

Proposition d'un sujet de thèse (2024-2027)

Problème direct et inverse pour la modélisation de l'écoulement et du transport de masse en milieux poreux avec des réseaux de neurones contraints par la physique.

Université de Strasbourg – ED Sciences de la Terre et Environnement (ED n° 413)

Présentation de l'équipe d'accueil

Unité de recherche : Institut Terre et Environnement de Strasbourg (ITES) (UMR7063)

Discipline(s) : Sciences de la Terre et Environnement

Directeur : Renaud Toussaint

Adresse : 5, rue René Descartes 67084 Strasbourg cedex

Intitulé de l'équipe d'accueil : TRansferts dans les HYdrosystèmes COntinentaux - TrHyCo

Responsable de l'équipe d'accueil : Benjamin Belfort et Marwan Fahs

Courriel: belfort@unistra.fr; fahs@unistra.fr

Téléphone : 03 68 85 04 48

Directeur de la thèse : François Lehmann

Téléphone : 03 68 85 05 04

Courriel: lehmann@unistra.fr

Nb de doctorants dirigé à l'ED : 0.5

Co-directeur de la thèse : Anis Younes

Téléphone : 03 68 85 04 48

Courriel: younes@unistra.fr

Nb de doctorants dirigé à l'ED : 1.0

Co-financement

Demande de ½ bourse région en cours

Contrats de thèse attribués par l'Université de Strasbourg depuis 2019

Lingai GUO

- ½ bourse ED413

- 2021-2024

- direction : Anis YOUNES (1)

Candidat.e potentiel.le

Un étudiant actuellement en stage M2 (financement APRONA) pourrait candidater

Collaborations extérieures

Pr. Thomas Nagel, TU Bergakademie Freiberg et Pr. Hussein Hoteit, King Abdullah University of Science and Technology.

Descriptifs contexte scientifique et sujet de thèse

L'étude des processus couplés d'écoulement et de transfert de masse dans les milieux poreux revêt une importance primordiale dans différentes applications industrielles et environnementales en lien avec la gestion de la ressource en eau. Dans toutes ces applications, la modélisation physique est devenue un outil irremplaçable pour réaliser des prévisions sur la quantité et la qualité des ressources disponibles. La méthodologie de la modélisation physique consiste à représenter les processus physiques par des équations mathématiques, et à résoudre l'ensemble des équations par

des méthodes numériques. Lorsqu'elle est combinée à des observations sur le terrain et à une analyse fiable de l'incertitude, la modélisation peut être utilisée efficacement à des fins multiples, telles que la compréhension des processus physiques, la conception des systèmes, l'élaboration de prévisions et la prise de décision.

La modélisation numérique de ces processus met en évidence des défis spécifiques liés aux multiples processus qui agissent à différentes échelles de temps et d'espace, à la nature des milieux poreux et à la nature des modèles mathématiques. Les grandes échelles spatiales des domaines étudiés (des dizaines voire des centaines de kilomètres), les grandes échelles de temps (plusieurs années), la forte hétérogénéité (plusieurs ordres de grandeur sur de petites échelles spatiales), la présence de fractures de failles, l'anisotropie, la forte non-linéarité, les couplages multi-physiques et les caractéristiques incertaines des milieux souterrains ne sont que quelques exemples de problèmes majeurs qui font de la modélisation numérique une tâche difficile et complexe. Après plusieurs décennies de recherche sur la modélisation numérique en hydrogéologie, les modèles restent encore un sujet d'étude important. Plusieurs questions restent ouvertes concernant l'efficacité et la robustesse des modèles numériques ainsi que leurs capacités pour la prise en compte la plus réaliste possible des domaines d'étude.

Les réseaux de neurones d'apprentissage profond (DLNN) émergent comme une nouvelle technologie pour la modélisation avec d'excellents résultats dans de nombreux domaines et applications scientifiques. Le potentiel d'utilisation des DLNNs en géosciences et en hydrogéologie est important, en raison de la non-linéarité des processus physiques associés (Marçais et De Dreuzy, 2017). Dans ces domaines, les données peuvent être obtenues de deux sources : i) des observations du terrain ou en laboratoire, et ii) des simulations avec des modèles physiques (mécanistes). Ces données d'observation ou de simulation ont été utilisées pour développer des modèles efficaces et robustes via les DLNNs, qui peuvent aider ou remplacer les modèles mécanistes dans le développement des études de prédiction, d'estimation de paramètres ou d'analyse. Plusieurs études ont montré que, par rapport aux interpolateurs traditionnels, les DLNNs sont plus robustes car ils permettent de mieux représenter des processus non linéaires complexes (Laloy et Jacques, 2019 ; Tahmasebi et al., 2020).

Les DLNNs nécessitent un ensemble de données d'apprentissage de taille importante. Ceci représente un facteur limitant leur applicabilité à des problèmes à grande échelle. En outre, un inconvénient majeur de l'utilisation des DLNNs dans des problèmes scientifiques impliquant des processus physiques, est le manque de représentation rigoureuse des lois physiques. Ainsi, une nouvelle technique a été proposée récemment pour pallier ces problèmes (Raissi et al. 2019, Berg and Nyström, 2018). Cette technique, connue sous le nom « Physics Informed Neural Networks » (PINNs), consiste à encoder les lois physiques dans les algorithmes d'apprentissage. Ceci permet de rendre l'apprentissage plus rapide et performant, car l'ajout des lois physiques permet de restreindre fortement le champ des solutions. Ainsi l'algorithme pourrait s'orienter rapidement vers la bonne solution et pourrait générer cette solution avec une quantité relativement faible de données d'apprentissage. Les premières applications de cette technique ont été faites en mécanique des fluides dans la résolution de l'équation de Navier Stokes. Les résultats sont prometteurs en fournissant des solutions sans maillage. Cette technique peut être utilisée pour la résolution du problème direct mais aussi pour le problème inverse. PINNs est une technique récente et peu connue. À ce stade, elle a fait l'objet de très peu d'applications dans des problèmes liés à l'hydrogéologie. La généralisation de cette technique dans plusieurs applications est actuellement un sujet brûlant (Karimpouli et Tahmasebi, 2020). Cela nécessite un travail

interdisciplinaire et une interaction entre l'hydrogéologie, les mathématiques appliquées, l'informatique et la science des données. Les applications des PINNS dans le domaine des écoulements souterrains sont limitées. Dans ce contexte, on peut citer les travaux suivants : Wang et al. (2020) et Zhang et al. (2022) ont utilisé les PINNs pour simuler l'écoulement souterrain dans les nappes captives ; Tartakovsky et al. (2020) et Bandai and Ghezzehei (2021, 2022) ont élargie l'utilisation des PINNs aux milieux non-saturés. Les PINNs ont été utilisés pour l'assimilation des données dans le cas d'un problème couplé écoulement-transport en milieux saturés. Daolun et al. (2021) ont appliqué les PINNs pour la modélisation de l'infiltration dans une nappe captive. Les PINNs ont été aussi utilisés pour modéliser un problème d'écoulement à l'interface eau-sédiment en couplant la loi de Darcy et l'équation de Stockes. Amini et al. (2022) ont utilisé les PINNs pour modéliser les processus couplés hydro-thermo-mécanique en milieux saturés. Zhang et al. (2023) ont développé une nouvelle formulation des PINNs basée sur les réseaux de neurones convolutifs pour modéliser l'écoulement diphasique. Récemment aussi, nous avons développé une nouvelle implémentation des PINNs pour simuler l'écoulement en milieux hétérogènes (Lehmann et al., 2023).

Cette brève revue sur les applications des PINNs pour la modélisation des écoulements souterrains, montre que toutes les études existantes sont limitées à des cas relativement simples. Les applications existantes sont limitées aux écoulements dans des nappes captives et surtout en milieux homogènes. L'applicabilité des PINNs pour la simulation des écoulements souterrains à l'échelle réelle, en temps et en espace, n'est pas traitée dans la littérature. Autrement dit, les PINNs n'ont jamais été utilisé pour modéliser des problèmes d'écoulements souterrains avec une variabilité temporelle importante.

Les PINNs peuvent être aussi utilisés pour l'approche inverse qui consiste à estimer les paramètres d'un modèle physique à partir des mesures de sa variable d'état (Raissi et al., 2019). Les PINNs ont montré des résultats prometteurs pour les problèmes inverses en fournissant des solutions physiquement cohérentes pour des problèmes inverses mal posés ou des problèmes impliquant un nombre important de paramètres.

Ce sujet de thèse se propose d'exploiter la technologie émergente de PINNs pour la modélisation des écoulements et du transfert de masse dans les milieux poreux. L'objectif principal des recherches que nous souhaitons mener dans le cadre de cette thèse se situe à plusieurs niveaux :

1 - Généralisation des PINNs pour l'écoulement en milieux poreux hétérogènes. Les PINNs, à notre connaissance, ont été rarement utilisés pour la loi de Darcy, surtout en milieux hétérogènes. Cette thèse cherche à appliquer cette technique pour les écoulements dans les milieux poreux hétérogènes.

2 - Généralisation des PINNs pour l'étude du transfert de masse en milieux poreux. L'un des objectifs de travail est d'évaluer la performance des PINNs dans le cas d'advection dominante.

3 - Dans la plupart des applications existantes, les PINNs ont été utilisés pour traiter des problèmes impliquant un seul processus physique (une seule équation aux dérivées partielles). Ce travail cherche à développer une nouvelle technique pour pouvoir appliquer les PINNs pour la modélisation des problèmes qui impliquent des processus couplés d'écoulement et de transport.

4 - Dans un système couplé d'équations aux dérivées partielles, l'identification des paramètres du système est classiquement formulée comme un problème inverse qui utilise le problème direct. Dans ce travail, la procédure mise en œuvre de l'identification des paramètres sera fondée sur une formulation globale de l'inversion, c'est-à-dire lors d'une minimisation conjointe du problème direct, avec les PINNs et du problème inverse.

Références

- Amini, D., Haghighat, E., Juanes, R., 2022. Physics-Informed Neural Network Solution of Thermo–Hydro–Mechanical Processes in Porous Media. *J. Eng. Mech.* 148, 04022070. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)EM.1943-7889.0002156](https://doi.org/10.1061/(ASCE)EM.1943-7889.0002156)
- Bandai, T., Ghezzehei, T.A., 2021. Physics-Informed Neural Networks With Monotonicity Constraints for Richardson-Richards Equation: Estimation of Constitutive Relationships and Soil Water Flux Density From Volumetric Water Content Measurements. *Water Res.* 57. <https://doi.org/10.1029/2020WR027642>
- Berg J. and Nyström K. 2018. A unified deep artificial neural network approach to partial differential equations in complex geometries. *Neurocomputing* (317)28–41. <https://doi.org/10.1016/j.neucom.2018.06.056>
- Daolun, L., Luhang, S., Wenshu, Z., Xuliang, L., Jieqing, T., 2021. Physics-constrained deep learning for solving seepage equation. *Journal of Petroleum Science and Engineering* 206, 109046. <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2021.109046>
- Du, H., Zhao, Z., Cheng, H., Yan, J., He, Q., 2023. Modeling density-driven flow in porous media by physics-informed neural networks for CO₂ sequestration. *Computers and Geotechnics* 159, 105433. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2023.105433>
- Fahs, H., Hayek, M., Fahs, M., Younes, A., 2014. An efficient numerical model for hydrodynamic parameterization in 2D fractured dual-porosity media. *Advances in Water Resources* 63, 179–193. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2013.11.008>
- Karimpouli and Tahmasebi, 2020. Physics informed machine learning: Seismic wave equation. *Geoscience Frontiers*. <https://doi.org/10.1016/j.gsf.2020.07.007>
- Karniadakis, G.E., Kevrekidis, I.G., Lu, L., Perdikaris, P., Wang, S., Yang, L., 2021. Physics-informed machine learning. *Nat Rev Phys* 3, 422–440. <https://doi.org/10.1038/s42254-021-00314-5>
- Karpatne, A., Ebert-Uphoff, I., Ravela, S., Bubaie, H.A., Kumar, V., 2019. Machine Learning for the Geosciences: Challenges and Opportunities. *IEEE Trans. Knowl. Data Eng.* 31, 1544–1554. <https://doi.org/10.1109/TKDE.2018.2861006>
- Laloy, E., Jacques, D., 2019. Emulation of CPU-demanding reactive transport models: a comparison of Gaussian processes, polynomial chaos expansion, and deep neural networks. *Comput Geosci*. <https://doi.org/10.1007/s10596-019-09875-y>
- Lehmann F., Fahs M., Alhubail A., Hoteit H. (2023). A mixed pressure-velocity formulation to model flow in heterogeneous porous media with physics-informed neural networks, *Adv. in Water Res.* <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2023.104564>
- Marçais, J., de Dreuzy, J.-R., 2017. Prospective Interest of Deep Learning for Hydrological Inference: J. Marçais and J.-R. de Dreuzy *Groundwater* xx, no. x: xx-xx. *Groundwater* 55, 688–692. <https://doi.org/10.1111/gwat.12557>
- Miller, C.T., Dawson, C.N., Farthing, M.W., Hou, T.Y., Huang, J., Kees, C.E., Kelley, C.T., Langtangen, H.P., 2013. Numerical simulation of water resources problems: Models, methods, and trends. *Advances in Water Resources* 51, 405–437. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2012.05.008>
- Raissi, M., Perdikaris, P., Karniadakis, G.E., 2019. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics* 378, 686–707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- Tahmasebi et al., 2020. Machine learning in geo- and environmental sciences: From small to large scale. *Adv. Water Res.* <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2020.103619>
- Tartakovsky, A.M., Marrero, C.O., Perdikaris, P., Tartakovsky, G.D., Barajas-Solano, D., 2020. Physics-Informed Deep Neural Networks for Learning Parameters and Constitutive Relationships in Subsurface Flow Problems. *Water Resour. Res.* 56. <https://doi.org/10.1029/2019WR026731>
- Wang, N., Zhang, D., Chang, H., Li, H., 2020. Deep learning of subsurface flow via theory-guided neural network. *Journal of Hydrology* 584, 124700. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2020.124700>
- Zhang, X., Zhu, Y., Wang, J., Ju, L., Qian, Y., Ye, M., Yang, J., 2022. GW-PINN: A deep learning algorithm for solving groundwater flow equations. *Advances in Water Resources* 165, 104243. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2022.104243>
- Zhang, Z., Yan, X., Liu, P., Zhang, K., Han, R., Wang, S., 2023. A physics-informed convolutional neural network for the simulation and prediction of two-phase Darcy flows in heterogeneous porous media. *Journal of Computational Physics* 477, 11919. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2023.11919>