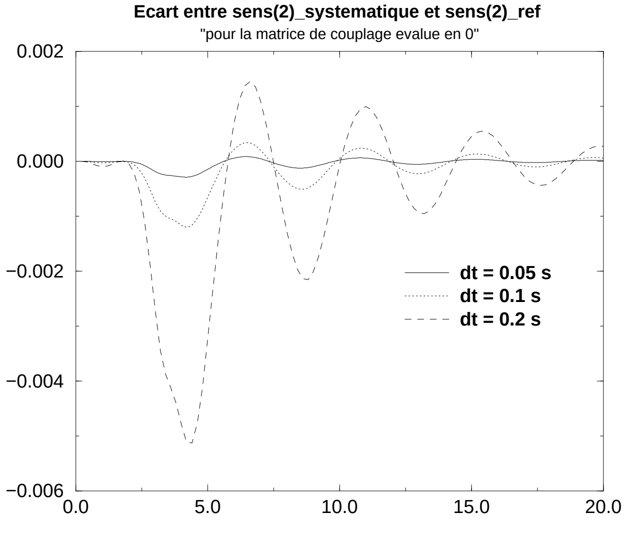
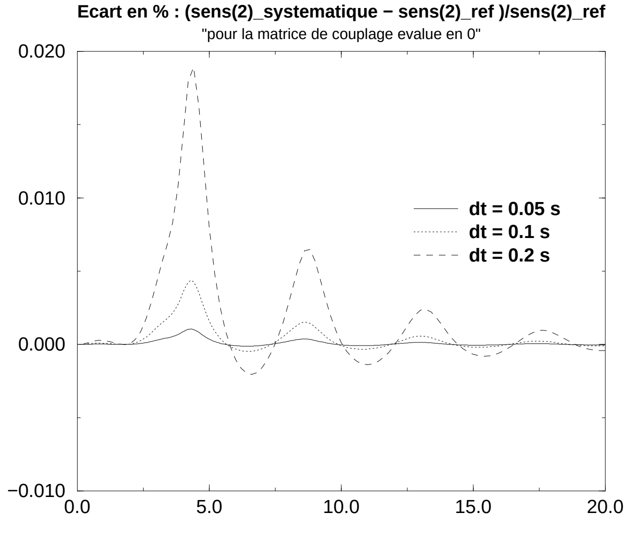
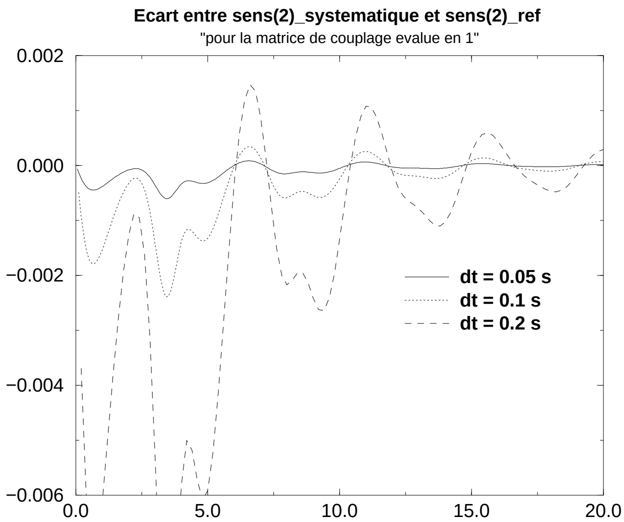


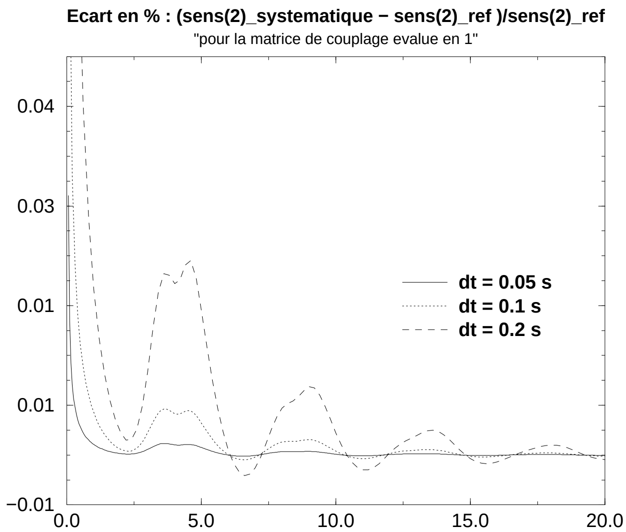
Figure 1: *evolution*

Si maintenant on calcule les sensibilites par la methode de systematisation proposee, on peut comparer les resultats en observant par exemple leurs differences (sachant qu'a l'oeuil il est difficile de voir quoique ce soit) en valeurs ou en pourcentage. Les figures suivantes donnent ces resultats pour les deux methodes (a savoir l'evaluation des matrices en 0 ou en 1). Les test sont effectues pour differntes valeurs de δt.






Ecart entre sens(2)_systematique et sens(2)_ref
"pour la matrice de couplage evalue en 1"
0.002
0.000
−0.002
−0.004
−0.006
0.0
5.0
10.0
15.0
20.0
dt = 0.05 s
dt = 0.1 s
dt = 0.2 s


Ecart en % : (sens(2)_systematique − sens(2)_ref)/sens(2)_ref
"pour la matrice de couplage evalue en 1"
0.04
0.03
0.01
0.01
−0.01
0.0
5.0
10.0
15.0
20.0
dt = 0.05 s
dt = 0.1 s
dt = 0.2 s