

Inversion du modèle MIM fractionnaire. Détermination des paramètres du modèle à partir de données

4.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons décrit un modèle de diffusion anormale et présenté quelques outils de simulation, c'est-à-dire que nous avons mis en forme le problème direct. Pour résoudre le problème direct, il faut disposer des paramètres du modèle, à savoir (D, v, Λ, γ) dans le cas de fMIM (ou (D, v, K, ω) dans le cas du MIM classique). Et on détermine l'évolution de la concentration $C(x, t)$ ou de la densité de probabilité $P(x, t)$ en tout point dans le milieu considéré. On parle alors de la simulation du phénomène de transport dans le milieu poreux. En d'autres termes, on peut simuler le transport dans un milieu poreux donné avec un modèle, à condition de disposer des valeurs des paramètres associés. Il faut noter que compte tenu du caractère "théorique" de ces paramètres, il est en général difficile, peut être même illusoire, d'espérer les obtenir directement à partir de mesures faites sur le milieu. Néanmoins, les concentrations et donc les densités de probabilité qui sont les sorties du modèle de transport restent mesurables à partir des expériences en laboratoire et en site naturel. En pratique, confronter un modèle avec des expériences nécessite de trouver les paramètres du modèle à partir de ces données expérimentales. Ensuite, il reste à vérifier que la solution du problème direct qui correspond à ces valeurs estimées de paramètres, représente convenablement les données. Si tel est le cas, on a vraiment deviné les bons paramètres.

Le chapitre III a présenté les propriétés des solutions du problème direct, ainsi que des méthodes pour les approcher. Le présent chapitre a pour objet

le problème inverse. Nous supposons donc que les densités de probabilité des particules de contaminant sont données à partir de résultats expérimentaux, et nous cherchons à retrouver les paramètres du modèle qui leur correspondent.

Quel que soit la méthode utilisée pour cela, il faut un critère quantitatif pour décider si un jeu de paramètres correspond ou non à un jeu de données. Le critère que nous choisissons est une fonction "objectif" mesurant l'écart entre les données et la densité de traceur calculée à partir du modèle et d'un jeu de paramètres à tester. Nous allons proposer une méthode, fondée sur des transformations intégrales appliquées directement aux données, et qui produit un ensemble \mathcal{C} de paramètres. Elle est inspirée de la méthode des moments temporels, employée [108] pour inverser le modèle MIM classique. Nous insisterons par conséquent sur l'élément qui correspond au minimum de la fonction objectif dans cet ensemble \mathcal{C} . La résolution du problème direct joue un rôle essentiel dans la seconde étape de cette démarche, puisqu'elle est la base du calcul de la fonction objectif.

Dans le présent chapitre, nous allons définir les transformations intégrales que nous comptons utiliser, et préciser le lien qui les unit aux paramètres de transport dans le cadre du fMIM, après avoir rappelé une méthode utilisée dans le même esprit pour le MIM. Ensuite, nous l'appliquerons à des données "synthétiques" calculées en résolvant le problème direct à partir de paramètres $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$ choisis arbitrairement. Cette étape a tout d'abord pour but d'illustrer notre démarche. Elle vise à préciser des circonstances dans lesquelles elle donne de moins bons résultats. Nous passerons enfin à de " vraies données".

4.2 Rappel d'une méthode utilisant des moments temporels dans le cadre du MIM

Plusieurs auteurs ont utilisé les moments des courbes de percée pour déterminer les paramètres d'un modèle de transport à partir d'expériences [50]. Plusieurs travaux ont décrit cette démarche, le cas des modèles ADE et MIM classique [26][46][50][90][92][108][109]. La méthode consiste à établir à partir de la transformée de Laplace de l'équation de transport des relations qui lient les paramètres du modèle aux moments temporels des courbes de percée. On en déduit un système d'équations algébriques dont la solution conduit aux valeurs des paramètres du modèle [90].

Pour obtenir ce système, nous supposons qu'en un certain nombre de points d'un milieu poreux unidimensionnel, l'évolution temporelle de la densité de probabilité $P(x_n, t)$ est connue. On est dans cette situation à la suite d'une série de mesures au cours d'une expérience en colonne de laboratoire où des particules de contaminant ont été préalablement injectées, pourvu que la concentration ait été mesurée tout au long de l'expérience, en quelques sections droites (de position x_i). Pour chacun de ces x_i , nous pouvons calculer la transformée de Laplace de la densité de probabilité correspondante avec la formule

$$\tilde{P}(x_i, s) = \int_0^{\infty} P^*(x_i, t) e^{-st} dt$$

où $P^*(x_i, t)$ est la densité mesurée. Par ailleurs, pour un domaine semi-infini $x \in [0, +\infty[$, on montre que la transformée de Laplace $\tilde{P}(x, s)$ du modèle de transport (3.2) [108][109] peut s'écrire sous la forme

$$\tilde{P}(x, s) = \frac{\tilde{R}(s)}{s} e^{-xf(s)} f(s), \quad (4.1)$$

où f représente une fonction qui contient les paramètres v , D , K et ω du modèle.

D'autre part, les moments temporels $m_n = \int_0^{+\infty} t^n P(x, t) dt$, lorsqu'ils sont finis, dont les dérivées de la transformée de Laplace $\tilde{P}(x, s)$ calculées en la valeur $s = 0+$ de la variable de Laplace. Il se trouve que cette transformée de Laplace est dérivable en $s = 0$, dans le cadre des modèles ADE et MIM classique.

Or, lorsque la transformée de Laplace de $P^*(x_i, t)$ est dérivable en $0+$, on a

$$m_n(x) = (-1)^n \frac{d^n}{ds^n} \tilde{P}(x, s) |_{s=0}. \quad (4.2)$$

Donc les dérivées (en $s = 0+$) de $\tilde{P}(x, s)$ sont liées aux dérivées $\frac{d^n}{ds^n} f |_{s=0}$ de la fonction f de (4.1) par des relations spécifiques au modèle, et qui font intervenir les paramètres. Pour le MIM classique, différents auteurs [41][59][92][108][109] ont utilisé avec succès cette approche pour estimer les paramètres (v, D, K, ω) .

En ce qui concerne le modèle MIM fractionnaire, la transformée de Laplace de ses solutions n'a plus ni limite finie ni a fortiori de dérivée finie en $s = 0+$. En d'autres termes, les moments ne sont plus finis. On peut cependant les remplacer par d'autres transformées intégrales des profils temporels de concentration ou de densité, et suivre une démarche analogue pour déterminer les paramètres du transport. Ces transformées intégrales sont en quelque sorte des moments tronqués, et finis. Nous allons montrer le lien qui les unit aux paramètres, sur la base de relations identiques à (4.1) et (4.2).

4.3 Méthode des moments temporels tronqués pour le modèle MIM fractionnaire

Dans le cadre de chacun des deux modèles (fMIM ou MIM), les dérivées de la transformée de Laplace des profils peuvent être déterminées directement à partir de ces derniers.

4.3.1 Moments temporels tronqués

Pour une solution $P(x, t)$ du modèle MIM fractionnaire (3.27) les intégrales notées m_n divergent à cause du comportement asymptotique en $\Lambda t^{-1-\gamma}$ de $P(x, t)$ décrit au paragraphe 3.3.3. Cependant, dans le cas du MIM classique comme dans celui de MIM fractionnaire, on obtient des intégrales convergentes en remplaçant $P(x, t)$ par $P(x, t)e^{-st}$ pour $s > 0$.

En partant de cette constatation, pour chaque valeur fixée de x et chaque $s > 0$, nous définissons le moment temporel tronqué d'ordre $n \geq 0$ par :

$$M_n(x, s) = \int_0^{+\infty} e^{-st} t^n P(x, t) dt. \quad (4.3)$$

Avec (4.3), nous considérons ainsi à la place du moment proprement dit, le moment d'ordre n de la fonction $P(x, t)$ tronquée par l'exponentielle e^{-st} . Pour $n = 0$, $M_0(x, s)$ n'est autre que la transformée de Laplace de $P(x, t)$, elle même

$$\tilde{P}(x, s) = \int_0^{+\infty} e^{-st} P(x, t) dt.$$

Par ailleurs, la convergence des intégrales ainsi obtenues par (4.3) est assurée par le fait que la fonction $P(x, t)$ est dominée asymptotiquement par l'exponentielle. De plus, dans ce cas, les moments tronqués $M_n(x, s)$ vérifient la relation suivante, similaire à (4.2)

$$M_n(x, s) = (-1)^n \frac{d^n}{ds^n} \tilde{P}(x, s). \quad (4.4)$$

L'ensemble des deux relations (4.3) et (4.4) montre que la donnée de la densité de probabilité $P(x, t)$ en fonction de t (qu'on peut obtenir expérimentalement à partir d'une courbe de percée $C(x, t)$ et de la teneur en eau θ) permet de calculer les moments tronqués $M_n(x, s)$ par intégration numérique de (4.3). On a ainsi accès directement aux dérivées $\frac{d^n}{ds^n} \tilde{P}(x, s)$, sans effectuer de dérivation numérique : on ne fera que des intégrations, c'est à dire des opérations régularisantes.

Cette démarche laisse espérer une certaine robustesse de l'implémentation numérique de notre méthode. De plus, pour chacun des deux modèles MIM

(MIM classique, ou fMIM), $\tilde{P}(x, s)$ a une expression relativement simple dans un milieu semi-infini. De plus, ses dérivées par rapport à s s'expriment sous la forme de fonctions assez bien connues de s et des paramètres du modèle. Ces fonctions s'expriment cependant différemment selon qu'on envisage l'une ou l'autre des deux versions du MIM. A l'instar de ce qui a été dit plus haut pour le modèle MIM classique et compte tenu de (4.4), ceci permet de relier les moments tronqués $M_n(x, s)$ aux paramètres du modèle, en vue de déterminer ces derniers. Dans la section suivante, nous établissons l'expression de $\tilde{P}(x, s)$ en fonction des paramètres en insistant sur le MIM fractionnaire.

4.3.2 Transformée de Laplace de $P(x, t)$ en milieu semi-infini pour les deux versions du modèle MIM

Il s'agit donc d'établir l'expression de la transformée de Laplace $\tilde{P}(x, s)$ d'une solution du fMIM pour représenter l'injection d'un traceur à l'entrée d'un milieu, dans le cadre de la première équation du système (3.2) qui s'applique à chacun des deux modèles MIM classique ou fractionnaire, on peut utiliser un terme source $r(x, t) = \delta(x)R(t)$. On peut aussi, de manière équivalente, remplacer le terme source par 0 et imposer en $x = 0$ un flux de traceurs égal à $R(t)$. En vertu de (3.26), ce flux

$$[-(\partial_x(DP_m) + vP_m)]_{x=0}. \quad (4.5)$$

On écrit la transformée de Laplace $\tilde{P}_m(x, s)$ de $P_m(x, t)$ de l'équation du modèle MIM fractionnaire (3.29) décrite dans le chapitre précédent. Nous obtenons la forme suivante :

$$D\partial_{x^2}\tilde{P}_m(x, s) - v\partial_x\tilde{P}_m(x, s) - s(1 + \tilde{\mathcal{M}}(s)) = 0. \quad (4.6)$$

La fonction $\tilde{\mathcal{M}}(s)$ est le symbole (en variables de Laplace) de l'opérateur qui détermine P_i à partir de P_m . Nous avons vu au chapitre précédent que cet opérateur est une convolution.

La solution $\tilde{P}_m(x, s)$ vérifie l'équation différentielle ordinaire (4.6) en $x > 0$, ainsi que la condition à la limite ($x = 0+$)

$$[-\partial_x(D\tilde{P}_m(x, s)) + v\tilde{P}_m(x, s)]_{x=0} = \tilde{R}(s).$$

Chaque solution de (4.6) est une combinaison linéaire de $e^{x\lambda_{\pm}(s)}$, avec

$$\lambda_{\pm}(s) = \frac{v}{2D} \pm \frac{\sqrt{\Delta}(s)}{2D}$$

et

$$\Delta(s) = v^2 + 4D(s + \mathcal{M}(s)).$$

Les solutions bornées dans un milieu semi-infini ($x \in \mathbb{R}^+$) ont une composante sur $e^{x\lambda_+(s)}$ qui est nulle, et sont donc de la forme

$$\tilde{P}_m(x, s) = \mathcal{A}e^{-f(s)x} \quad (4.7)$$

avec

$$\mathcal{A} = \frac{\tilde{R}(s)}{D\lambda_+(s)}. \quad (4.8)$$

On trouve ainsi l'équation (4.1) énoncée au paragraphe 4.2. Dans le cadre de chacune des deux versions du MIM la fonction $f(s)$ s'écrit :

$$f(s) = \sqrt{\left(\frac{v}{2D}\right)^2 + \frac{s(1 + \tilde{\mathcal{M}}(s))}{D}} - \frac{v}{2D}. \quad (4.9)$$

Pour le MIM fractionnaire, $\tilde{\mathcal{M}}(s) = \Lambda s^{1-\gamma}$ représente le symbole (en variable de Laplace) de l'intégrale fractionnaire $\Lambda I_{0,+}^{1-\gamma}$. Dans le cas du MIM classique c'est $\tilde{\mathcal{M}}(s) = \frac{K\omega}{\omega+s}$. Pour les deux modèles, les dérivées de f sont liées aux $M_n(x, s)$, donc à partir d'une expérience permettant de calculer ces derniers on peut déterminer les paramètres du transport. Ceux-ci, sont (D, v, Λ, γ) dans le cas du MIM fractionnaire et (D, v, K, ω) dans celui du MIM classique. Les liens entre les $M_n(x, s)$ et les dérivées de f sont d'autre part les mêmes pour les deux modèles. Par contre, une fois que les dérivées de $f(s)$ auront été calculées, l'extraction des paramètres prendra des formes différentes selon le modèle.

4.3.3 Lien entre $M_n(x, s)$ et les dérivées de f

Cette relation prend une forme particulièrement simple si l'on dispose de deux profils $P(x_1, t)$ et $P(x_2, t)$ enregistrés en deux points d'un milieu unidimensionnel. La relation (4.1) implique en effet

$$-(x_1 - x_2)f(s) = \ln \frac{\tilde{P}(x_2, s)}{\tilde{P}(x_1, s)}. \quad (4.10)$$

On en déduit le lien entre les dérivées de f et les $M_n(x, s)$ en remarquant que $M_0(x, s) = \tilde{P}(x, s)$ et que

$$\partial_s \ln \tilde{P}(x, s) = \frac{\partial_s \ln \tilde{P}(x, s)}{\tilde{P}(x, s)} = -\frac{M_1(x, s)}{M_0(x, s)}.$$

On a ainsi par de dérivations successives,

$$\partial_{s^2}^2 \ln \tilde{P}(x, s) = + \frac{\partial_{s^2}^2 \tilde{P}(x, s)}{\partial_{s^2}^2 \tilde{P}(x, s)} - \frac{(\partial_{s^2}^2 \ln \tilde{P}(x, s))^2}{\tilde{P}^2(x, s)} = \frac{M_2(x, s)}{M_0(x, s)} - \frac{M_1^2(x, s)}{M_0^2(x, s)}$$

$$\begin{aligned} \partial_{s^3}^3 \ln \tilde{P}(x, s) &= \frac{\partial_{s^3}^3 \tilde{P}(x, s)}{\tilde{P}(x, s)} - \frac{3(\partial_{s^2}^2 \tilde{P}(x, s) \partial_s \tilde{P}(x, s))}{\tilde{P}^2(x, s)} \\ &\quad - \frac{\partial_{s^2}^2 \tilde{P}(x, s) \partial_s \tilde{P}(x, s) 2(\partial_s \tilde{P}(x, s) \partial_s \tilde{P}(x, s))^3}{\tilde{P}^2(x, s) \tilde{P}^3(x, s)} \\ &= \frac{M_3(x, s)}{M_0(x, s)} - \frac{M_2 M_1(x, s)}{M_0^2(x, s)} + \frac{M_1^3(x, s)}{M_0^3(x, s)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \partial_{s^4}^4 \ln \tilde{P}(x, s) &= \frac{\partial_{s^4}^4 \tilde{P}(x, s)}{\tilde{P}(x, s)} - \frac{4(\partial_{s^3}^3 \tilde{P}(x, s) \partial_s \tilde{P}(x, s))}{\tilde{P}^2(x, s)} \\ &\quad - \frac{3(\partial_{s^2}^2 \tilde{P}(x, s))}{\tilde{P}^2(x, s)} + \frac{12(\partial_{s^2}^2 \tilde{P}(x, s) (\partial_s \tilde{P}(x, s))^2)}{\tilde{P}^3(x, s)} - \frac{6(\partial_s \tilde{P}(x, s))^4}{\tilde{P}^4(x, s)} \\ &= \frac{M_4(x, s)}{M_0(x, s)} - 4 \frac{M_3 M_1(x, s)}{M_0^2(x, s)} + 3 \left(\frac{M_2(x, s)}{M_0(x, s)} \right)^2 + 12 \frac{M_2 M_1^2(x, s)}{M_0^3(x, s)} - 6 \left(\frac{M_1^2(x, s)}{M_0(x, s)} \right)^4 \end{aligned}$$

On en déduit que

$$x \frac{df}{ds}(s) = \frac{M_1}{M_0}(x, s) - \frac{M_1}{M_0}(0, s) \quad (4.11a)$$

$$x \frac{d^2 f}{ds^2}(s) = - \left(\frac{M_2}{M_0}(x, s) - \left(\frac{M_1}{M_0} \right)^2(x, s) + \frac{M_2}{M_0}(0, s) - \left(\frac{M_1}{M_0}(0, s) \right)^2 \right) \quad (4.11b)$$

$$x \frac{d^3 f}{ds^3}(s) = \left(\frac{M_3}{M_0} + 3 \frac{M_2 M_1}{M_0^2} + 2 \left(\frac{M_1}{M_0} \right)^3 \right)(x, s) - \left(\frac{M_3}{M_0} + 3 \frac{M_2 M_1}{M_0^2} + 2 \left(\frac{M_1}{M_0} \right)^3 \right)(0, s) \quad (4.11c)$$

$$\begin{aligned} x \frac{d^4 f}{ds^4}(s) &= - \left(\frac{M_4}{M_0} - 4 \frac{M_3 M_1}{M_0^2} - 3 \left(\frac{M_2}{M_0} \right)^2 + 12 \frac{M_2 M_1^2}{M_0^3} - 6 \left(\frac{M_1}{M_0} \right)^4 \right)(x, s) \\ &\quad + \left(\frac{M_4}{M_0} - 4 \frac{M_3 M_1}{M_0^2} - 3 \left(\frac{M_2}{M_0} \right)^2 + 12 \frac{M_2 M_1^2}{M_0^3} - 6 \left(\frac{M_1}{M_0} \right)^4 \right)(0, s) \end{aligned} \quad (4.12)$$

Ces relations permettent de déterminer les dérivées $\frac{d^n f}{ds^n}$ de la fonction f , de manière exacte dans un milieu semi-infini. Dans un milieu fini ces relations sont seulement approchées

Il reste à en déduire les paramètres, compte tenu des expressions donnant ces dérivées en fonction de s . Ces dérivées font intervenir la fonction \mathcal{M} , qui

n'a pas la même forme selon la version du MIM à laquelle on s'adresse. Il n'est donc pas étonnant de devoir traiter à part le cas du MIM et le cas de fMIM pour cette étape.

4.3.4 Extraction des paramètres

Nous allons expliciter ce lien pour chacun de ces deux modèles.

4.3.4.a Cas du MIM fractionnaire

Compte tenu du fait que

$$X(s) = \sqrt{\left(\frac{v}{2D}\right)^2 + \frac{s + \Lambda s^\gamma}{D}} \quad \text{et} \quad f(s) \quad (4.13)$$

ont les mêmes dérivées, on en déduit que dans un milieu semi-infini

$$\frac{df}{ds}(s)X(s) = \frac{1}{2D} + \frac{\Lambda \gamma s^{\gamma-1}}{2D} \quad (4.14a)$$

$$\frac{d^2f}{ds^2}(s)X(s) + \left(\frac{df}{ds}\right)^2(s) = \frac{\Lambda \gamma (\gamma - 1) s^{\gamma-2}}{2D} \quad (4.14b)$$

$$\frac{d^3f}{ds^3}(s)X(s) + 3\frac{df}{ds}(s)\frac{d^2f}{ds^2}(s) = \frac{\Lambda \gamma (\gamma - 1)(\gamma - 2) s^{\gamma-3}}{2D} \quad (4.14c)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^4f}{ds^4}(s)X(s) + 4\frac{df}{ds}(s)\frac{d^3f}{ds^3}(s) + 3\left(\frac{d^2f}{ds^2}\right)^2(s) = \\ \frac{\Lambda \gamma (\gamma - 1)(\gamma - 2)(\gamma - 3) s^{\gamma-4}}{2D}. \end{aligned} \quad (4.14d)$$

On voit immédiatement que les relations (4.14) impliquent

$$\frac{\gamma - 2}{s} = \frac{d^3f}{ds^3}(s)X(s) + 3\frac{df}{ds}(s)\frac{d^2f}{ds^2}(s)\frac{d^2f}{ds^2}(s)X(s) + \left(\frac{d^3f}{ds^3}\right)^2(s) \quad (4.15)$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\gamma - 3}{s} = \frac{d^4f}{ds^4}(s)X(s) + 4\frac{df}{ds}(s)\frac{d^3f}{ds^3}(s) \\ + 3\left(\frac{df}{ds}\right)^2(s)\frac{d^3f}{ds^3}(s)X(s) + 3\frac{df}{ds}(s)\frac{d^2f}{ds^2}(s) \end{aligned} \quad (4.16)$$

et que γ disparaît de la différence. On en déduit

$$\mathbf{a}(s)X^2(s) + \mathbf{b}(s)X(s) + \mathbf{c}(s) = 0 \quad (4.17)$$

avec

$$\mathbf{a}(s) = \left(\frac{d^3 f}{ds^3}\right)^2(s) - \frac{d^2 f}{ds^2}(s) \frac{d^4 f}{ds^4}(s) - \frac{\frac{d^2 f}{ds^2}(s) \frac{d^3 f}{ds^3}(s)}{s} \quad (4.18)$$

$$\mathbf{b}(s) = 2 \frac{df}{ds}(s) \frac{d^2 f}{ds^2}(s) \frac{d^3 f}{ds^3}(s) - \left(\frac{df}{ds}\right)^2(s) \frac{d^4 f}{ds^4}(s) - 3 \left(\frac{d^2 f}{ds^2}\right)^2(s) - \frac{\left(\frac{df}{ds}\right)^2(s) \frac{d^3 f}{ds^3}(s) + 3 \frac{df}{ds}(s) \left(\frac{d^2 f}{ds^2}\right)^2(s)}{s} \quad (4.19)$$

$$\mathbf{c}(s) = 6 \left(\frac{df}{ds}\right)^2(s) \left(\frac{d^2 f}{ds^2}\right)^2(s) - \left(\frac{df}{ds}\right)^3(s) \frac{d^2 f}{ds^2}(s) s^{-1} = 0 \quad (4.20)$$

qui permet de déterminer $X(s)$. Ensuite on déduit γ de (4.15) et on obtient $\frac{1}{2D}$ et $\frac{1}{2D}$ en résolvant le système linéaire (4.14a)-(4.14b).

4.3.4.b Extraction des paramètres dans le cas du MIM classique

En posant cette fois-ci $X(s) = \sqrt{\left(\frac{v}{2D}\right)^2 + \frac{1}{D}\left(s + \frac{Ks}{1+\Omega s}\right)}$ et $\Omega = \frac{1}{\omega}$, on a

$$\frac{df}{ds}(s)X(s) = \frac{1}{2D} \left(1 + \frac{K}{(1 + \Omega s)^2}\right) \quad (4.21a)$$

$$\frac{d^2 f}{ds^2}(s)X(s) + \left(\frac{df}{ds}\right)^2(s) = -\frac{K\Omega}{D(1 + \Omega s)^3} \quad (4.21b)$$

$$\frac{d^3 f}{ds^3}(s)X(s) + 3 \frac{df}{ds}(s) \frac{d^2 f}{ds^2}(s) = 3 \frac{K\Omega^2}{D(1 + \Omega s)^4} \quad (4.21c)$$

$$\frac{d^4 f}{ds^4}(s)X(s) + 4 \frac{df}{ds}(s) \frac{d^3 f}{ds^3}(s) + 3 \left(\frac{d^2 f}{ds^2}\right)^2(s) = -12 \frac{K\Omega^3}{D(1 + \Omega s)^5} \quad (4.21d)$$

qui impliquent tout d'abord

$$\mathbf{a}'(s)X^2(s) + \mathbf{b}'(s)X(s) + \mathbf{c}'(s) = 0 \quad (4.22)$$

avec

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}'(s) &= \left(4\left(\frac{d^3 f}{ds^3}\right)^2(s) - 3\frac{d^2 f}{ds^2}(s)\frac{d^4 f}{ds^4}(s) \right) \\
\mathbf{b}'(s) &= \left(12\frac{df}{ds}(s)\frac{d^2 f}{ds^2}(s)\frac{d^3 f}{ds^3}(s) - 3\left(\frac{df}{ds}\right)^2(s)\frac{d^4 f}{ds^4}(s) - 9\left(\frac{df^2}{ds^2}\right)^3(s) \right) \\
\mathbf{c}'(s) &= 27\left(\frac{df}{ds}\right)^2(s)\left(\frac{d^2 f}{ds^2}\right)^2(s) - 12\left(\frac{df}{ds}\right)^3(s)\frac{d^3 f}{ds^3}(s) = 0
\end{aligned}$$

qu'on déduit de (4.21b)-(4.21c). Ensuite on obtient Ω par

$$\Omega + s = -3\frac{X(s)\frac{d^2 f}{ds^2}(s) + \left(\frac{df}{ds}\right)^2(s)}{X(s)\frac{d^3 f}{ds^3}(s) + 3\frac{df}{ds}(s)\left(\frac{d^2 f}{ds^2}\right)^2(s)} \quad (4.23)$$

puis $\frac{1}{D}$ et $\frac{K}{D}$ qu'on déduit de (4.21a et 4.21b).

4.3.5 Procédure pour estimer les paramètres du MIM ou fMIM à partir de 2 courbes de concentration

Pour chacun de ces deux modèles, la fonction f est liée aux 4 paramètres (D, v, Λ, γ) ou (D, v, K, ω) . On la détermine exactement dans un milieu semi-infini, seulement de manière approchée dans un milieu fini. Ensuite, les paramètres peuvent être déterminés en optimisant la distance entre le graphe approché de f et celui de la fonction $s \mapsto \sqrt{\left(\frac{v}{2D}\right) + \tilde{\mathcal{M}}} - \frac{v}{2D}$. Une autre façon de procéder utilise les dérivées de f (ou leurs approximations) pour les valeurs de s (sauf en 0), mais elle a cependant pour inconvénient d'aboutir à plusieurs estimations.

4.3.8.a Choix d'une méthode

Une estimation convenable pour minimiser l'erreur consisterait à trouver le minimum de la norme de l'écart entre les valeurs mesurées et les valeurs estimées de la fonction f sous la forme :

$$\mathcal{E} = \sum_{i=1}^4 \int_{s_{min}}^{s_{max}} \left(\frac{d^n f(s)}{ds^n} - f^{(n)} \right)^2(s) dt$$

où la fonction $\frac{d^n f(s)}{ds^n}$ a été déterminée numériquement à partir des courbes de percée et des relations (4.11) et (4.12), tandis que les fonctions $f^{(n)}$ sont calculées à partir des paramètres estimés, et des relations (4.14) dans le cas du fMIM, (4.21) dans le cas du MIM.

En appliquant cette méthode à des données numériques (et pas d'origine expérimentale) nous avons constaté que le choix de s_{min} et s_{max} influence

son résultat. Un intervalle trop petit donne une estimation pour les paramètres, cependant elle peut s'avérer très différente des "vrais" paramètres, surtout lorsque $\frac{v^2}{D}$ est grand. Ceci s'explique d'après l'allure que prend la fonction $s \mapsto \sqrt{\frac{v}{2D} + \mathcal{M}(s)} - \frac{v}{2D}$ dans ces conditions : on a $F(s) = \frac{v}{2D}(\sqrt{1 + \frac{4D}{v^2}\mathcal{M}(s)} - 1)$ avec $\frac{4D}{v^2}\mathcal{M}(s) = \frac{4D}{v^2}(s + \frac{\omega s}{1+\omega s})$ dans le cas du MIM et $\frac{4D}{v^2}\mathcal{M}(s) = \frac{4D}{v^2}(s + \frac{Ks}{1+Ks^\gamma})$ dans le cas du fMIM. Dans ces deux cas la fonction F se "raidit" et se rapproche d'une forme droite lorsque $\frac{4D}{v^2}$ devient petit, et l'estimation des paramètres devient plus difficile.

Le lien entre les $M_n(x, s)$ et les dérivées de f , elles mêmes liées aux paramètres du MIM, permet au contraire de traiter chaque valeur de s séparément. On n'a pas besoin de se restreindre a priori à un sous intervalle de \mathbb{R}^+ . On devra par contre ensuite trier les nombreuses estimations que produit cette démarche. A priori, pour des profils correspondant à des solutions exactes du MIM, dans un milieu vraiment semi-infini, on s'attend à ce que toutes les valeurs de s conduisent à une même estimation des paramètres du transport. Il n'en est rien : on obtient toute une courbe d'estimations. Pour l'équation de Fokker-Planck fractionnaire avec $v = 0$ (et seulement deux paramètres à estimer) Lukashchuk [63] a rencontré la même difficulté, dans un contexte différent et sur la base d'essais d'inversion réalisés à partir de solutions analytiques.

Nous avons préféré la seconde solution (celle qui utilise les $M_n(x_i, s)$) parce qu'elle n'implique pas de choisir a priori de travailler avec un sous ensemble de valeurs de s . Le choix de la meilleure estimation est fait a posteriori, sur la base d'un traitement exhaustif des informations disponibles. Pour chaque s dans \mathbb{R}^+ , nous allons ainsi déterminer les $\frac{d^n f}{ds^n}(s)$ à partir des moments tronqués. La solution de (4.17) dans le cas de MIM fractionnaire conduira à une estimation $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s)$ des paramètres. Dans le cas du MIM classique la solution de (4.22) conduira à une estimation $(D^{(e)}, v^{(e)}, K^{(e)}, \omega^{(e)})(s)$. Il faudra ensuite choisir la meilleure de ces estimations.

Précisons le détail de la mise en oeuvre de ce programme dans le cas du MIM fractionnaire.

4.3.5.b Procédure de mise en oeuvre de la méthode des moments tronqués

Supposons disposer de données $P^*(x, t)$ recueillies dans un milieu où le transport de soluté correspond au modèle MIM fractionnel, avec des paramètres $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$ uniformes. Cependant nous ne connaissons pas ces $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$, et nous souhaitons les déterminer. Pour cela nous appliquerons successivement

les étapes suivantes. Pour chaque $s > 0$:

- Les dérivées $\frac{df^n}{ds^n}(s)$ sont obtenues à partir des moments tronqués en x_1 et x_2 , eux mêmes déterminés à partir des $P^*(x, t)$ par intégration numérique.
- Pour chaque $s > 0$ tel que l'équation du second degré (4.17) ait une solution positive conduisant à (γ, D, Λ) dans $]0, 1] \times \mathbb{R}$, on obtient $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s)$ à l'aide de (4.14) et (4.15). Reste à déterminer parmi les $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s)$, qui forment une courbe \mathcal{C} de \mathbb{R} , la meilleure estimation de $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$.
- Pour cela, on résoud (4.6) sur la base de paramètres égaux à $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s)$ et de la donnée d'entrée $R(t)$: on obtient la solution $P_{(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s)}(x, t)$ de (4.6). Il reste à la comparer avec les données $P^*(x_i, t)$. Pour cela on peut utiliser la norme $L^2([0, T])$ en chacun des x_i en posant $\|u\|^2 = \sum_{i=1}^2 \|u(x_i, t)\|_{L^2[0, T]}^2$, et définir une erreur relative E selon $E = \|P^* - P\|/\|P^*\|$.

La valeur s_m de s correspondant au minimum de E sur \mathcal{C} donne pour $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$ l'estimation $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)$ qui permet le mieux de reproduire les données sur la base de notre méthode. Cette procédure et ce critère objectif ont été appliqués à des données numériques afin de tester cette démarche.

4.3.6 Expérience numérique

Nous l'avons tout d'abord appliquée à des solutions de l'équation (3.29) obtenues numériquement et correspondant à un intervalle de temps plutôt long. Ensuite nous avons examiné ce que deviennent les estimations lorsqu'on les applique à des profils perturbés de diverses façons.

La procédure ci-dessus a été appliquée à des solutions $P^*(x, t)$ de (4.6) pour $x \in [0, 1]$, correspondant à des paramètres $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$ arbitrairement fixés. La condition $\frac{\partial P^*}{\partial x}(x, t) = 0$ a été imposée en sortie, le flux $\rho_0 1_{[0, t_0]}(t)$ a été imposé à l'entrée, et les moments ont été déterminés en approchant \mathbb{R}^+ par $[0, 30t_0]$. La procédure a d'abord été appliquée aux $P^*(x, t)$ elles mêmes, ensuite ces solutions ont été modifiées afin de simuler diverses erreurs de mesure et leurs conséquences.

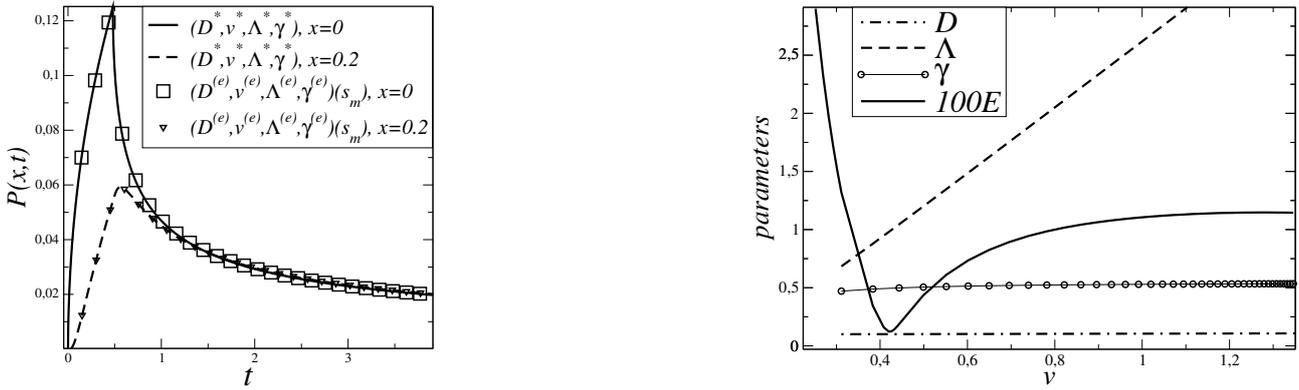


FIGURE 4.1 – Paramètres estimés et profils temporels qui en sont issus. A gauche, les courbes représentées par des lignes correspondent à $P^*(x_i, t)$ pour des paramètres initiaux $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*) = (0.1, 0.5, 1.2, 0.5)$. A droite : paramètres estimés $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})$ à partir des profils temporels $P^*(x_i, t)$ représentés à gauche par des courbes. A gauche, les symboles représentent les profils temporels calculés à partir des estimations associées au minimum de E . De plus, les positions des profils utilisés pour l'estimation sont $x = 0$ et $x = 0.2$.

4.3.6.a Mise en oeuvre numérique de l'estimation sans ajout de bruit

Chaque test pratiqué sur les profils temporels $P^*(x, t)$ avec un nombre de Peclet $\frac{v^*}{D^*}$ plus grand que 1 donne un résultat sous forme de paramètres $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s)$ avec $s \in \mathbb{R}^+$. Pour des nombres de Peclet $\frac{v^*}{D^*} \geq 5$ avec $\gamma^* \leq 0,97$, un sous ensemble de \mathcal{C} montre des valeurs de l'erreur relative E inférieures à $5/100$, et même à $1/100$ pour le point $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)$. Bien que les profils $P_{(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)}$ ne puissent être distingués des $P^*(x, t)$ sur les figures 4.1 et 4.2, les paramètres estimés $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)$ réalisent une approximation plus ou moins précise des "vrais" paramètres $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$. Plus précisément, au cours de nombreux essais avec $\gamma^* \leq 0.8$, nous avons obtenu les paramètres γ, v, Λ et D avec une précision relative de $2/100, 5/100, 13/100, 15/100$ respectivement, comme l'indique la table 4.1.

Les valeurs de γ^* supérieures à 0.8 rendent en général les choses plus difficiles. On peut le voir avec l'exemple illustré par la figure 4.2. Signalons que les figures 4.1 et 4.2 montrent des profils bien différents : dans le premier cas, le signal reste intense sur toute la durée de l'observation. Dans le second cas, il est rapidement très faible. La première situation donne une courbe $(s, \gamma^{(e)}(s))$ très proche de (s, γ^*) . Lorsque le signal est faible aux grands temps, au contraire, on obtient des estimations $\gamma^{(e)}(s)$ pouvant être proches de 0 et loin de γ^* . Avec des données "synthétiques" le minimum de E est marqué et ces valeurs sont immédiatement

D^*	v^*	Λ^*	γ	E_m	$\frac{D^{(e)}(s_m) - D^*}{D^*}$	$\frac{v^{(e)}(s_m) - v^*}{v^*}$	$\frac{\Lambda^{(e)}(s_m) - \Lambda^*}{\Lambda^*}$	$\frac{\gamma^{(e)}(s_m) - \gamma^*}{\gamma^*}$
0.1	0.5	1.2	0.5	3/1000	< 1/100	10/100	15/100	< 1/100
0.1	0.5	1.2	0.6	1/1000	4/100	5/100	5/100	< 1/100
10^{-3}	0.46	0.89	0.4	1.5/1000	1/100	1/100	1/100	2/100
10^{-3}	0.46	0.84	0.5	9/1000	< 1/100	< 2/100	2/100	2/100
10^{-3}	1	1	0.4	10/1000	2/100	1/100	1/100	2/100
10^{-3}	0.46	0.84	0.91	7/1000	7/100	5/100	5/100	< 1/100
10^{-3}	0.46	0.84	0.65	6/1000	1/100	3/100	6/100	2/100
0.1	0.5	1	0.9	16/1000	17/100	14/100	30/100	2/100

TABLE 4.1 – Minimum E_m de E et erreurs relatives sur l'estimation des paramètres, à partir de données numériques.

disqualifiées.

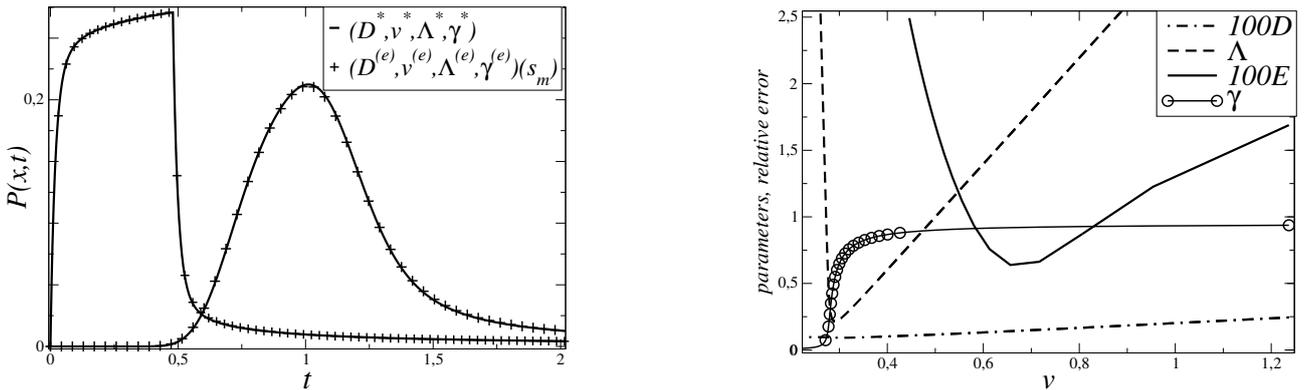


FIGURE 4.2 – Les paramètres initiaux $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*) = (0.001, 0.46, 0.84, 0.89)$. A gauche, les profils temporels correspondant $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$ et $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)$. A droite, paramètres estimés et erreur relative de E .

Il se trouve que de nombreux quadruplets (D, v, Λ, γ) donnent presque les mêmes profils sur des intervalles de temps finis. Dans le cas de l'exemple représenté sur la figure 4.2, de nombreuses estimations donnent des profils impossibles à distinguer à l'oeil nu, aux temps finis. Cependant ces différentes estimations montrent des valeurs de $\gamma^{(e)}(s)$ suffisamment différentes pour correspondre à des comportements asymptotiques visiblement différents (mais les différences ne sont pas énormes). Les profils représentés par la figure 3.9 du chapitre 3 pour illustrer le comportement asymptotique des solutions du MIM fractionnaire, correspondent l'un aux paramètres $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)$, l'autre aux paramètres $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$ de la figure 4.2. La méthode exposée ici ne permet

donc pas, à elle seule, d'estimer les paramètres avec une grande précision. Pour améliorer cette précision, nous l'utilisons comme point de départ d'une méthode d'optimisation qui détermine un chemin (dans l'espace des paramètres) à l'aide du calcul du gradient de E^2 sur le principe de l'état adjoint [71][88][104]. Cette autre méthode a besoin d'une première estimation pour atteindre une grande efficacité. En l'absence d'un point de départ relativement proche des "vrais" paramètres, elle peut ne donner aucun résultat. Par contre, lorsqu'elle fonctionne dans les conditions de la présente expérience numérique, en partant de $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)$ elle trouve $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$ avec une erreur relative inférieure à 1/100.

Afin de faciliter l'interprétation de données expérimentales, nous avons étudié ce que devient notre méthode d'inversion lorsque les erreurs de mesure polluent les données. Pour cela, nous avons tout d'abord ajouté un bruit blanc gaussien aux $P^*(x, t)$. Ensuite nous avons examiné ce que deviennent les estimations lorsqu'on est obligé de tronquer les données parce que le bruit devient comparable au signal.

4.3.6.b Mise en oeuvre numérique de l'estimation avec ajout du bruit

Nous testons ici notre méthode avec des données fabriquées à partir des profils temporels $P^*(x, t)$, utilisés au paragraphe précédent.

Pour évaluer comment le bruit dégrade l'estimation des paramètres, nous avons ajouté à chaque $P^*(x, t)$ des réalisations aléatoires indépendantes de ηB où B représente un bruit blanc gaussien de variance $\sigma = 10^{-5}$. Ici η est un coefficient que nous faisons varier pour simuler des bruits d'amplitudes variées. Pour un bruit d'amplitude faible (comparée aux données), notre méthode donne des résultats qui n'ont pas beaucoup changé. Les figures 4.3 et 4.4 montrent qu'on commence à observer des changements significatifs lorsque le rapport signal sur bruit descend aux environs de 10. Avec un bruit de niveau constant, ceci se produit lorsque le signal faiblit, c'est à dire au niveau de la traînée des courbes de percée. Pour l'exemple de la figure 4.1 ceci se produit avec $\eta = 100$ mais dans le cas de la figure 4.2 qui montre des traînées plus faibles ceci se produit beaucoup plus tôt avec des valeurs de η beaucoup plus faibles. Ce bruit réalisant un rapport signal sur bruit de 10 transforme la courbe \mathcal{C} en plusieurs petites courbes qui se chevauchent les unes des autres, comme l'illustre la figure 4.4.

Cette analyse cesse d'être pertinente avec des profils montrant des traînées moins épaisses, comme ceux représentés sur la figure 4.2. Pour ces profils, le

signal devient comparable au bruit de mesure pour des valeurs de η beaucoup petites.

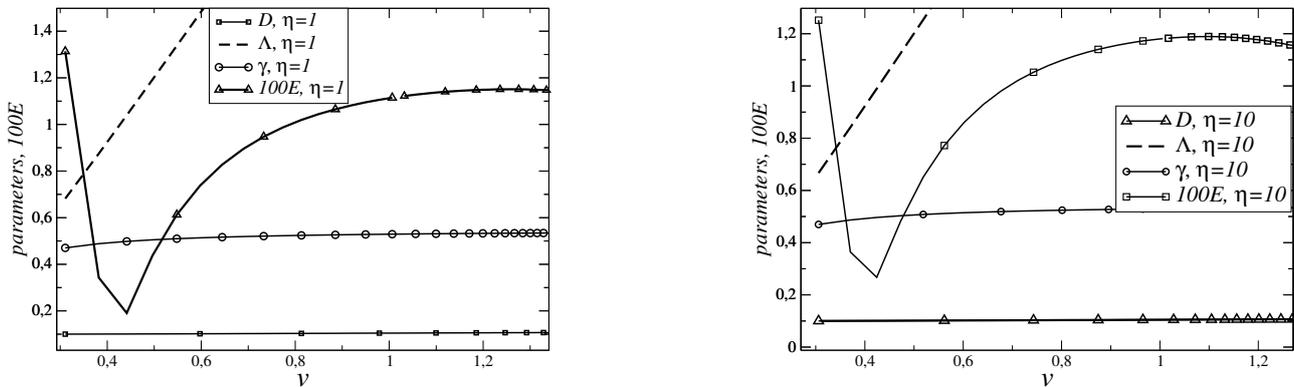


FIGURE 4.3 – Effet d'un bruit gaussien artificiel d'amplitude très faible devant le signal. Les vrais paramètres sont $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*) = (0.1, 0.5, 1.2, 0.5)$ et l'estimation a été effectuée en ajoutant ηB à P^* , avec $\eta = 1$ à gauche et $\eta = 10$ à droite. Les paramètres estimés et les valeurs de E diffèrent peu de ce que montre la partie droite de la figure.

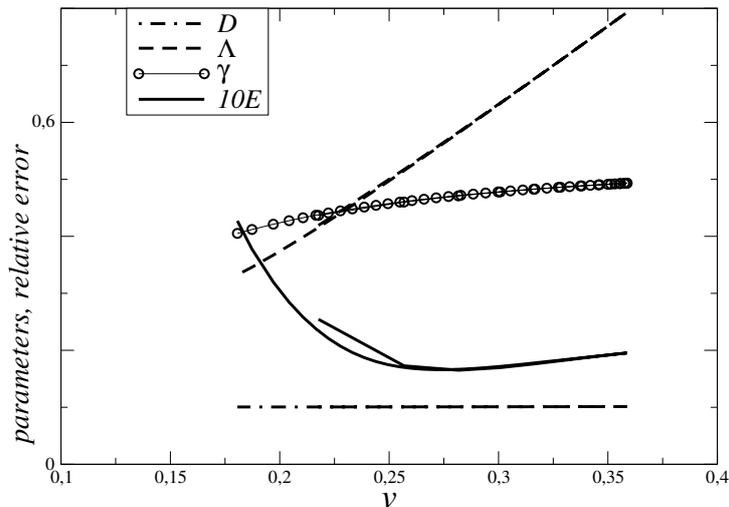


FIGURE 4.4 – Effet d'un bruit gaussien artificiel réalisant un rapport signal sur bruit de l'ordre de 10 (avec $\eta = 100$) pour de "vrais" paramètres égaux à $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*) = (0.1, 0.5, 1.2, 0.5)$. L'allure générale de la courbe \mathcal{C} ressemble encore à ce qu'on obtient sans bruit. Cependant, les estimations des 4 paramètres couvrent des plages réduites qui ne contiennent pas toutes les vraies valeurs. La courbe \mathcal{C} est en quelque sorte repliée en plusieurs courbes plus petites qui se recouvrent partiellement. Ceci se voit nettement sur la représentation de l'erreur E . On voit aussi que Λ est représenté par au moins deux traits superposés, comme D et γ .

4.3.7 Mise en oeuvre numérique avec des données tronquées

Souvent, le bruit n'est pas gaussien, souvent aussi son amplitude est vite comparable aux données, comme dans l'exemple qui vient d'être évoqué. Ceci

correspond à des profils montrant un pic assez net, séparé de la traînée, alors que celle-ci est difficile à utiliser justement parce qu'elle correspond à un signal faible. C'est le cas pour des profils comme ceux des figures 4.2 et 4.5, qui, de ce point de vue, sont bien différents de celui de la figure 4.1.

Pour avoir une idée de ce qu'on peut espérer de données tronquées environ à deux fois la largeur du pic, nous avons appliqué notre méthode d'inversion à $1_{[0,t_c]}P^*(x_i, t)$ au lieu de $P^*(x_i, t)$. Avec $t_c = 6$ (pour $t_0 = 0.48$) (voir figure 4.6) nous avons obtenu pour la courbe \mathcal{C} une allure très voisine de celles correspondant aux plus grandes valeurs.

Cependant le minimum de E est peu net, bien qu'il donne une estimation $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)$ proche de $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$. En tronquant les données un peu plus tôt, on obtient encore une estimation précise (voir figure 4.7). Cependant elle est portée par une branche beaucoup plus petite. En tronquant les données encore plus tôt, cette branche disparaît et est remplacée par une nouvelle, avec des valeurs de γ supérieures à 1. Le minimum de E est réalisé par une autre branche, portant des valeurs négatives de Λ , mais γ^* est très mal estimé. Cependant, les valeurs de $(D^{(e)}(s), v^{(e)}(s))$ varient très peu tant que E n'est pas trop loin de son minimum, ce qui fait que D^* et v^* sont assez bien estimés.

En faisant partir de $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)$ un processus d'optimisation, on améliore considérablement l'estimation de $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$. Avec de vraies données expérimentales, on est souvent conduit à les tronquer comme nous venons de le faire.

4.3.8 Application à des données expérimentales

Nous avons appliqué cette méthode à des courbes de percée issues d'une expérience de traçage en milieu poreux insaturé.

4.3.8.a Principe de l'expérience

Les données ont été recueillies dans une colonne de sable insaturé soumise à des conditions stationnaires, en termes de vitesse de Darcy et de teneur en eau. Après injection de traceur, des courbes de percée ont été enregistrées en plusieurs sections droites de la colonne, par spectrographie X . Cette technique de mesure, utilisant deux longueurs d'onde différentes, permet de mesurer la teneur en eau et la concentration en traceur. On utilise pour cela la loi de Beer Lambert qui lie l'atténuation du faisceau de rayon X et la concentration. Ces

longueurs d'onde ont été choisies en adéquation avec la nature du sable, du matériau constituant la colonne, et du traceur. Les données obtenues à l'entrée de la colonne et un peu plus loin sont représentées par des symboles sur la figure 4.7.

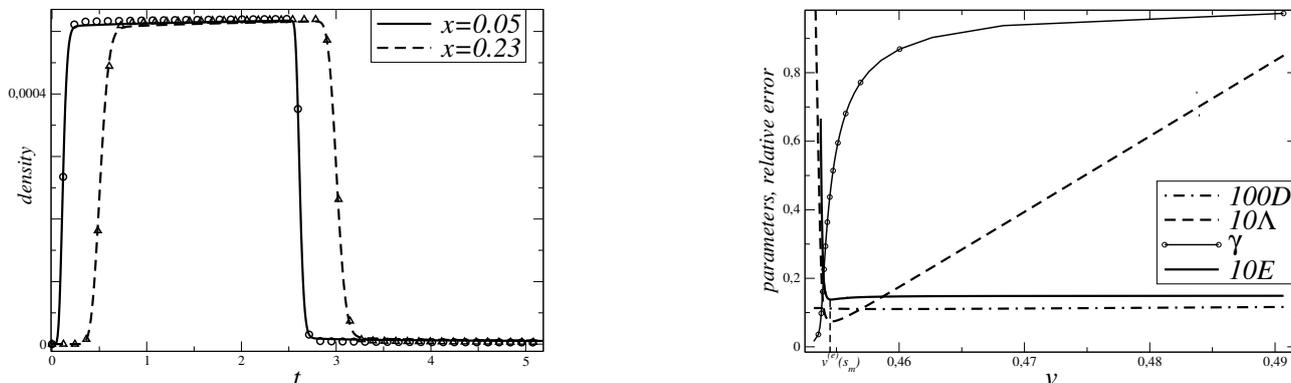


FIGURE 4.5 – Estimation des paramètres, appliqués à des données numériques tronquées à $t = t_c$. A gauche : solution du MIM fractionnaire obtenu pour $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*) = (0.001, 0.46, 0.01, 0.4)$ (lignes), ainsi que $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})$ (symboles). A droite : paramètres estimés à partir de $1_{[0, t_c]}(t)$, et valeurs de E pour $t_c = 6$, c'est à dire un peu plus que la durée du pic représentée à gauche.

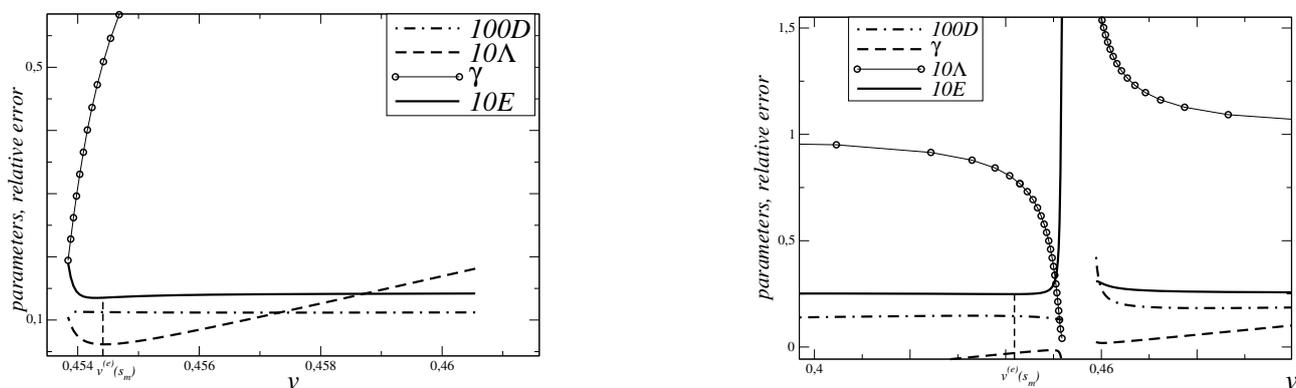


FIGURE 4.6 – Paramètres estimés à partir des données de la figure (précédente) en les tronquant à $t_c = 5$ à gauche, à $t_c = 4$ à droite. A gauche, $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)$ représente encore une approximation de $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$. A droite, avec une troncature plus sévère, seul $(D^{(e)}, v^{(e)})(s_m)$ approche (D^*, v^*) , $(\gamma^{(e)})(s_m) = 0.42$ correspond à une erreur relative de $10/100$, et $(\Lambda^{(e)})(s_m)$ est négatif.

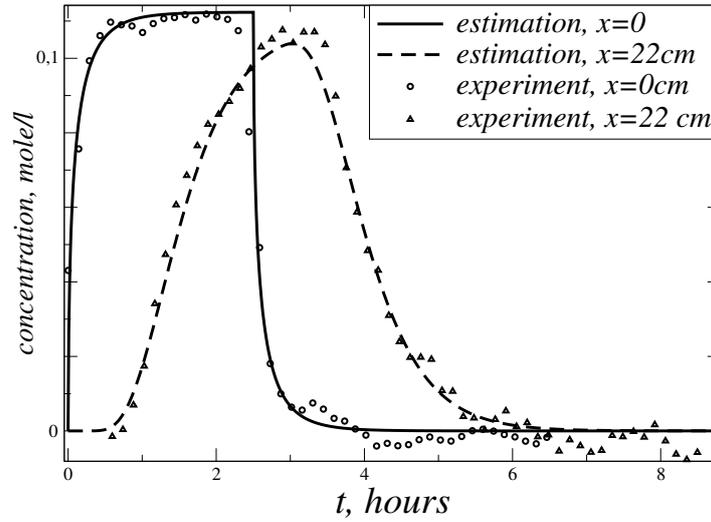


FIGURE 4.7 – Solutions du modèle (3.29) correspondant aux paramètres estimés à partir des courbes de percée expérimentales. Les traits représentent ces solutions, les données correspondent aux symboles

4.3.8.b Estimation des paramètres du transport

La densité P de traceur est liée à la concentration C par la relation $P(x, t) = \theta C(x, t)$, où $\theta(x)$ représente la teneur en eau de la section droite d'abscisse x . Ceci permet de déterminer les profils $P^*(x_i, t)$ avec $i = 1, 2$ à partir desquels on estime les paramètres $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$. Or, les mesures de la concentration font apparaître des valeurs négatives, forcément liées aux erreurs de mesure. Nous les avons remplacées par la valeur "zéro". De plus, leur apparition dans la traînée indique que le niveau de bruit devient comparable au signal et qu'il convient de tronquer ces données comme au paragraphe 4.3.7. On prend pour t_c le plus petit instant correspondant à une valeur négative de la concentration, dans la traînée. En effet, les valeurs négatives apparaissent aussi pour $x = 22cm$, un peu avant l'arrivée du pic de concentration. La méthode d'inversion, appliquée aux données représentées sur la figure 4.7 donne deux ensembles d'estimations, avec des valeurs de $\gamma^{(e)}(s)$ inférieures ou non à 1. Le premier ensemble correspond à des erreurs relatives trop importantes (environ 0.5), donc on l'écarte. D'autre part, toutes les estimations composant \mathcal{C} correspondent à de très petites valeurs de $\Lambda^{(e)}(s)$, positives ou non. Et le paragraphe 4.3.7 nous a montré que dans ce cas, la valeur de γ a très peu d'influence sur les profils de densité. Nous avons par conséquent calculé E sur la base de $(D^{(e)}(s), v^{(e)}(s), \Lambda^{(e)}(s), \min(1, \gamma^{(e)}(s)))$, pour obtenir des valeurs très

voisines, à partir d'un grand nombre d'estimations, donnant pour E un minimum égal 0.075 et très peu marqué. De plus, les estimations donnant des valeurs de E proches de ce minimum correspondent toutes à des $(D^{(e)}(s), v^{(e)}(s))$ presque égaux à $(25.05\text{cm}^2/h, 14.83\text{cm}/h)$. Les profils déterminés à partir de $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \min(1, \gamma^{(e)}))(s_m)$ sont représentés par des lignes sur la figure 4.7. La vitesse de pore $v^{(e)}(s_m)$ ainsi déterminée est tout à fait compatible avec la vitesse de flux $V = 2.51\text{cm}/h$ mesurée dans l'expérience, compte tenu de l'hypothèse $V = \theta_m v$ communément appliquée [98], θ_m représentant la teneur en eau mobile. L'optimisation, appliquée en partant de $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, 0.5)(s_m)$ donne $D = 22.3\text{cm}^2/h, \Lambda = 8 \times 10^{-4}, v = 15.1\text{cm}/h, \gamma = 0.43$ avec la même valeur pour E [71]. Donc, à part pour le paramètre γ , la méthode des moments est assez compétitive.

4.4 Conclusion

La transformée de Laplace fournit des outils permettant d'inverser les équations différentielles fractionnaires sur la base de données représentant les profils temporels. Nous avons présenté pour le fMIM une méthode d'inversion qui devine les paramètres en utilisant une expression analytique du taux d'accroissement de $\ln \tilde{P}(x, s)$ par rapport à x , en fonction de s . Cependant, cette expression est exacte dans des conditions idéales seulement. La méthode d'inversion donne un ensemble de jeux de 4 paramètres à partir des données. En les introduisant dans la version discrète du fMIM on obtient une solution numérique dont l'écart avec ces données indique si les profils calculés numériquement à partir de ces paramètres représentent bien les données, ou non. Le minimum de cet écart représente un critère objectif pour choisir un jeu de paramètres parmi tous les résultats de l'inversion. Ce jeu estime les vrais paramètres d'une expérience numérique, mais avec une précision insuffisante lorsque γ est voisin de 1. La précision est par contre tout à fait convenable pour initialiser une méthode de gradient, qui est toujours plus performante pour trouver le paramètre γ .

Chapitre 5

Conclusion et perspectives

Le MIM est un modèle très intéressant pour le transport de soluté en milieu poreux, parce que la matière solide donne aux particules de fluide, et de soluté, des occasions d'être arrêtées. Ceci équivaut à supposer que les mouvements des particules de fluide comme de traceur peuvent être décrits, à petite échelle, par des marches au hasard faites de déplacements aléatoires gaussiens, interrompus par des arrêts de durées aléatoires. La version classique du MIM suppose une cinétique d'ordre 1 pour les échanges entre les fractions mobiles et immobiles de soluté. Ceci équivaut à supposer des arrêts dont la durée possède une moyenne finie. Nous avons mis l'accent sur une version récente de MIM, qui suppose des arrêts dont la durée suit une statistique de Lévy, de moyenne infinie. Ceci équivaut à imposer que les échanges entre les fractions mobiles et immobiles sont régis par une convolution dont le noyau est une puissance. Une telle convolution n'est autre qu'une intégrale fractionnaire et ceci correspond à la version fractionnaire du MIM. L'équation d'advection dispersion, c'est à dire le mouvement Brownien combiné à l'advection, est un cas particulier de ce modèle. Comme dans ce cas particulier, le MIM fractionnel a deux grilles de lecture : une équation aux dérivées partielles et un processus stochastique. Nous avons tiré parti de cette dualité qui permet au moins d'être sûr de la qualité des approximations numériques utilisées, sous la forme de marche au hasard ou de discrétisation de l'e.d.p (équation aux dérivées partielles).

Ce point est important, dans la mesure où on s'adresse à des modèles innovants. L'aspect " modèle stochastique " est très riche car il permet d'accéder aux distributions des déplacements des particules entre deux instants donnés. Il permet aussi de décrire des statistiques plus complexes comme celles qui correspondent aux positions des particules en plusieurs instants. Ce point de vue devient important lorsqu'il s'agit d'interpréter une expérience de résonance magnétique nucléaire, par exemple. Dans ce travail, nous avons plutôt concentré toute notre

attention sur l'évolution de la densité de particules. Elle peut être entièrement décrite à l'aide de l'équation aux dérivées partielles d'ordre fractionnaire qu'on appelle MIM fractionnaire, et son interprétation en termes de processus de transport a essentiellement servi à contrôler les simulations. D'ailleurs la formulation en termes d'équation aux dérivées partielles est plus souple lorsqu'on doit représenter un milieu dont les paramètres du transport dépendent de la position, au lieu d'être à la fois uniformes et constants.

La discrétisation de l'e.d.p. fractionnaire a servi de base pour tester une méthode d'inversion du MIM fractionnaire. Cette méthode devine les 4 paramètres du modèle, à partir de deux courbes de percée. Sa précision n'est pas optimale, cependant elle est très appropriée pour servir de base à des méthodes qui se trouvent être plus précises, à condition d'être appliquées dans un voisinage des paramètres cherchés. De plus, la méthode proposée est justifiée lorsque les paramètres du transport sont à la fois uniformes et constants. Donc éventuellement, il faut veiller à ne l'appliquer que dans un sous domaine où ces conditions peuvent être réalisées.

Le modèle fractionnaire étudié a vocation à représenter le transport de traceurs pouvant être immobilisés, puis relâchés. Nous avons en vue les milieux poreux, à cause de la matrice solide. Cependant il est utilisé pour les écoulements dans des rivières à cause de la zone hyporhéique. On devrait ainsi pouvoir l'utiliser pour représenter des écoulements dans des géométries complexes [112], ou pour représenter éventuellement le mouvement d'organismes vivants dans un environnement plus général.

D'autre part les deux versions du modèle MIM supposent des déplacements dispersifs possédant une variance finie. Dans des milieux complexes, on doit s'attendre à ce que cette hypothèse ne soit pas toujours vérifiée. Il en est de même pour les déplacements d'insectes ou d'autres animaux dans l'environnement naturel.
