Utilisation des splines de lissage pour la construction de surface de réponse Application: simulateur de réservoir

par
Samir Touzani

M. Anestis Antoniadis (Directeur de thèse)
M. Daniel Busby (Promoteur de thèse)

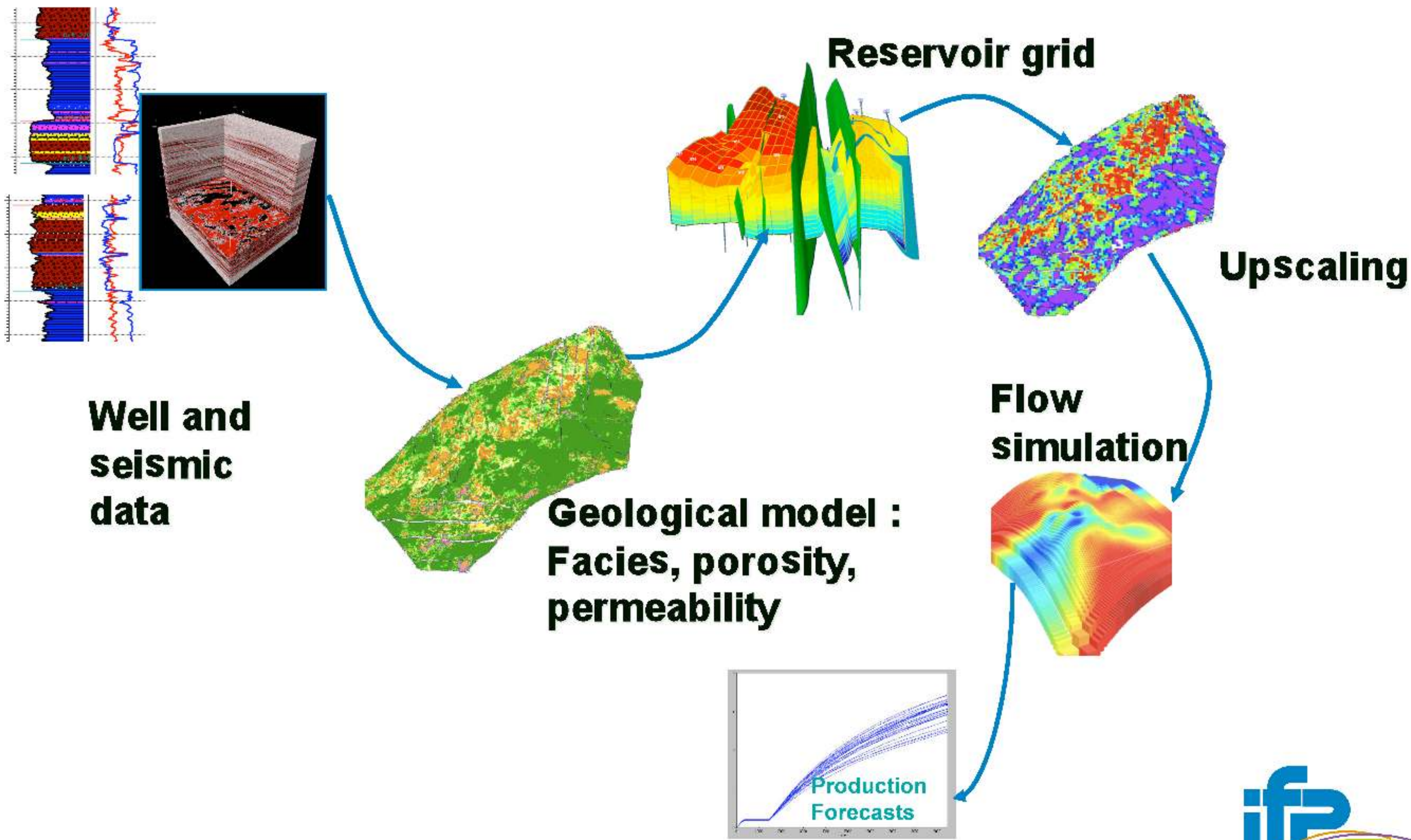
Innovation Energie Environnement

Introduction

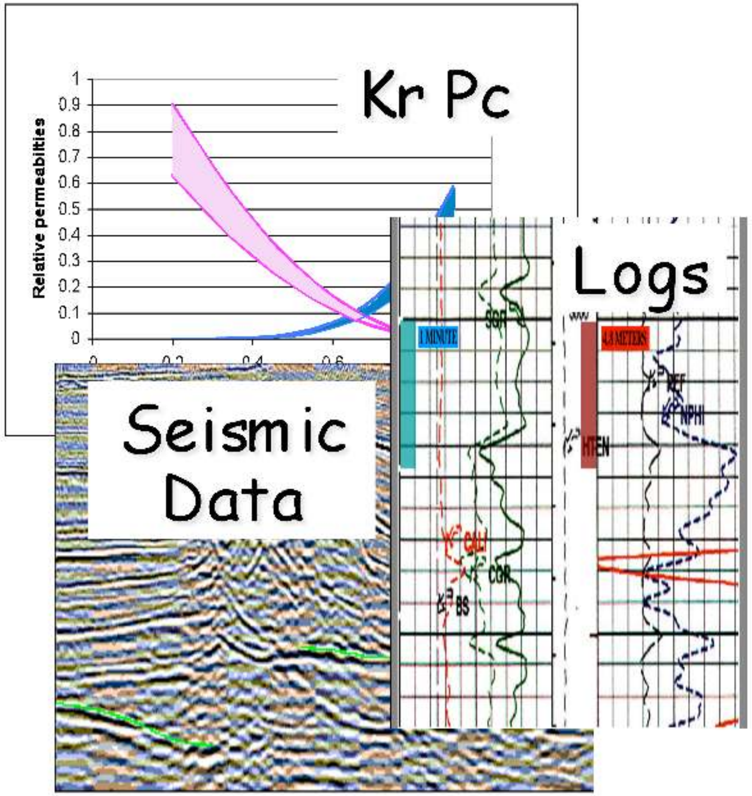
- Contexte
  - Analyse des incertitudes en ingénierie des réservoirs
- Objectifs principaux
  - Propagation des incertitudes des entrées sur les sorties du simulateur
  - Analyse de sensibilité: quantifier l'influence des paramètres d'entrée sur les sorties
- Problèmes
  - Simulateur coûteux en temps de calcul à haute dimension

Innovation Energie Environnement

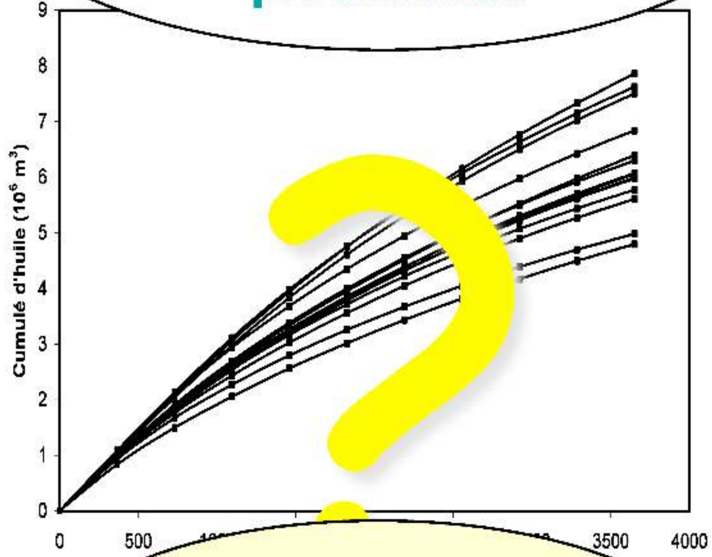
Workflow: Modélisation et simulation des réservoirs



Problématique
Illustration sur simulation réservoir



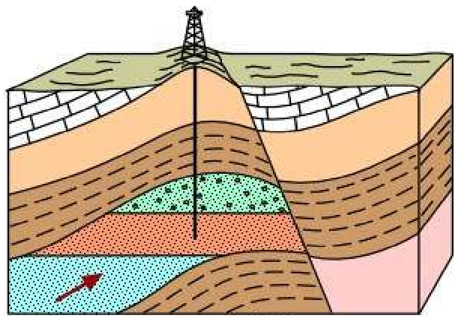
Ces incertitudes sont-elles influentes sur les prévisions de production?



Comment quantifier cet impact?

Ingénierie de réservoir : Objectifs et enjeux

- **Modèle de simulation impliquant un grand nombre de paramètres incertains :**
  - Paramètres liés au gisement
    - **Géométrie du réservoir : épaisseur, limites, force d'aquifère, présence de faille, etc.**
    - **Remplissage du réservoir : plusieurs milliers de mailles à renseigner en propriétés pétrophysiques (porosité, perméabilité)**
    - **Propriétés des fluides eau/huile/gaz : niveau des contacts entre les fluides, viscosité, saturations, PVT**
    - **Interactions roches/fluides : perméabilités relatives**
      - Capacité d'un fluide à se déplacer gênée par la présence d'un autre fluide
    - **Puits & production : Indice de productivité (IP), effet pariétal (skin)**
      - Modification de la perméabilité aux abord du puits - lié au forage



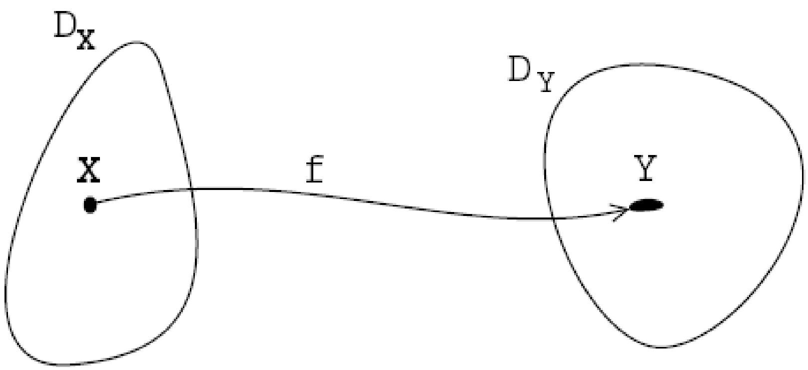
Surface de réponse

Introduction

- Considérons le modèle :

$$Y_i = f(X_i) + \varepsilon_i \qquad i = 1,\dots,n$$

- Le problème de la régression statistique consiste à analyser l'influence des paramètres d'entrés $X \in \Re^d$ sur la sortie Y



Surface de réponse

Régression et régularisation

- ***f(x)*** est approchée selon le principe des moindres carrés régularisé

$$J(f) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2 + \lambda\, p(f)$$

Surface de réponse

Régression et régularisation

- ***f(x)*** est approchée selon le principe des moindres carrés régularisé

$$J(f) = \boxed{\sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2} + \lambda\, p(f)$$

fonction de coût quadratique

adéquation du modèle aux données

Innovation Energie Environnement

Surface de réponse

Régression et régularisation

- ***f(x)*** est approchée selon le principe des moindres carrés régularisé

$$J(f) = \boxed{\sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2} + \boxed{\lambda\, p(f)}$$

fonction de coût quadratique

⇓

adéquation du modèle aux données

terme de régularisation

⇓

restreint l'espace des fonctions

Innovation Energie Environnement

ANOVA

Definition :

- La décomposition ANOVA exprime la sortie $f(x) \in F$ comme un développement exact, ou tronqué, de fonctions de variables d'entrée X :

$$f(x) = f_0 + \sum_{i=1}^{d} f_i(x_i) + \sum_{1 \le i < j \le d} f_{ij}(x_i, x_j) + \sum_{1 \le i < j < k \le d} f_{ijk}(x_i, x_j, x_k) + \ldots + f_{12\ldots d}(x_1, x_2, \ldots, x_d)$$

Où f_0 est une constante

- L'unicité de cette décomposition est assurée par les conditions :

$$\int_0^1 f_{i_1,\ldots,i_s}(x_{i_1}, \ldots, x_{i_s}) dx_{i_k} = 0 \qquad \forall k = 1,\ldots,s \qquad \forall \{i_1,\ldots,i_s\} \subseteq \{1,\ldots,d\}$$

SS-ANOVA (Wahba 1990)

- Dans le cadre de l'utilisation d'un modèle à splines de lissage ANOVA (SS-ANOVA), on suppose que $f_j(x_j) \in H^{(j)}$ où $H^{(j)}$ est un espace Hilbertien à noyau reproduisant (RKHS) et admettant la décomposition orthogonal: $H^{(j)} = \{1\} \oplus \overline{H}^{(j)}$
- Ainsi l'espace RKHS F s'écrit comme le produit tensoriel :

$$F = \bigotimes_{j=1}^{d} H^{(j)} = \{1\} \oplus \left[\bigoplus_{j=1}^{d} \overline{H}^{(j)} \right] \oplus \left[\bigoplus_{j<k} \left(\overline{H}^{(j)} \otimes \overline{H}^{(k)} \right) \right] \oplus \cdots$$

- Généralement le développement de F est tronqué
- Selon l'ordre d'interaction considéré, on réécrit l'espace F sous la forme :

$$F = \{1\} \oplus \left\{ \bigoplus_{\gamma=1}^{q} F_\gamma \right\}$$

Ci-dessus q dépend de la dimension du modèle et des interactions considérées

SS-ANOVA (Wahba 1990)

Exemple

- Pour un modèle à 2 paramètres d'entrés, la décomposition ANOVA du modèle $f(x) \in F$ est :

$$f(x) = f_0 + f_1(x_1) + f_2(x_2) + f_{12}(x_1, x_2)$$

- Avec

$$F = \bigotimes_{j=1}^{2} H^{(j)} = \{1\} \oplus \overline{H}^{(1)} \oplus \overline{H}^{(2)} \oplus \left[\left(\overline{H}^{(1)} \otimes \overline{H}^{(2)}\right)\right]$$

$$= \{1\} \oplus F_1 \oplus F_2 \oplus F_3$$

COSSO (Lin 2006)

Définition

- Pour $f(x) \in F$ la procédure COSSO minimise :

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(x_i))^2 + \lambda^2 \sum_{\gamma=1}^{q} \|P_\gamma f\|_{F_\gamma}$$

- Avec $P_\gamma f$ la projection orthogonale de f sur F_γ
- Une formulation équivalente qui est plus facile à résoudre numériquement et qui revient à trouver θ et $f(x) \in F$ minimisant :

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\{y_i - f(\mathbf{x}_i)\}^2 + \lambda_0 \sum_{\gamma}(\theta_\gamma)^{-1}\|P_\gamma f\|_{F_\gamma}^2 + \nu \sum_{\gamma}\theta_\gamma$$

Sous la contrainte $\theta_\gamma \geq 0$

- f est sous la forme:

$$f(x) = b + \sum_{i=1}^{n} c_i \sum_{\gamma} \theta_\gamma K^\gamma(t_i, x)$$

COSSO (Lin 2006)

Définition

- Pour $f(x) \in F$ la procédure COSSO minimise :

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(x_i))^2 + \lambda^2 \sum_{\gamma=1}^{q} \left\| P_\gamma f \right\|_{F_\gamma}$$

- Avec $P_\gamma f$ la projection orthogonale de f sur F_γ
- Une formulation équivalente qui est plus facile à résoudre numériquement et qui revient à trouver θ et $f(x) \in F$ minimisant :

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\{y_i - f(\mathbf{x}_i)\}^2 + \boxed{\lambda_0} \sum_{\gamma} (\theta_\gamma)^{-1} \left\| P_\gamma f \right\|_{F_\gamma}^2 + \boxed{\nu} \sum_{\gamma} \theta_\gamma$$

Sous la contrainte $\theta_\gamma \geq 0$

Constante positive

Paramètre de régularisation

- f est sous la forme:

$$f(x) = b + \sum_{i=1}^{n} c_i \sum_{\gamma} \theta_\gamma K^\gamma(t_i, x)$$

Algorithme du COSSO

- Paramètres à estimer (b, θ_γ, c_i) de $f(x) = b + \sum_{i=1}^{n} c_i \sum_\gamma \theta_\gamma K^\gamma(t_i, x)$

Par la minimisation de : $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \{y_i - f(\mathbf{x}_i)\}^2 + \lambda_0 \sum_\gamma (\theta_\gamma)^{-1} \|P_\gamma f\|_{F_\gamma}^2 + \nu \sum_\gamma \theta_\gamma$

Algorithme du COSSO

- Paramètres à estimer (b, θ_γ, c_i) de $f(x) = b + \sum_{i=1}^{n} c_i \sum_\gamma \theta_\gamma K^\gamma(t_i, x)$

Par la minimisation de : $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\{y_i - f(\mathbf{x}_i)\}^2 + \lambda_0 \sum_\gamma (\theta_\gamma)^{-1} \|P_\gamma f\|^2_{F_\gamma} + \nu \sum_\gamma \theta_\gamma$

- Algorithme:

Pour θ_γ fixé

$$\min_{\mathbf{c},b} \|\mathbf{y} - \mathbf{f}\|_n^2 + n\lambda_0 \mathbf{c}^T K_\theta \mathbf{c}$$

étape1

Algorithme du COSSO

- Paramètres à estimer (b, θ_γ, c_i) de $f(x) = b + \sum_{i=1}^{n} c_i \sum_\gamma \theta_\gamma K^\gamma(t_i, x)$

Par la minimisation de : $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\{y_i - f(\mathbf{x}_i)\}^2 + \lambda_0 \sum_\gamma (\theta_\gamma)^{-1} \|P_\gamma f\|_{F_\gamma}^2 + \nu \sum_\gamma \theta_\gamma$

- Algorithme:

Pour θ_γ fixé

$$\min_{\mathbf{c},b} \|\mathbf{y} - \boxed{\mathbf{f}}\|_n^2 + n\lambda_0 \mathbf{c}^T \boxed{K_\theta} \mathbf{c}$$

étape1

$$\mathbf{f} = K_\theta \mathbf{c} - b\mathbf{1}_n$$

$$K_\theta = \sum_\gamma \theta_\gamma K_\gamma$$

Algorithme du COSSO

- Paramètres à estimer (b, θ_γ, c_i) de $f(x) = b + \sum_{i=1}^{n} c_i \sum_{\gamma} \theta_\gamma K^\gamma(t_i, x)$

Par la minimisation de : $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\{y_i - f(\mathbf{x}_i)\}^2 + \lambda_0 \sum_\gamma (\theta_\gamma)^{-1} \|P_\gamma f\|_{F_\gamma}^2 + \nu \sum_\gamma \theta_\gamma$

- Algorithme:

Pour θ_γ fixé

$$\min_{\mathbf{c},b} \|\mathbf{y} - \boxed{\mathbf{f}}\|_n^2 + n\lambda_0 \mathbf{c}^T \boxed{K_\theta} \mathbf{c}$$

avec ***c* et** b de l'étape 1

étape1

$$\mathbf{f} = K_\theta \mathbf{c} - b\mathbf{1}_n$$

$$K_\theta = \sum_\gamma \theta_\gamma K_\gamma$$

Algorithme du COSSO

- Paramètres à estimer (b, θ_γ, c_i) de $f(x) = b + \sum_{i=1}^{n} c_i \sum_\gamma \theta_\gamma K^\gamma(t_i, x)$

Par la minimisation de : $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\{y_i - f(\mathbf{x}_i)\}^2 + \lambda_0 \sum_\gamma (\theta_\gamma)^{-1} \|P_\gamma f\|_{F_\gamma}^2 + \nu \sum_\gamma \theta_\gamma$

- Algorithme:

Pour θ_γ fixé

$$\min_{\mathbf{c},b} \|\mathbf{y} - \boxed{\mathbf{f}}\|_n^2 + n\lambda_0 \mathbf{c}^T \boxed{K_\theta} \mathbf{c}$$

étape1

$$\mathbf{f} = K_\theta \mathbf{c} - b\mathbf{1}_n$$

$$K_\theta = \sum_\gamma \theta_\gamma K_\gamma$$

avec ***c* et** b
de l'étape 1

$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \|\mathbf{z} - D\boldsymbol{\theta}\|_n^2$$

s.c $\theta_\gamma \geq 0$, $\sum_\gamma \theta_\gamma \leq M$

étape2: Algorithme du Garrote non négatif (Breiman1995)

Algorithme du COSSO

- Paramètres à estimer (b, θ_γ, c_i) de $f(x) = b + \sum_{i=1}^{n} c_i \sum_\gamma \theta_\gamma K^\gamma(t_i, x)$

Par la minimisation de : $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\{y_i - f(\mathbf{x}_i)\}^2 + \lambda_0 \sum_\gamma (\theta_\gamma)^{-1} \|P_\gamma f\|^2_{F_\gamma} + \nu \sum_\gamma \theta_\gamma$

- Algorithme:

Pour θ_γ fixé

$$\min_{\mathbf{c},b} \|\mathbf{y} - \boxed{\mathbf{f}}\|_n^2 + n\lambda_0 \mathbf{c}^T \boxed{K_\theta} \mathbf{c}$$

étape1

$$\mathbf{f} = K_\theta \mathbf{c} - b\mathbf{1}_n$$

$$K_\theta = \sum_\gamma \theta_\gamma K_\gamma$$

avec ***c* et** b de l'étape 1

$$\mathbf{z} = \mathbf{y} - (1/2)n\lambda_0 \mathbf{c} - b\mathbf{1}_n$$

$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \|\boxed{\mathbf{z}} - \boxed{D\boldsymbol{\theta}}\|_n^2$$

s.c $\theta_\gamma \geq 0$, $\sum_\gamma \theta_\gamma \leq M$

étape2: Algorithme du Garrote non négatif (Breiman1995)

$$D_\gamma = K_\gamma c$$

Innovation Energie Environnement

Algorithme du COSSO

- Paramètres à estimer (b, θ_γ, c_i) de $f(x) = b + \sum_{i=1}^{n} c_i \sum_\gamma \theta_\gamma K^\gamma(t_i, x)$

Par la minimisation de : $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\{y_i - f(\mathbf{x}_i)\}^2 + \lambda_0 \sum_\gamma (\theta_\gamma)^{-1}\|P_\gamma f\|_{F_\gamma}^2 + \nu \sum_\gamma \theta_\gamma$

- Algorithme:

Pour θ_γ fixé

$$\min_{\mathbf{c},b} \|\mathbf{y} - \boxed{\mathbf{f}}\|_n^2 + n\lambda_0 \mathbf{c}^T \boxed{K_\theta} \mathbf{c}$$

étape1

$$\mathbf{f} = K_\theta \mathbf{c} - b\mathbf{1}_n$$

$$K_\theta = \sum_\gamma \theta_\gamma K_\gamma$$

avec ***c* et** b de l'étape 1

$$\mathbf{z} = \mathbf{y} - (1/2)n\lambda_0\mathbf{c} - b\mathbf{1}_n$$

$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \|\boxed{\mathbf{z}} - \boxed{D}\boldsymbol{\theta}\|_n^2$$

s.c $\theta_\gamma \geq 0$, $\sum_\gamma \theta_\gamma \leq M$

Avec les θ_γ de l'étape 2

étape2: Algorithme du Garrote non négatif (Breiman1995)

$$D_\gamma = K_\gamma c$$

Algorithme COSSO

- L'étape 1:

$$\min_{\mathbf{c},b} \|\mathbf{y}-\mathbf{f}\|_n^2 + n\lambda_0 \mathbf{c}^T K_\theta \mathbf{c}$$

est un problème d'optimisation quadratique pouvant être résolu par des méthodes linéaires

- L'étape 2

$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \|\mathbf{z}-D\boldsymbol{\theta}\|_n^2 \quad \text{s.c } \theta_\gamma \geq 0 \text{ , } \sum_\gamma \theta_\gamma \leq M$$

correspond à un problème d'optimisation quadratique sous contrainte linéaire pour lequel il existe plusieurs techniques de résolution

Algorithme de COSSO

- Dans le cas d'un modèle à haute dimension $q > n$ les algorithmes testés se sont avérés coûteux en temps de calcul et moins fiables

- On introduit un algorithme itératif qui aboutit à une solution parcimonieuse car elle permet d'obtenir des estimations nulles pour certains θ_γ

Algorithme itératif

- Soit $a > 0$ tel que $\lambda_{\max}\left(D^T D\right) \leq a$
- Pour $a = 1$

- Résoudre

$$\min_{\theta} \|\mathbf{z} - D\theta\|_n^2 \quad \text{S.C} \quad \sum_{\gamma} |\theta_\gamma| \leq M$$

Équivaut à (Daubechies 2004)

$$\boxed{\theta^{[k+1]} = S_\nu\left(\theta^{[k]} + D^T(\mathbf{z} - D\theta^{[k]})\right)}$$

Où $S_\nu(x) = \mathrm{sgn}(x)\left(|x| - \nu\right)_+$ (fonction de seuillage doux)

- Résoudre

$$\min_{\theta} \|\mathbf{z} - D\theta\|_n^2 \quad \text{S.C} \quad \theta_\gamma \geq 0$$

Équivaut à (Bertero 1998)

$$\boxed{\theta^{[k+1]} = P_+\left(\theta^{[k]} + D^T(\mathbf{z} - D\theta^{[k]})\right)}$$

Où P_+ le projecteur sur le cône réels positifs (ensemble convexe)

Algorithme itératif

Définition :

- Résoudre $\min_{\theta} \|\mathbf{z} - D\theta\|_n^2$ sous $\theta_\gamma \geq 0$ et $\sum_\gamma \theta_\gamma \leq M$

Conduit à (pour $a = 1$)

$$\boxed{\theta^{[k+1]} = S_\nu\left(P_+\left(\theta^{[k]} + D^T(Y - D\theta^{[k]})\right)\right)}$$

Où $S_\nu(x) = \mathrm{sgn}(x)\left(|x| - \nu\right)_+$ (fonction de seuillage doux)
Et P_+ le projecteur sur le cône réels positifs (ensemble convexe)

Estimation des hyper-paramètres

Validation croisée stratifiée K-fold-CV :

- Partition de l'ensemble E des données en K sous ensembles $E_1,\ldots,E_K$
- Estimation de λ_0 :
  - Minimisation de l'erreur de prédiction :

$$V(\lambda_0) = \frac{1}{n}\sum_{w=1}^{K}\sum_{(x_i,y_i)\in E_w}(y_i - \hat{f}_{\lambda_0}^{(w)}(x_i))^2$$

Où $\hat{f}_{\lambda_0}^{(w)}$ minimise :

$$\frac{1}{n}\sum_{(x_i,y_i)\notin E_w}\{y_i - f(\mathbf{x}_i)\}^2 + \lambda_0 \sum_{\gamma}\left\|P_\gamma f\right\|_{F_\gamma}^2$$

- Estimation de ν :
  - Minimisation de l'erreur de prédiction :

$$V(\nu) = \frac{1}{n}\sum_{w=1}^{K}\sum_{(x_i,y_i)\in E_w}(y_i - \hat{f}_{\nu}^{(w)}(x_i))^2$$

Où $\hat{f}_{\nu}^{(w)}$ minimise :

$$\frac{1}{n}\sum_{(x_i,y_i)\notin E_w}\{y_i - f(\mathbf{x}_i)\}^2 + \lambda_0 \sum_{\gamma}(\theta_\gamma)^{-1}\left\|P_\gamma f\right\|_{F_\gamma}^2 + \nu\sum_{\gamma}\theta_\gamma$$

Application

- Application de la méthode sur des cas analytiques et un cas réservoir
- Définition du critère de la qualité de prédiction :

$$Q2 = 1 - \frac{1/N \sum_{i=1}^{N} (f(t_i) - \hat{f}(t_i))^2}{\mathrm{var}(f(t_i))}$$

Application : Cas Analytique

- Modèle de Sobol à 8 paramètres (Saltelli 2000)

$$f(x) = \prod_{j=1}^{8} \frac{|4x_j - 2| + a_j}{1 + a_j}$$

Tel que : $a_j = \{0,1,2,4.5,99,99,99,99\}$

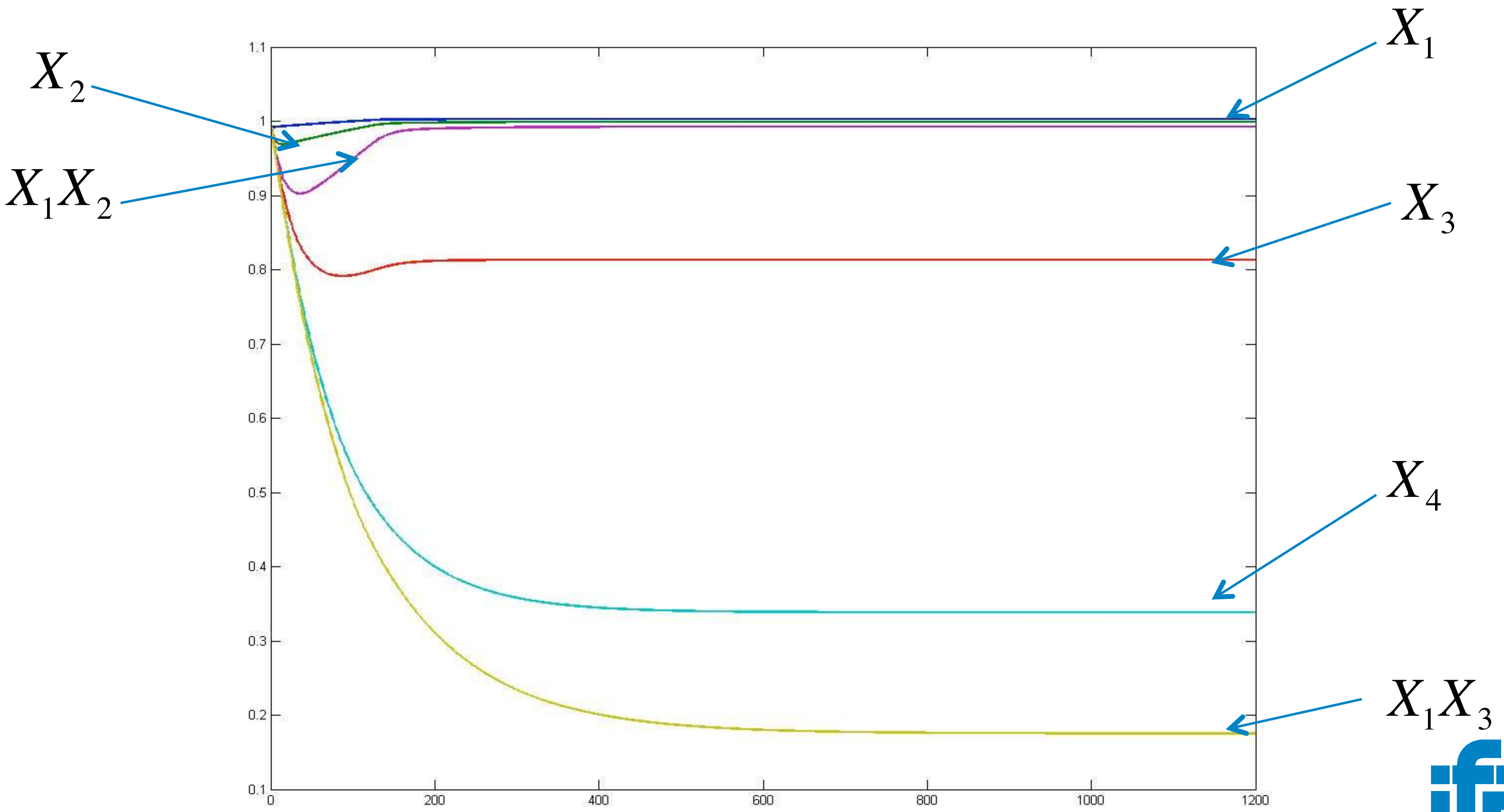
Q2	n=600
COSSO	0.99

Sur 1000 points de confirmation

Innovation Energie Environnement

Application : Cas Analytique

- Modèle de Sobol à 8 paramètres (Saltelli 2000)



Application : Cas Analytique

- Modèle de Morris à 20 paramètres (Saltelli 2000)

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^{20} \beta_i \omega_i + \sum_{i<j}^{20} \beta_{i,j} \omega_i \omega_j + \sum_{i<j<l}^{20} \beta_{i,j,l} \omega_i \omega_j \omega_l + \sum_{i<j<l<s}^{20} \beta_{i,j,l,s} \omega_i \omega_j \omega_l \omega_s$$

Tel que

$$\omega_j = \begin{cases} 2 \times (1.1 X_j / (X_j + 0.1) - 0.5) \text{ pour } j = 3,5,7 \\ 2 \times (X_j - 0.5) \qquad \text{sinon} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \beta_{\mathrm{i}} = 20 \quad \text{pour } i = 1,\ldots,10 \\ \beta_{\mathrm{i,j}} = -15 \quad \text{pour } i,j = 1,\ldots,6 \\ \beta_{\mathrm{i,j,l}} = -10 \quad \text{pour } i,j,l = 1,\ldots,5 \\ \beta_{\mathrm{i,j,l,s}} = 5 \quad \text{pour } i,j,l,s = 1,\ldots,4 \end{cases}$$

Application : cas analytique

- Les dix premiers paramètres sont influents :
  - Les six premiers ont une influence significative principalement dû à leurs interaction
  - Les quatre autres sont influents grâce à leurs effets principaux

Q2	n=150	n=300
COSSO	0.82	0.93
Krigeage	0.83	0.89

Sur 1000 points de confirmation

Application : Cas Analytique

- Modèle de Sobol à 25 paramètres (Saltelli 2000)

$$f(x) = \prod_{j=1}^{25} \frac{|4x_j - 2| + a_j}{1 + a_j} + \varepsilon$$

Tel que :

$$a_j = \{0,1,2,3,4,5,6,7,8,9,99,\ldots,99\}$$

$$\varepsilon \sim N(0,\sigma^2)$$

$$SNR \equiv 5:1$$

	n=150	n=300	n=450
COSSO	0.38	0.69	0.76
Krigeage	0.26	0.60	0.67

Sur 1000 points de confirmation

Innovation Energie Environnement

Application : Cas Analytique

- Modèle de Sobol à 25 paramètres (Saltelli 2000)

$$f(x) = \prod_{j=1}^{25} \frac{|4x_j - 2| + a_j}{1 + a_j} + \varepsilon$$

Tel que :

$$a_j = \{0,1,2,3,4,5,6,7,8,9,99,\ldots,99\}$$

$$\varepsilon \sim N(0,\sigma^2)$$

$$SNR \equiv 5:1$$

$$SNR = \frac{\mathrm{var}(f)}{\sigma^2}$$

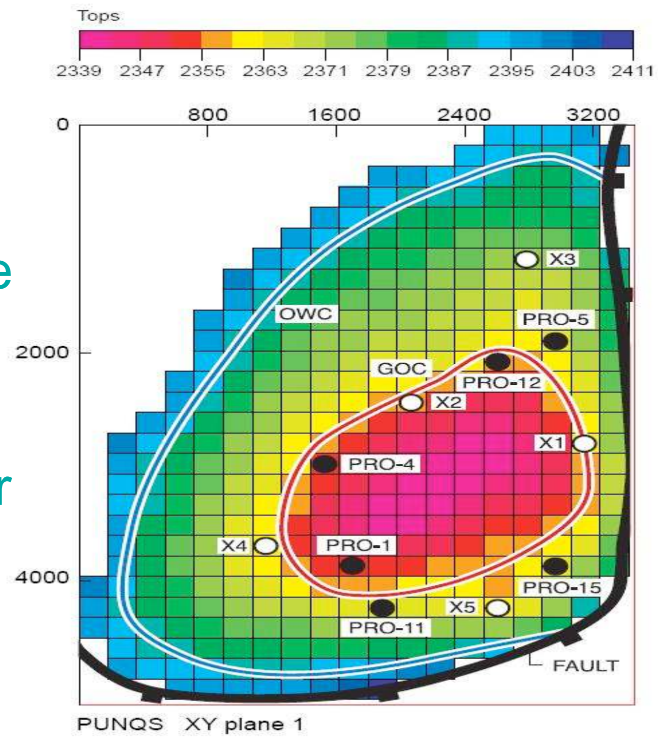
	n=150	n=300	n=450
COSSO	0.38	0.69	0.76
Krigeage	0.26	0.60	0.67

Sur 1000 points de confirmation

Application : Réservoir synthétique

- Basé sur un champ réel
- 6 puits de production
- La présence d'un aquifère ne nécessite pas le forage d'injecteurs

- Modèle d'une des sorties du simulateur à 27 paramètres



Q2	100
COSSO	0.82
Krigeage	0.72

Sur 1000 points de confirmation

Perspectives

- Amélioration de l'estimation des hyper-paramètres
- Accélération de la convergence de l'algorithme itératif
- Utilisation du COSSO pour effectuer l'analyse de sensibilité: calcul des indices de sensibilité à partir des coefficients de noyaux
- Extension de la méthode aux réponses fonctionnelles (*i.e.* cumulé d'huile en fonction du temps)