Problèmes inverses et inférence statistique

Lionel Roques (avec M. Cristofol et S. Soubeyrand)

INRA Biostatistics and Spatial Processes (BioSP) Lab

Paris, 11 octobre 2011

Part I

Introduction : quelques EDP classiques.

Problèmes d'évolution

Espace : domaine $\Omega \subseteq \mathbb{R}^N$.

Forme générale (ordre 2)

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t,x) = F\left(t, x, u, \frac{\partial u}{\partial x_i}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j}\right), \ t > 0, \ x \in \Omega.$$

Exemples particuliers

- Equations de réaction-diffusion : $\dfrac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (D(x)\nabla u) + f(t,x,u)$.
- Equation de Fisher-KPP : $\dfrac{\partial u}{\partial t} = \Delta u + u(1-u)$.
- Equation de la chaleur : $\dfrac{\partial u}{\partial t} = \Delta u$.

Champs d'application : morphogénèse (Turing 1952), génétique des pops (Fisher, KPP 1937), écologie spatiale (Skellam 1951), chimie ...

Problèmes stationnaires

Forme générale (ordre 2)

$$F\left(x, u, \frac{\partial u}{\partial x_i}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j}\right) = 0, \ x \in \Omega.$$

Exemples particuliers

- Solution stationnaire d'une R-D : $\nabla \cdot (D(x)\nabla u) + f(x, u) = 0$.
- Conductivité électrique : $\nabla \cdot (D(x)\nabla u) = 0$.

Champs d'application : les mêmes + imagerie médicale.

Problème direct

Problème direct bien posé

Le problème est bien posé si :

- il existe une solution,
- cette solution est unique.

Exemple de problème de réaction-diffusion bien posé :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (D(x) \nabla u) + r(x)\, u - \gamma(x) u^2, \ t > 0, \ x \in \Omega, \\ u(t,x) = 0, \ t > 0, \ x \in \partial\Omega, \\ u(0,x) = u_0(x), \ x \in \Omega. \end{cases}$$

- $u(t,x)$: densité de population.
- $D(x)$: coefficient de diffusion.
- $r(x)$: taux de croissance intrinsèque.
- $\gamma(x)$: compétition intraspécifique.

Part II

Problèmes inverses : détermination des paramètres d'une EDP

Problème inverse : définition

Soit $\mathcal{P}_\theta$: famille de problèmes d'EDP bien posés, paramétrisés par θ (une constante, une fonction, ...).

Problème direct : $\mathcal{P}_\theta$ bien posé $\Rightarrow \exists!$ solution $u_\theta(t,x)$ ($t > 0$, $x \in \Omega$).

Problème inverse : Soit $v(t,x)$ définie sur $[t_0, t_1] \times \omega \subset [0,\infty) \times \Omega$.
Trouver θ tel que $u_\theta(t,x) = v(t,x)$ sur $[t_0, t_1] \times \omega$?

Problème inverse bien posé

Le problème inverse est bien posé si :

- il existe θ tel que $u_\theta(t,x) = v(t,x)$ sur $[t_0, t_1] \times \omega$,
- ce paramètre est unique,
- stabilité par rapport à l'observation : $\|\theta - \hat{\theta}\| \leq \|v - \hat{v}\|$ (implique l'unicité).

Problème inverse : définition

Soit $\mathcal{P}_\theta$: famille de problèmes d'EDP bien posés, paramétrisés par θ (une constante, une fonction, ...).

Problème direct : $\mathcal{P}_\theta$ bien posé $\Rightarrow \exists!$ solution $u_\theta(t,x)$ ($t > 0$, $x \in \Omega$).

Problème inverse : Soit $v(t,x)$ définie sur $[t_0, t_1] \times \omega \subset [0,\infty) \times \Omega$.
Trouver θ tel que $u_\theta(t,x) = v(t,x)$ sur $[t_0, t_1] \times \omega$?

Problème inverse bien posé

Le problème inverse est bien posé si :

- il existe θ tel que $u_\theta(t,x) = v(t,x)$ sur $[t_0, t_1] \times \omega$,
- ce paramètre est unique,
- stabilité par rapport à l'observation : $\|\theta - \hat{\theta}\| \leq \|v - \hat{v}\|$ (implique l'unicité).

Problème inverse : définition

Soit $\mathcal{P}_\theta$: famille de problèmes d'EDP bien posés, paramétrisés par θ (une constante, une fonction, ...).

Problème direct : $\mathcal{P}_\theta$ bien posé $\Rightarrow \exists!$ solution $u_\theta(t,x)$ ($t > 0$, $x \in \Omega$).

Problème inverse : Soit $v(t,x)$ définie sur $[t_0, t_1] \times \omega \subset [0,\infty) \times \Omega$.
Trouver θ tel que $u_\theta(t,x) = v(t,x)$ sur $[t_0, t_1] \times \omega$?

Problème inverse bien posé

Le problème inverse est bien posé si :

- il existe θ tel que $u_\theta(t,x) = v(t,x)$ sur $[t_0, t_1] \times \omega$,
- ce paramètre est unique,
- stabilité par rapport à l'observation : $\|\theta - \hat{\theta}\| \leq \|v - \hat{v}\|$ (implique l'unicité).

Problème inverse : exemple classique

Problème de Calderón

Détermination de la conductivité electrique d'un milieu à partir de mesures sur le bord.

$$\nabla \cdot (\theta(x)\, \nabla u) = 0, \; x \in \Omega.$$

Application : tomographie par impédance électrique.

Conditions au bord : on fixe le courant $\dfrac{\partial u}{\partial \nu} = f$ sur $\partial\Omega$.

Mesure : Pour chaque courant f, mesure du potentiel u_θ sur $\partial\Omega$.

Résultat : unicité de la conductivité $\theta(x)$ sur tout Ω (existence implicite).

Problème inverse : nouveaux résultats

Equation de réaction-diffusion en dimension N. Unicité et stabilité

Considérons le modèle de réaction-diffusion :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u + r(x)\, u - \gamma(x) u^2, \ t > 0, \ x \in \Omega, \\ u(t,x) = 0, \ t > 0, \ x \in \partial\Omega, \\ u(0,x) = u_0(x), \ x \in \Omega. \end{cases} \qquad (\mathcal{P}_r)$$

Coefficient à déterminer : $r(x)$.

Mesure : $u(t,x)$ sur $[t_0, t_1] \times \omega$ et $u(T,x)$ sur Ω, pour un certain $T \in (t_0, t_1)$.

Théorème : Unicité et stabilité, Cristofol, R. 2008

Soient u et $\tilde{u}$ les solutions de $(\mathcal{P}_r)$ et $(\mathcal{P}_{\tilde{r}})$. Pour tout $\omega \subset \Omega$, $t_0, t_1 > 0$ et $T \in (t_0, t_1)$ on a

$$\|r - \tilde{r}\|_{L^2(\Omega)} \leq C \|u_t - \widetilde{u}_t\|_{L^2((t_0,t_1)\times\omega)} + C \|u(T,\cdot) - \widetilde{u}(T,\cdot)\|_{H^2(\Omega)}.$$

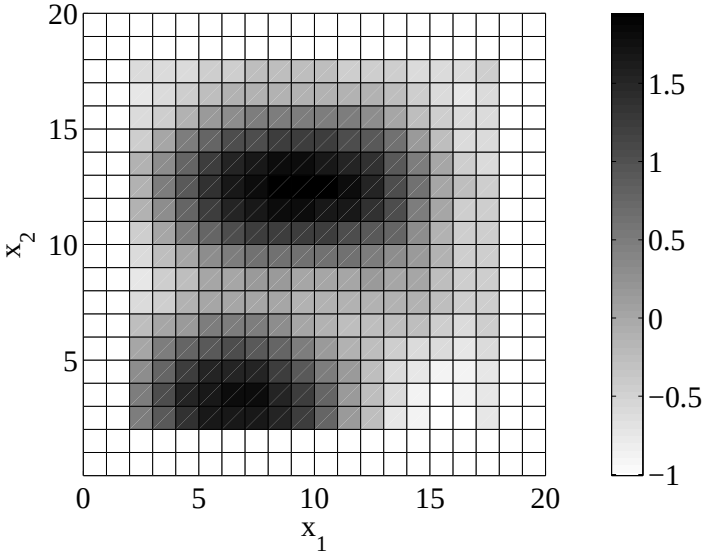
Problème inverse : nouveaux résultats

Equation de réaction-diffusion en dimension N. Tests numériques

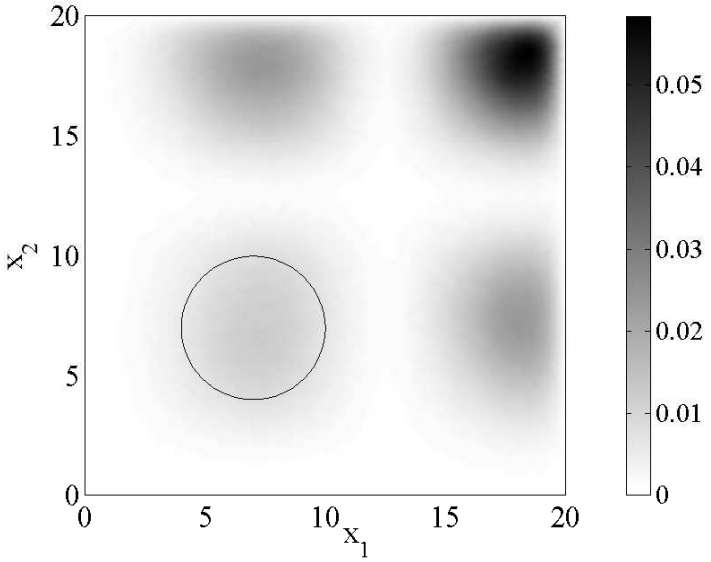
Données : mesures (exactes) de $u(t,x)$ sur $(t_0,t_1)\times\omega\cup T\times\Omega$.

Détermination numérique de r par minimisation de la fonctionnelle :

$$G(\tilde{r}) = \|u_t - \widetilde{u}_t\|_{L^2((t_0,t_1)\times\omega)} + \|u(T,\cdot) - \widetilde{u}(T,\cdot)\|_{H^2(\Omega)}.$$



(a) Vrai $r(x)$



(b) Mesure de $u(T,x)$

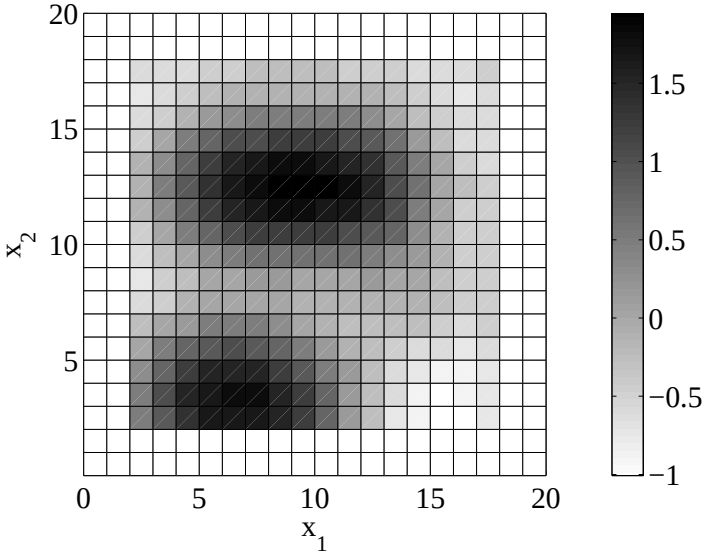
Problème inverse : nouveaux résultats

Equation de réaction-diffusion en dimension N. Tests numériques

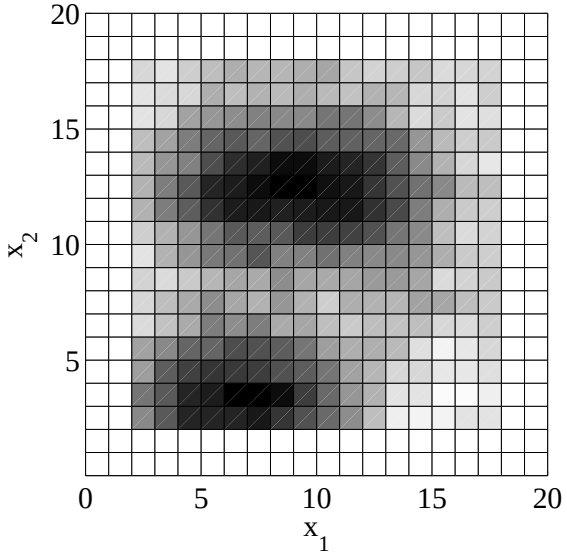
Données : mesures (exactes) de $u(t,x)$ sur $(t_0,t_1)\times\omega\cup T\times\Omega$.

Détermination numérique de r par minimisation de la fonctionnelle :

$$G(\tilde{r}) = \|u_t - \widetilde{u}_t\|_{L^2((t_0,t_1)\times\omega)} + \|u(T,\cdot) - \widetilde{u}(T,\cdot)\|_{H^2(\Omega)}.$$



(c) Vrai $r(x)$



(d) $\tilde{r}(x)$ obtenu par minimisation

Problème inverse : nouveaux résultats

Dimension 1. Détermination à partir de mesures locales

Question : unicité à partir de mesures uniquement *locales* (sur ω) ?

Réponse : oui, au moins en dimension 1 (ou en radial).

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + r(x)\, u - \gamma(x) u^2, \;\; t > 0, \;\; x \in (a, b) \qquad (\mathcal{P}_r)$$

Théorème : Unicité, R., Cristofol 2010

Soient u et $\tilde{u}$ les solutions de $(\mathcal{P}_r)$ et $(\mathcal{P}_{\tilde{r}})$. Pour tout $\omega \subset \Omega$, $t_0, t_1 > 0$,

$$(u \equiv \tilde{u} \text{ sur } (t_0, t_1) \times \omega) \Rightarrow (r \equiv \tilde{r} \text{ sur } \Omega).$$

Pas de résultat de stabilité.

Problème inverse : nouveaux résultats

Dimension 1. Tests numériques

Données : mesures (exactes) de $u(t,x)$ sur $(t_0,t_1)\times\omega$.

Détermination numérique de r par minimisation de la fonctionnelle :

$$G(\tilde{r}) = \|u-\widetilde{u}\|_{L^2((t_0,t_1)\times\omega)}.$$

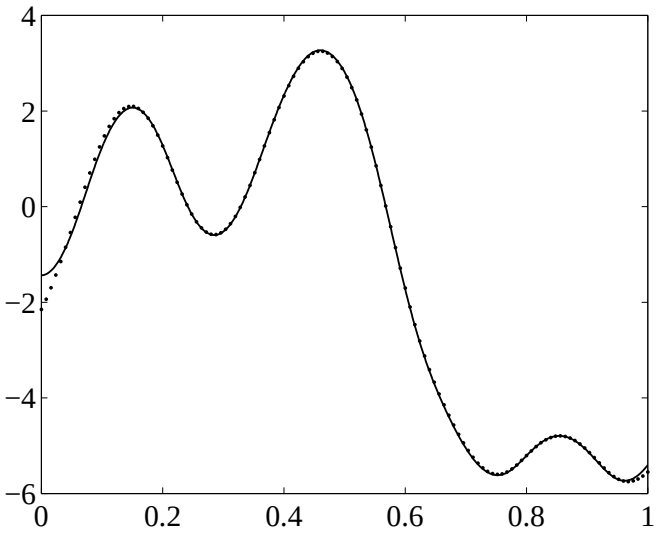


Figure: $r(x)$ et $\tilde{r}(x)$. Ici $(t_0,t_1)=(0,0.3)$ et $\omega = 2/3\pm\varepsilon$.

Problème inverse : autres résultats et limitations

Autres résultats :

- Détermination simultanée de N coefficients (avec Cristofol, Garnier, Hamel, 2011)
- Systèmes compétitifs (avec Cristofol, 2011)
- Modèles avec terme de retard (avec Chekroun, Cristofol, Ghil, Soubeyrand, 2011)

Limites de l'approche "problèmes inverses" :

- Hyp. 1 : le processus observé doit vérifier le modèle (sinon pas d'existence).
- Hyp. 2 : les mesures du processus doivent être exactes.
- Hyp. 3 : le processus doit être mesuré directement.

Problème inverse : autres résultats et limitations

Autres résultats :

- Détermination simultanée de N coefficients (avec Cristofol, Garnier, Hamel, 2011)
- Systèmes compétitifs (avec Cristofol, 2011)
- Modèles avec terme de retard (avec Chekroun, Cristofol, Ghil, Soubeyrand, 2011)

Limites de l'approche "problèmes inverses" :

- Hyp. 1 : le processus observé doit vérifier le modèle (sinon pas d'existence).
- Hyp. 2 : les mesures du processus doivent être exactes.
- Hyp. 3 : le processus doit être mesuré directement.

Problème inverse : autres résultats et limitations

Autres résultats :

- Détermination simultanée de N coefficients (avec Cristofol, Garnier, Hamel, 2011)
- Systèmes compétitifs (avec Cristofol, 2011)
- Modèles avec terme de retard (avec Chekroun, Cristofol, Ghil, Soubeyrand, 2011)

Limites de l'approche "problèmes inverses" :

- Hyp. 1 : le processus observé doit vérifier le modèle (sinon pas d'existence).
- Hyp. 2 : les mesures du processus doivent être exactes.
- Hyp. 3 : le processus doit être mesuré directement.

Problème inverse : autres résultats et limitations

Autres résultats :

- Détermination simultanée de N coefficients (avec Cristofol, Garnier, Hamel, 2011)
- Systèmes compétitifs (avec Cristofol, 2011)
- Modèles avec terme de retard (avec Chekroun, Cristofol, Ghil, Soubeyrand, 2011)

Limites de l'approche “problèmes inverses" :

- Hyp. 1 : le processus observé doit vérifier le modèle (sinon pas d'existence).
- Hyp. 2 : les mesures du processus doivent être exactes.
- Hyp. 3 : le processus doit être mesuré directement.

Problème inverse : autres résultats et limitations

Autres résultats :

- Détermination simultanée de N coefficients (avec Cristofol, Garnier, Hamel, 2011)
- Systèmes compétitifs (avec Cristofol, 2011)
- Modèles avec terme de retard (avec Chekroun, Cristofol, Ghil, Soubeyrand, 2011)

Limites de l'approche “problèmes inverses" :

- Hyp. 1 : le processus observé doit vérifier le modèle (sinon pas d'existence).
- Hyp. 2 : les mesures du processus doivent être exactes.
- Hyp. 3 : le processus doit être mesuré directement.

Problème inverse : autres résultats et limitations

Autres résultats :

- Détermination simultanée de N coefficients (avec Cristofol, Garnier, Hamel, 2011)
- Systèmes compétitifs (avec Cristofol, 2011)
- Modèles avec terme de retard (avec Chekroun, Cristofol, Ghil, Soubeyrand, 2011)

Limites de l'approche “problèmes inverses" :

- Hyp. 1 : le processus observé doit vérifier le modèle (sinon pas d'existence).
- Hyp. 2 : les mesures du processus doivent être exactes.
- Hyp. 3 : le processus doit être mesuré directement.

Part III

Estimation de paramètres d'EDP : modèles mécanico-statistiques (avec S. Soubeyrand)

Estim. de paramètres d'EDP : objectifs et difficultés

Données : observations bruitées et incomplètes d'un phénomène spatio-temporel sensé vérifier une EDP $\mathcal{P}_\theta$.

Objectif : estimer le "meilleur" paramètre θ.

$\rightarrow$ calcul d'une vraisemblance $P(u_\theta = \text{Observations}|\theta)$?

Problèmes

- 1 : modèle déterministe $\rightarrow P(u_\theta = \text{Observations}|\theta) \in \{0, 1\}$
- 2 : en général $P(u_\theta = \text{Observations}|\theta) = 0$, pour tout θ.

Solution : utiliser un modèle statistique pour modéliser le processus d'observation.

$\rightarrow$ conduit à un modèle global dit "mécanico-statistique".

Estim. de paramètres d'EDP : objectifs et difficultés

Données : observations bruitées et incomplètes d'un phénomène spatio-temporel sensé vérifier une EDP $\mathcal{P}_\theta$.

Objectif : estimer le "meilleur" paramètre θ.

$\rightarrow$ calcul d'une vraisemblance $P(u_\theta = \text{Observations}|\theta)$?

Problèmes

- 1 : modèle déterministe $\rightarrow P(u_\theta = \text{Observations}|\theta) \in \{0, 1\}$
- 2 : en général $P(u_\theta = \text{Observations}|\theta) = 0$, pour tout θ.

Solution : utiliser un modèle statistique pour modéliser le processus d'observation.

$\rightarrow$ conduit à un modèle global dit "mécanico-statistique".

Exemple de modèle ménanico-statistique

Partie mécaniste

Densité de population d'une espèce nuisible contrôlée par le modèle

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = D\,\Delta\, u + r(x)\, u - \gamma u^2,\ t > 0,\ x \in \Omega = (0,1)^2, \\ \partial_\nu u(t,x) = 0,\ t > 0,\ x \in \partial\Omega, \\ u(0,x) = e^{-\|x - x_0\|},\ x \in \Omega. \end{cases}$$

Hypothèses sur les coeffs. :

- D, γ positifs et constants.
- $r(x)$ constant par morceaux : $\boldsymbol{r} = (r_1, r_2, r_3, r_4)$.

$\rightarrow$ problème direct bien posé (existence, unicité).

Exemple de modèle ménanico-statistique

Partie mécaniste

Hypothèses sur les coeffs (suite).

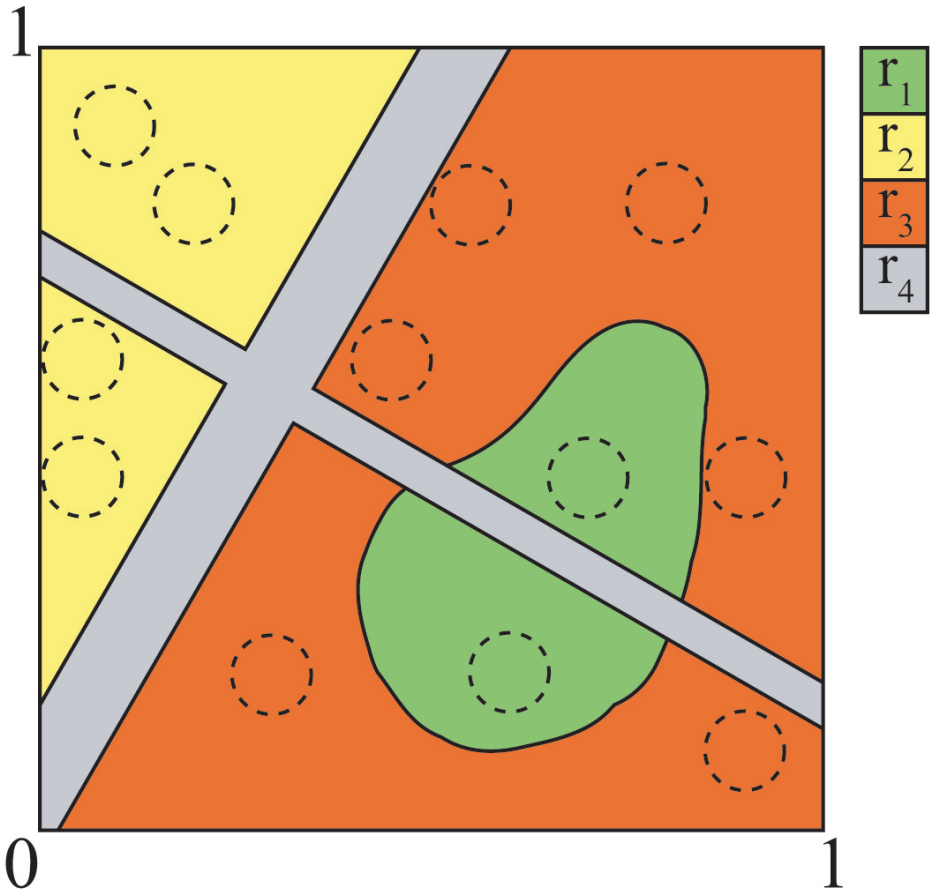


Figure: Ω est partitionné en 4 régions sur lesquelles $r(x)$ est constant r_1, r_2, r_3, r_4.

Exemple de modèle ménanico-statistique

Partie statistique : construction du modèle stat.

Objectif : modéliser le processus d'observation dont les données sont issues.

Exemple d'observations : impact de l'espèce nuisible, dans des sous-domaines ω_i.
= nombre d'hôtes attaqués dans chaque sous-domaine.

Hyp. 1 : impact dans ω proportionnel à la densité de pop. et au temps passé par les individus dans ω.
$\rightarrow$ impact au temps τ :

$$Y(u)(\tau, \omega) = \alpha \int_0^\tau \int_\omega u(t, x)\, dx\, dt.$$

Exemple de modèle ménanico-statistique

Partie statistique : construction du modèle stat.

Objectif : modéliser le processus d'observation dont les données sont issues.

Exemple d'observations : impact de l'espèce nuisible, dans des sous-domaines ω_i.
= nombre d'hôtes attaqués dans chaque sous-domaine.

Hyp. 2 : les mesures $\tilde{Y}_{ij}$ dans ω_i au temps τ_j suivent des lois de Poisson (de moyenne $\rho\, Y(u)(\tau_{ij}, \omega_i)$) :

$$\tilde{Y}_{ij} \sim_{indep} \text{Poisson}\{\rho\, Y(u)(\tau_{ij}, \omega_i)\}.$$

Exemple de modèle ménanico-statistique

Partie statistique : calcul d'une vraisemblance

- Soit $\theta = (D, \gamma, \boldsymbol{r})$ un vecteur de paramètres.
- Soit u la solution du modèle dynamique associé à θ.

Distribution du processus d'observation $\tilde{\mathbf{Y}} = (\tilde{Y}_{ij})_{1 \leq i \leq I, 1 \leq j \leq J}$:

$$f_{\tilde{\mathbf{Y}}}(\tilde{\mathbf{y}}; \theta) = \prod_{1 \leq i \leq I, 1 \leq j \leq J} \exp\left\{-\rho\, Y(u)(\tau_{ij}, \omega_i)\right\} \frac{\left\{\rho\, Y(u)(\tau_{ij}, \omega_i)\right\}^{\tilde{y}_{ij}}}{\tilde{y}_{ij}!},$$

avec $\tilde{\mathbf{y}} = (\tilde{y}_{ij})_{1 \leq i \leq I, 1 \leq j \leq J}$.

Etant données des observations $\tilde{\mathbf{y}}$ et le vecteur θ, on donc peut calculer la vraisemblance :

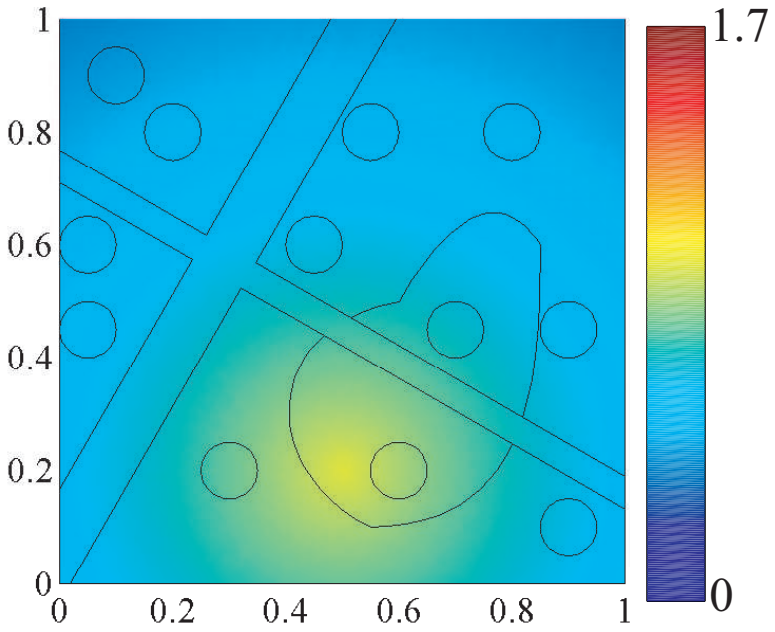
$$\mathcal{L}(\theta) = f_{\tilde{\mathbf{Y}}}(\tilde{\mathbf{y}}; \theta).$$

Exemple de modèle ménanico-statistique

Application numérique : simulation du jeu de données

On fixe : $D^* = 5 \cdot 10^{-2}$, $\gamma^* = 1$, $\mathbf{r}^* = (r_1, r_2, r_3, r_4) = (4, 2, 0, -4)$, $\alpha = 10^4$ et $\rho = 0.8$.

On simule le modèle dynamique avec ces paramètres :



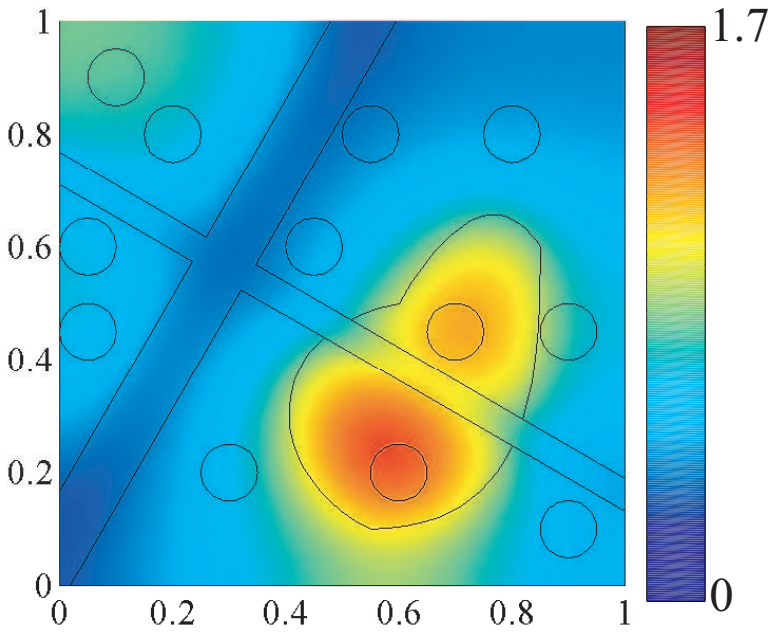
(a) $t = 0$

Exemple de modèle ménanico-statistique

Application numérique : simulation du jeu de données

On fixe : $D^* = 5 \cdot 10^{-2}$, $\gamma^* = 1$, $\mathbf{r}^* = (r_1, r_2, r_3, r_4) = (4, 2, 0, -4)$, $\alpha = 10^4$ et $\rho = 0.8$.

On simule le modèle dynamique avec ces paramètres :



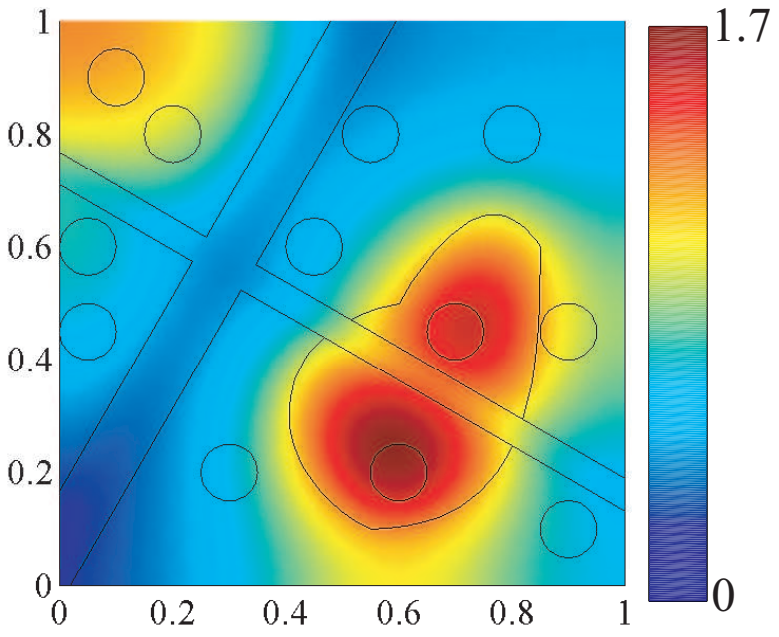
(b) $t = 0.5$

Exemple de modèle ménanico-statistique

Application numérique : simulation du jeu de données

On fixe : $D^* = 5 \cdot 10^{-2}$, $\gamma^* = 1$, $\mathbf{r}^* = (r_1, r_2, r_3, r_4) = (4, 2, 0, -4)$, $\alpha = 10^4$ et $\rho = 0.8$.

On simule le modèle dynamique avec ces paramètres :



(c) $t = 4$

Exemple de modèle ménanico-statistique

Application numérique : simulation du jeu de données

On fixe : $D^* = 5 \cdot 10^{-2}$, $\gamma^* = 1$, $\mathbf{r}^* = (r_1, r_2, r_3, r_4) = (4, 2, 0, -4)$, $\alpha = 10^4$ et $\rho = 0.8$.

On échantillonne suivant le modèle d'observation :

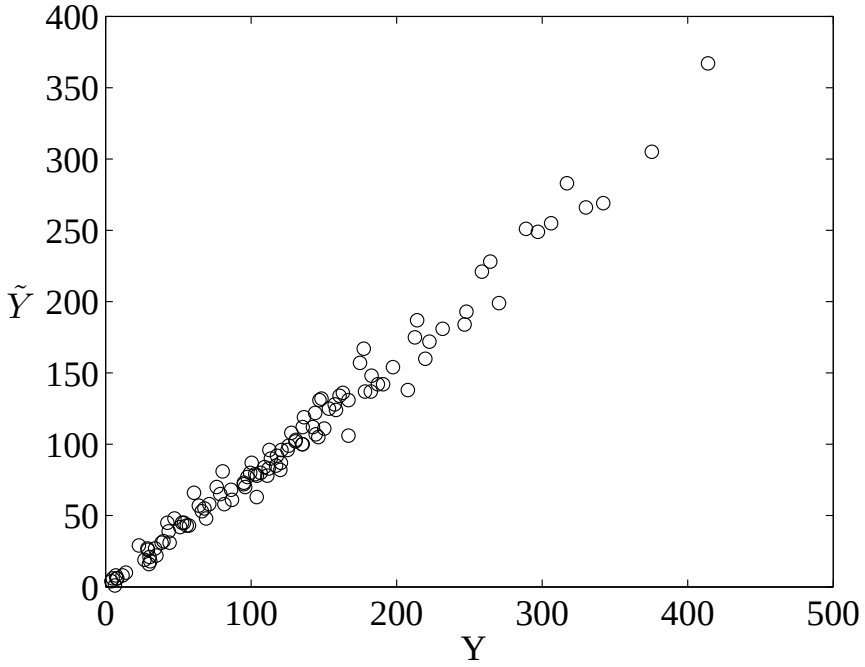


Figure: Impact réel vs impact observé : $Y(u)(\tau_{ij}, \omega_i)$ vs $\tilde{Y}_{ij}$.

Exemple de modèle ménanico-statistique

Application numérique : estimation Bayesienne

Objectif : estimer θ^* à partir des données $\tilde{Y}_{ij}$.

Méthode Bayesienne

- Prior uniforme pour θ :

$$\pi(\theta) = \frac{\mathbb{1}(10^{-2} \leq D \leq 1,\ 0.1 < \gamma \leq 10,\ -5 \leq r_1, \ldots, r_4 \leq 5)}{0.99 \times 9.9 \times 10^4}.$$

- Posterior :

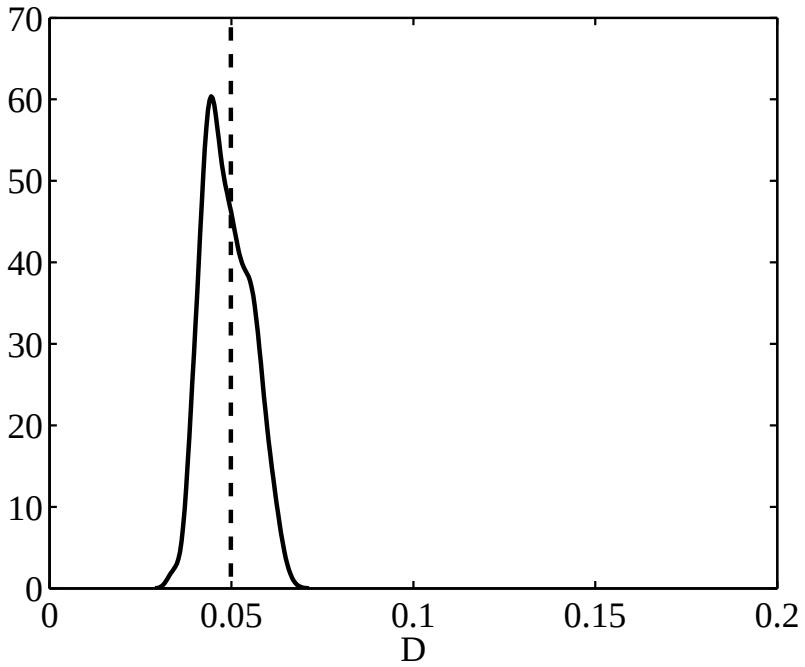
$$f(\theta \mid \tilde{\mathbf{y}}) = \frac{\mathcal{L}(\theta)\pi(\theta)}{\int_{\mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}^4} \mathcal{L}(\alpha)\,\pi(\alpha) d\alpha}.$$

Estimation de la posterior par MCMC.

Exemple de modèle ménanico-statistique

Estimation Bayesienne : résultats

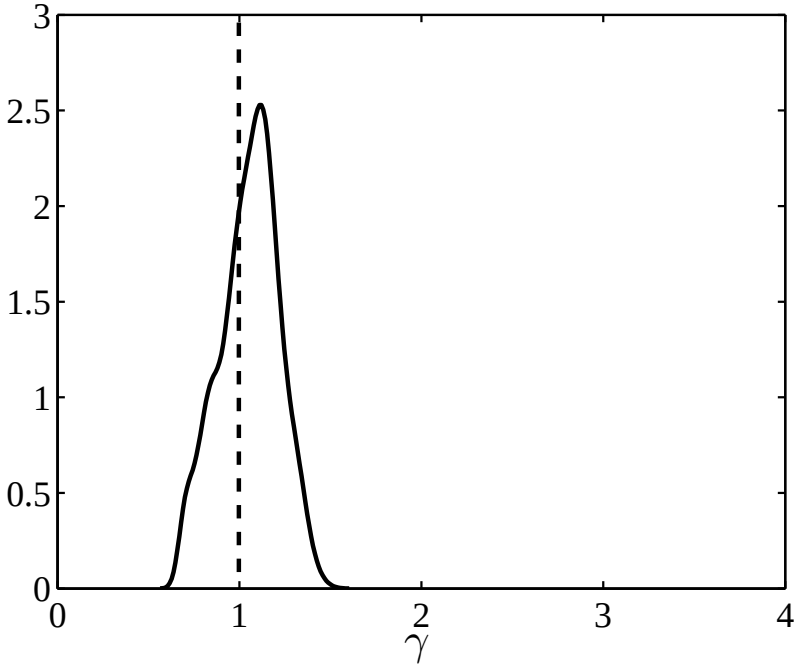
Distributions marginales des paramètres D, γ et $\mathbf{r}$.



Exemple de modèle ménanico-statistique

Estimation Bayesienne : résultats

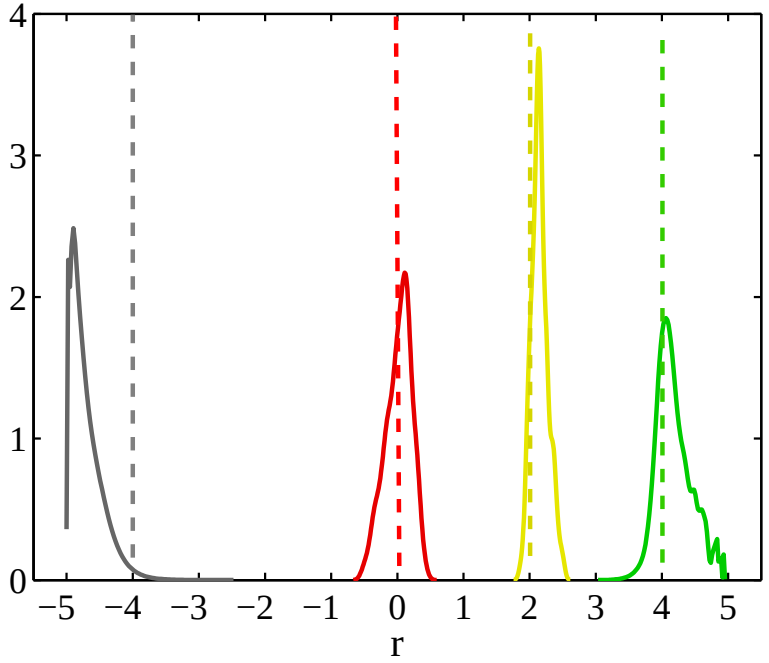
Distributions marginales des paramètres D, γ et $\mathbf{r}$.



Exemple de modèle ménanico-statistique

Estimation Bayesienne : résultats

Distributions marginales des paramètres D, γ et $\mathbf{r}$.



Part IV

Conclusions

Conclusions

- *Problèmes inverses*
  - importance des résultats d'unicité.
  - possibilité de déterminer des paramètres dans tout Ω à partir d'information très locale (sur le bord ou sur ω).
  - résultats rigoureux mais essentiellement philosophiques (en écologie : pas de modèle exact ni de mesures exactes).

- *Modèles mécanico-statistiques*
  - approche souple (utilisation de données de différents types).
  - utilisable même quand pb inverse mal posé (pas d'existence).
  - permet l'estimation par MV ou méthode Bayesienne.
  - efficace sur notre exemple.
  - déjà appliqué à des données réelles (avec Soubeyrand et Rousselet, 2011).

Conclusions

Merci !