

Inversion d'un modèle de dispersion avec effets de mémoire

M. Ouloin^a, M.C.Néel^a, M. Joelson^a, A. Cartalade^b

a. Université d'Avignon et des Pays de Vaucluse, UMR 1114 EMMAH, F-84018 Avignon, FRANCE

b. DEN-DM2S-SFME-LSET, CEA/Saclay, bât. 454, 91191 Gif sur Yvette Cedex, FRANCE

Résumé :

Dans les milieux poreux non saturés, on observe des courbes de percée décroissant comme des puissances du temps. Ceci est incompatible avec les lois de Fourier et Fick, mais correspond aux solutions du modèle MIM fractal, qui inclut des opérateurs intégral-différentiels d'ordre fractionnaire. Face à des courbes de percée expérimentales, la méthode de l'état adjoint permet de déterminer les paramètres d'une équation d'advection-dispersion. Cette méthode s'adapte au modèle MIM fractal, qui fait intervenir un opérateur fractionnaire, dont l'ordre doit être déterminé.

Abstract :

Heavy-tailed breakthrough curves, showing power-law decrease, were observed in non-saturated porous media. This is not compatible with Fick's and Fourier's laws, but the fractal MIM (a p.d.e involving a non-local operator of fractional order) is more appropriate. The adjoint state method helps finding the parameters of the advection-dispersion equation, by fitting on experimental data. We present the principles, allowing us adapting this method to the fractal MIM, a p.d.e with a fractional operator.

Mots clefs : dispersion, milieux poreux, effets de mémoire

1 Introduction

Les lois de Fourier et Fick, en général utilisées pour représenter la dispersion, sont insuffisantes pour décrire certaines données recueillies dans des milieux poreux présentant des effets de mémoire. En effet, dans des milieux insaturés, pas forcément très hétérogènes (du sable) avec un traceur passif, des courbes de percée décroissant très lentement, comme une puissance du temps ont en effet été observées [1]. Dans la mesure où ce phénomène représente réellement un comportement asymptotique, c'est à dire persiste lorsqu'on augmente la durée de l'expérience, il est incompatible avec les lois de Fourier et Fick, associées au contraire à une décroissance exponentielle. Cependant, en augmentant la durée d'une expérience de traçage, on finit par recueillir des concentrations trop faibles. On a donc besoin d'analyser des courbes de percée à partir d'un modèle capable de traiter d'éventuels effets non Fickiens, sans se fonder sur un comportement asymptotique qu'on ne sera jamais sûr d'avoir atteint, afin de déterminer avec précision la nature de ces effets. Des équations aux dérivées partielles (e.d.p) suffisamment générales pour englober à la fois les lois de Fourier et Fick, et des comportements asymptotiques non Fickiens, sont disponibles dans le cadre des opérateurs intégral-différentiels fractionnaires [8] [4].

Le modèle MIM (Mobile/Immobile Model), utilisé depuis une trentaine d'années [12] pour représenter les arrivées tardives, reste très voisin de la loi de Fourier et ne capture pas les comportements asymptotiques en puissance du temps, contrairement à sa version "fractale" [10]. Cette dernière, le MIM fractal, est une équation aux dérivées partielles (e.d.p) comportant un opérateur intégral en temps. Ses solutions peuvent décroître comme une puissance du temps ou au contraire exponentiellement, selon la valeur d'un paramètre, qui est l'ordre de cet opérateur intégral. Ce paramètre quantifie en quelque sorte les effets de mémoire et les écarts à la loi de Fick. Il y a donc lieu de pouvoir déterminer

sa valeur, à partir de données recueillies sur une durée finie. Nous présentons une méthode avec cet objectif. Il s'agit d'une adaptation au MIM fractal, de la méthode de l'état adjoint. Elle utilise des outils de simulation numérique adaptés au MIM fractal, et déjà disponibles [5].

Après un rappel du modèle étudié, et des principes de cette méthode, nous allons préciser ce qu'on entend par "état adjoint" pour le MIM fractal, puis voir comment l'utiliser pour déterminer le paramètre qui mesure la mémoire d'un milieu.

2 Le modèle MIM fractal

Soit la densité de probabilité $P(x, t)$ de trouver une particule de traceur en un point donné x à un instant donné t . Dans un milieu poreux, ce n'est pas exactement la concentration, mais on peut relier ces deux grandeurs en utilisant la porosité et la teneur en eau. Le modèle MIM fractal décrit l'évolution de P en tenant éventuellement compte de la possibilité, pour le traceur, d'être immobilisé pendant des durées aléatoires. C'est l'hétérogénéité plus ou moins grande de ces durées, qui génère des effets de mémoire.

2.1 La version originale

L'équation aux dérivées partielles [3][9]

$$\partial_t P(x, t) + \Lambda \partial_t \left(P * \frac{e^{-\omega t}}{\omega} \right) (x, t) = \partial_x (D \partial_x P - vP)(x, t) + r(x, t) \quad (1)$$

permet de tenir compte d'effets de retard dans l'arrivée d'un traceur en aval d'un puits d'injection, ou d'une colonne poreuse. Elle équivaut à une équation d'advection-dispersion couplée avec une équation d'échange d'ordre 1. Ici, v représente la vitesse moyenne ressentie localement par les particules de traceur. Pour simplifier on considère un problème unidimensionnel, x représente une section d'une colonne, qui varie dans $\Omega = [0, 1]$. De plus, r représente un terme source. Lorsque $\omega \rightarrow \infty$, la convolution (notée $*$) de noyau $\frac{e^{-\omega t}}{\omega}$ tend vers l'identité, ce qui donne

$$\partial_t P(x, t) + \Lambda \partial_t P(x, t) = \partial_x (D \partial_x P - vP)(x, t) + r(x, t) \quad (2)$$

L'équation (1) a eu un grand succès en milieux poreux, mais il faut recourir à sa version "fractale" pour simuler des effets de mémoire très marqués, avec des courbes de percée en puissance de t [1].

2.2 La version fractale du MIM

Il s'agit de l'équation aux dérivées partielles

$$\partial_t P(x, t) = \partial_x (\partial D (Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\alpha})^{-1} P - v (Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\alpha})^{-1} P)(x, t) + r(x, t), \quad (3)$$

introduite par [10] sous une forme légèrement différente. Avec α entre 0 and 1, elle contient l'intégrale fractionnelle d'ordre $1 - \alpha$, notée $I_{0,+}^{1-\alpha}$. De manière générale, lorsque β est un réel strictement positif, l'opérateur $I_{a,+}^\beta$ représente la convolution par $\frac{(t)_+^{\beta-1}}{\Gamma(\beta)}$, c'est à dire $I_{a,+}^\beta f(t) = \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_a^t (t-t')^{\beta-1} f(t') dt'$ [8]. Ici $(t)_+$ désigne la partie positive de t , égale à t lorsque ce dernier est positif, et à 0 sinon. Nous aurons aussi besoin d'appliquer l'intégrale fractionnelle à une mesure μ , selon $(I_{a,+}^\beta \mu)(t) = \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_a^t (t-t')^{\beta-1} \mu(dt')$. Plus loin nous utiliserons l'intégrale fractionnelle d'ordre β , calculée sur $[t, a]$, qui représente la convolution par $\frac{(t)_-^{\beta-1}}{\Gamma(\beta)}$, $(t)_-$ désignant la partie négative de t , ce qui équivaut à $I_{a,-}^\beta f(t) = \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_t^a (t'-t)^{\beta-1} f(t') dt'$.

L'intégrale d'ordre 1 est tout simplement une primitive, alors que le cas limite (mais singulier) $\alpha = 1$ donne l'équation (2), car l'intégrale d'ordre 0 est l'identité. Ce paramètre a un effet visible sur le comportement asymptotique (aux grands temps) des solutions : quand t est grand, pour $\alpha < 1$ $P(x, t)$ est proportionnel à $t^{-\alpha-1}$, comme l'indique la figure 1. La gauche de la figure 1 reproduit

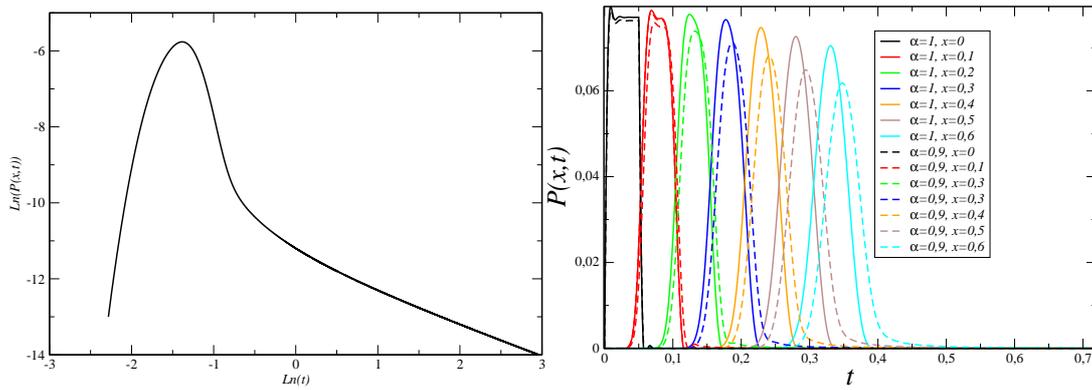


FIGURE 1 – Simulation numérique de solutions de (3) dans le domaine $[0, 1]$, à partir d’une injection initiale tout près de $x = 0$. À gauche, est représentée une courbe de percée près de la sortie $x = 1$, en coordonnées logarithmiques, les paramètres étant $\alpha = 0,8$, $\Lambda = 0,1$, et $v = 5$. À droite, une série de courbes de percée en coordonnées $(t, P(x, t))$ montre l’effet du paramètre α : avec $\alpha = 0,9$ (en pointillés) on remarque une traînée, absente dans le cas $\alpha = 1$ (traits pleins).

qualitativement les courbes de percée obtenues par [1] avec un traceur passif en sortie de colonnes remplies de sable insaturé.

L’équation (3) est une loi de conservation [5], où le flux de traceur est donné en fonction de la fraction mobile de traceur, de densité P_m par

$$F(x, t) = \partial D P_m - v P_m,$$

la densité de la fraction immobile étant

$$P_i(x, t) = \Lambda I_{0,+}^{1-\alpha} P_m(x, t), \quad (4)$$

ce qui implique

$$P(x, t) = (Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\alpha}) P_m(x, t). \quad (5)$$

Si on rapporte l’équation (3) à P_m , elle s’écrit

$$(\partial_t + \Lambda \partial_t I_{0,+}^{1-\alpha}) P_m(x, t) = \partial_x (\partial D P_m - v P_m)(x, t) + r(x, t), \quad (6)$$

où intervient l’opérateur $\partial_t I_{0,+}^{1-\alpha}$, appelé dérivée de Riemann-Liouville d’ordre α .

2.3 Interprétation stochastique

La loi de Fourier représente la densité d’un mouvement Brownien, combiné ici avec la vitesse v . Ce mouvement est lui même la limite, quand l’échelle (microscopique) de temps τ tend vers 0, de déplacements convectifs $v\tau$ combinés avec des sauts aléatoires instantanés d’amplitude $\sqrt{2D\tau}N_n$, où N_n est une variable aléatoire normale centrée réduite. L’équation (3) régit l’évolution de la densité de la limite (quand τ tend vers 0) d’une marche au hasard très similaire, obtenue en faisant suivre chaque étape par une immobilisation de durée $\tau^{1/\alpha}W_n$, la variable aléatoire W_n suivant une loi de Lévy positive, d’exposant de stabilité α et de facteur d’échelle Λ [13][7]. C’est à dire qu’aux grands temps la densité des W_n est $\Lambda t^{-1-\alpha}/|\Gamma(-\alpha)|$.

Face à des données, par exemple des courbes de percée indiquant la densité de traceur en divers points au cours du temps, on souhaite déterminer le jeu de paramètres de (3) qui convient : pour D et v , on dispose de méthodes bien connues pour la loi de Fourier, et Λ qui apparaît linéairement ne pose pas de difficulté théorique particulière. Il en va tout autrement pour α , sur lequel nous allons concentrer notre effort.

3 Principe de la méthode de l'état adjoint

Supposons disposer de courbes de percée indiquant la concentration en traceur $P_{i,n}^{obs}$ en différents points notés $i\Delta x$, au cours du temps $n\Delta t$. Nous souhaitons déterminer les valeurs des paramètres α, D, v, Λ telles que l'écart entre la solution de (3) et les données $P_{i,n}^{obs}$ soit minimal. Ceci revient à chercher le minimum de la fonctionnelle $E = \int_0^T \int_{\Omega} f(x, t) dx dt$, avec

$$f(x, t) = \sum_{i,n} d_{i,n} (P(i\Delta x, n\Delta t) - P_{i,n}^{obs})^2 \delta(x - i\Delta x) \delta(t - n\Delta t), \quad (7)$$

et $P = P_m + \Lambda I_{0,+}^{1-\alpha} P_m$, δ désignant la mesure de Dirac. Pour simplifier l'écriture nous utiliserons la notation plus légère u à la place de P_m .

Pour minimiser E , on peut utiliser une méthode de tir reposant sur des essais successifs. Après chaque essai, le choix de la nouvelle valeur à donner aux paramètres est décidé sur la base de la valeur du gradient de E , qu'il faut donc déterminer. S'agissant des composantes de ce gradient le long de D et v , on a affaire à un problème classique [11], et pour celle qui correspond à Λ c'est très peu différent, à cause de la place occupée par ce paramètre dans (6) et dans la définition de la fonctionnelle E . Nous concentrons donc l'attention sur la composante de ce gradient le long de α . La partie innovante de la méthode repose donc sur la possibilité d'établir le lien entre un accroissement infinitésimal de $\bar{\delta}\alpha$ et l'accroissement $\bar{\delta}E$ qui en résulte pour E . Formellement, l'accroissement de E s'écrit

$$\bar{\delta}E = \int_0^T \int_{\Omega} (\bar{\delta}\alpha \partial_{\alpha} f + \partial_u f \bar{\delta}u) dx dt.$$

Il est confortable de se débarrasser des termes en $\bar{\delta}u$ dans cette relation. La méthode de l'état adjoint [11] consiste à utiliser dans ce but une fonction ψ de x et t , l'état adjoint.

Remarquons pour cela que l'équation (6) se met sous la forme $Au = r$. De cette relation, on peut déduire facilement l'équation vérifiée par $\bar{\delta}u$, qui s'écrit

$$A\bar{\delta}u + \bar{\delta}\alpha \Lambda B u = 0.$$

Les opérateurs A et B sont fixés par la forme de (6). Par définition, l'état adjoint ψ est une fonction de x et t , vérifiant les conditions initiales et aux limites associées à l'opérateur A^* , adjoint de A dans $X = L^2([0, 1] \times [0, T])$, et vérifiant

$$A^* \psi + \partial_u f = 0.$$

L'intérêt de cette procédure est que ceci implique $\int_0^T \int_{\Omega} \bar{\delta}u (\partial_u f + \bar{\delta}\alpha \Lambda B u) dx dt = 0$, dont on déduit

$$\bar{\delta}E = \bar{\delta}\alpha \int_0^T \int_{\Omega} (\partial_{\alpha} f + \psi \Lambda B u) dx dt \quad (8)$$

qui relie la variation $\bar{\delta}E$ souhaitée pour E , à l'incrément $\bar{\delta}\alpha$ qui la provoque, pourvu que ce dernier reste assez petit, comme dans toute méthode de Newton.

En d'autres termes, le gradient de E dans l'espace des paramètres admet

$$\partial_{\alpha} E = \int_0^T \int_{\Omega} (\partial_{\alpha} f + \psi \Lambda B u) dx dt \quad (9)$$

pour composante le long de α . Pour utiliser ceci, il faut déterminer B , $\partial_{\alpha} f$ et ψ .

4 Mise en oeuvre de la recherche de α

A cause du produit scalaire intervenant dans la définition de E , l'adjoint de $I_{0,+}^{1-\alpha}$ dans $L^2[0, T]$ va intervenir.

4.1 L'adjoint de $I_{0,+}^{1-\alpha}$

L'adjoint dans $L^2[0, T]$, donc dans X , de $I_{0,+}^{1-\alpha}$ n'est autre que $(I_{0,+}^{1-\alpha})^* = I_{T,-}^{1-\alpha}$ [8]. Il va intervenir dans des expressions de la forme de $I_{T,-}^{1-\alpha}(g(t)\delta(t - n\Delta t))$. Or on a

$$I_{T,-}^{1-\alpha}(g(t)\delta(t - n\Delta t)) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_t^T (y-t)^{-\alpha} g(y)\delta(dy - n\Delta t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} g(n\Delta t)(t - n\Delta t)^{-\alpha}.$$

Seules les valeurs de t inférieures à $n\Delta t$ interviennent dans $(t - n\Delta t)^{-\alpha}$.

4.2 Détermination de $\partial_u f$

La fonctionnelle f est définie par (7), qui représente un produit scalaire dans X , avec

$$P = u + \Lambda I_{0,+}^{1-\alpha} u.$$

Donc la variation infinitésimale $\bar{\delta}u$ de u implique pour E , la variation

$$\int_0^T \int_{\Omega} \partial_u f \bar{\delta}u dx dt =$$

$$-2 \int_0^T \int_{\Omega} \sum_{i,n} d_{i,n} (\bar{\delta}u + \Lambda I_{0,+}^{1-\alpha} \bar{\delta}u)(x, t) ((u + \Lambda I_{0,+}^{1-\alpha} u)(x, t) - P_{i,n}^{obs}) \delta(x - i\Delta x) \delta(t - n\Delta t) dx dt,$$

qui est un produit scalaire dans X . En utilisant l'adjoint $(I_{0,+}^{1-\alpha})^*$ de $I_{0,+}^{1-\alpha}$ dans X , ceci s'écrit

$$\int_0^T \int_{\Omega} \partial_u f \bar{\delta}u dx dt = -2 \sum_{i,n} d_{i,n} \int_0^T \int_{\Omega} \bar{\delta}u (Id + \Lambda (I_{0,+}^{1-\alpha})^*) (\delta(t - n\Delta t) (u + \Lambda I_{0,+}^{1-\alpha} u)(x, t) - P_{i,n}^{obs}) \delta(x - i\Delta x) dx dt.$$

Compte tenu du paragraphe 4.1, on en déduit

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\Omega} \partial_u f \bar{\delta}u dx dt &= -2 \sum_{i,n} d_{i,n} \int_0^T \int_{\Omega} ((u + \Lambda I_{0,+}^{1-\alpha} u)(x, t) - P_{i,n}^{obs}) \delta(x - i\Delta x) \delta(t - n\Delta t) dx dt \\ &\quad - 2 \sum_{i,n} d_{i,n} \int_0^T \int_{\Omega} \frac{\Lambda}{\Gamma(1-\alpha)} (u(x, t) + \Lambda I_{0,+}^{1-\alpha} u(x, t) - P_{i,n}^{obs}) (t - n\Delta t)^{-\alpha} \delta(x - i\Delta x) dx dt. \end{aligned}$$

L'état adjoint ψ devra donc vérifier

$$\begin{aligned} A^* \psi - 2 \sum_{i,n} d_{i,n} ((u + \Lambda I_{0,+}^{1-\alpha} u)(x, t) - P_{i,n}^{obs}) \delta(x - i\Delta x) \delta(t - n\Delta t) \\ - 2 \Lambda \sum_{i,n} d_{i,n} ((u + \Lambda I_{0,+}^{1-\alpha} u)(x, t) - P_{i,n}^{obs})(x, t) \frac{(t - n\Delta t)^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} \delta(x - i\Delta x) = 0, \end{aligned}$$

où interviennent deux sommes. La première représente des termes ponctuels en espace et en temps, la seconde est faite de puissances du temps aux points d'observation.

Reste à déterminer A^* .

4.3 Problème variationnel et opérateur adjoint

L'opérateur A est de la forme

$$Au = \partial_t u + \Lambda \partial_t I_{0,+}^{\alpha} u - \partial_x (D \partial_x u) + \partial_x (vu),$$

et les conditions initiales et aux limites associées sont $u(x, t) = 0$, $D \partial_x u - vu = (0, t) = 0$ et $\partial_x u(1, t) = 0$. Donc, quand α varie de $\bar{\delta}\alpha$, la solution de (6) varie de $\bar{\delta}u$ qui vérifie le problème variationnel

$$A \bar{\delta}u + \bar{\delta}\alpha \Lambda B u = 0,$$

et les conditions initiales et aux limites $\bar{\delta}u(x, t) = 0$, $(D\partial_x\bar{\delta}u - v\bar{\delta}u)(0, t) = 0$ et $\partial_x\bar{\delta}u(1, t) = 0$ avec $Bu = \partial_\alpha(-\Lambda\partial_t I_{0,+}^\alpha u)$.

Compte tenu de la définition de l'intégrale fractionnelle, l'opérateur B est la somme de deux termes : l'un correspond à la dérivation du coefficient $\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)}$, l'autre à la dérivation de la puissance dans le noyau de convolution. On obtient

$$Bu = \Lambda \text{dig}(1 - \alpha) \partial_t I_{0,+}^\alpha u + \frac{\Lambda}{\Gamma(1 - \alpha)} \partial_t (t^{-\alpha} Ln(t) * u),$$

où la fonction digamma est définie par $\text{dig}(\beta) = \Gamma'(\beta)/\Gamma(\beta)$, avec $\text{dig}(z + 1) = -\gamma + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z}{k(z+k)}$ [6] (γ étant la constante d'Euler). De plus, en dérivant $t^{-\alpha}$ par rapport à α , on obtient la convolution de noyau $t^{-\alpha} Ln(t)$. La convolution se discrétise au moyen de la méthode des trapèzes [2].

L'adjoint dans $L^2([0, 1] \times [0, T])$ de $\partial_t I_{0,+}^{1-\alpha}$ est $-\partial_{t,T,-}^\alpha = -I_{T,-}^{1-\alpha} \partial_t$, donc pour celui de A on a

$$A^* \psi = -\partial_t \psi - \Lambda \partial_t I_{T,-}^{1-\alpha} - \partial_x (D\partial_x \psi) - \partial_x (v\psi)$$

avec $\psi(x, T) = 0$, $(D\partial_x \psi - v\psi)(1, t) = 0$ et $\partial_x \psi(0, t) = 0$.

5 Conclusions

Adapter à des données les valeurs des paramètres d'une e.d.p. utilise le gradient d'une fonctionnelle de la solution de cette dernière, dans l'espace de ces paramètres. La méthode de l'état adjoint, qui permet de calculer ce gradient, a été adaptée au cas d'une e.d.p. fractionnelle, en vue de la diffusion anormale et d'éventuels effets de mémoire.

Références

- [1] Bromly, M., Hinz, C. 2004 Non-Fickian transport in homogeneous unstaured repacked sand *Water Resour. Res.* **40** W0740,
- [2] Diethelm K, Ford, N.J., Freed, A.D., Luchko, Y. 2005 Algorithms for the fractional calculus : a selection of numerical methods *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.* **194** 543
- [3] Jury, W.A., Gardner W.R., Gardner W.H. 1991 Soil Physics, John Wiley, Hoboken, New-York
- [4] Gorenflo, R., Mainardi, F. *Fractional calculus : some basic problems in continuum and statistical mechanics* 291-348 *In Fractals and Fractional Calculus in Continuum Mechanics* (ed. A. Carpinteri et F. Mainardi) CISM courses and lectures 378, Springer Wien New-York,
- [5] Maryshev, B., Joelson, M., Lyubimov, D., Lyubimova, T., Néel, M.C. 2009 Non Fickian flux for advection-dispersion with immobile periods *J. Phys. A : Math. And Theor.* **42** 115001
- [6] Miller, K.S., Ross, B. 1993 An introduction to the fractional calculus and fractional differential equations, John Wiley and Sons, New-York
- [7] Néel, M. C, Zoia, A., Joelson, M. 2009 Mass transport subject to time-dependent flow with non-uniform sorption in porous media *Phys. Rev. E* **80** 056301, .
- [8] Samko, S.G., Kilbas, A.A., Marichev, O.I. 1993 Fractional integrals and derivatives : theory and applications Gordon and Breach, New York,
- [9] Sardin, M., Schweich, D., Leij, F.J., Van Genuchten, M.T. 1991 Modeling the nonequilibrium transport of linearly interacting solutes in porous media *Water Resour. Res.* **27** (9) 2287-2307
- [10] Schumer, R., Benson, D.A., Meerschaert, M .M., Bauemer, B. 2003 Fractal mobile/immobile solute transport *Water Resour. Res.* **39** (10) 1296
- [11] Sun, Ne-Zheng 1994 Inverse problems in groundwater modeling *Theory and applications of transport in porous media* **6** Kluwer Ac. publishers, Dordrecht, Boston, London
- [12] Van Genuchten, M.T., Wierenga, P.J. 1976 Mass transfer studies in sorbing porous media, I Analytical solutions *Soil. Sci. Soc. Am. J.* **33**(7) 473
- [13] Zhang, Y., Benson, D.A., Bauemer, B. 2008 Moment analysis for spatiotemporal fractional dispersion *Water Resour. Res.* **445** W05404