

**UNIVERSITE DE STRASBOURG-CNRS**  
**Laboratoire d'Hydrologie et de Géochimie de Strasbourg**  
**(LHyGeS - UMR 7517)**

**THESE**

Présentée en vue de l'obtention du grade de

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITE DE STRASBOURG**

Discipline : Sciences de la Terre et de l'Environnement

Spécialité : Mécanique des fluides

Par

**Hassane FAHS**

**IDENTIFICATION DES PARAMETRES PAR APPROCHE  
INVERSE POUR LA SIMULATION DE L'HYDRODYNAMIQUE  
EN MILIEUX FRACTURES**

Soutenue le 26 Avril 2010 devant le jury constitué de :

MM.	Ph. ACKERER	Directeur de thèse
	M. CARA	Rapporteur interne
	R. YOUNES	Rapporteur externe
	J. ERHEL	Rapporteur externe
	F. DELAY	Examineur



# SOMMARIE

<b>Introduction</b>		<b>5</b>
<hr/>		
<b>Chapitre 1</b>		<b>8</b>
<hr/>		
Modélisation des Milieux Poreux Fracturés		
<b>1. Introduction</b>		8
<b>2. Caractéristiques du milieu poreux saturé</b>		8
2.1. Porosité		9
2.2. Perméabilité		9
<b>3. Equation de l'écoulement en milieu poreux saturé</b>		9
3.1. La loi de Darcy		10
3.2. L'équation de continuité		11
3.3. Conditions initiales et conditions aux limites		13
3.3.1. <i>Conditions de Dirichlet</i>		13
3.3.2. <i>Conditions de Neumann</i>		14
<b>4. Caractéristiques du milieu fracturé</b>		14
<b>5. Modélisation d'un milieu fracturé</b>		15
5.1. Modèle discrète (Non - Homogeneous model NH)		15
5.2. Modèle Equivalent Continuum (EC)		16
5.3. Modèle Double Porosité (DP)		17
<b>6. Conclusion</b>		20
<hr/>		
<b>Chapitre 2</b>		<b>21</b>
<hr/>		
Résolution du problème direct avec la méthode des Éléments Finis Mixtes		
<b>1. Introduction</b>		21
<b>2. Modèle mathématique</b>		21
<b>3. Résolution du problème direct</b>		23
3.1. La méthode des éléments finis mixtes (EFM)		24
<b>4. La méthode des EFMH pour l'écoulement en milieu fracturé</b>		26
4.1. L'espace de Raviart-Thomas		26
4.2. Discrétisation de la loi de Darcy		28
4.3. Discrétisation de l'équation de continuité		29
4.4. Discrétisation temporelle		30

4.5.	Système final	32
<b>5.</b>	<b>Oscillations non physiques avec la méthode des EFMH</b>	34
5.1.	Présentation du schéma de condensation de la masse (EFMHC)	35
<b>6.</b>	<b>Le code de calcul (Ecoulement – Double –Milieu: EDM)</b>	38
<b>7.</b>	<b>Validation du code EDM</b>	41
7.1.	En terme de précision	41
	7.1.1. <i>Comparaison avec la méthode des EFMH</i>	41
	7.1.2. <i>Comparaison entre EDM et l'approche de séparation d'opérateur (OS)</i>	46
7.2.	En terme d'efficacité	49
<b>8.</b>	<b>Conclusion</b>	49
<b>Chapitre 3</b>		<b>50</b>

## Résolution du problème inverse

<b>1. Généralité</b>	50
<b>2. Technique de résolution du problème inverse</b>	51
2.1. Méthodes inverses directes	52
2.2. Méthodes inverses indirectes	52
2.2.1 <i>Méthodes déterministes et méthodes bayésiennes</i>	53
2.2.2 <i>Méthodes linéaires et méthodes non - linéaires</i>	54
<b>3. Optimisation des paramètres avec les méthodes non-linéaires</b>	55
3.1. Minimisation de la fonction objectif	57
3.1.1. <i>Méthodes globales et méthodes locales</i>	58
3.2. Méthodes à directions de descente	58
3.2.1. <i>Algorithme du gradient (steepest Descent method)</i>	60
3.2.2. <i>Algorithme du gradient conjugué</i>	61
3.2.3. <i>Algorithme de Newton</i>	61
3.2.4. <i>Algorithme de Quasi – Newton</i>	62
3.2.5. <i>Algorithme de Gauss - Newton</i>	64
3.2.6. <i>Algorithme de Marquardt - Levenberg</i>	65
<b>4. Calcul des gradients de la fonction objectif</b>	66
4.1. Méthode des différences finies	66
4.2. Méthode des sensibilités	66
<b>5. Le modèle numérique INV_EDM : estimation des paramètres en double milieu</b>	67
5.1. La fonction objectif	67
5.2. Les paramètres à estimer	68
5.3. Calcul du gradient (Milieu Homogène)	68
5.4. Calcul du gradient (Milieu Hétérogène : 2 zones)	72

5.5. La matrice Jacobienne	82
<b>6. L’algorithme du code INV_EDM</b>	<b>83</b>
<b>7. Expériences numériques</b>	<b>86</b>
7.1. Convergence en fonction des paramètres initiaux	86
<b>8. Conclusion</b>	<b>89</b>
<b>Chapitre 4</b>	<b>90</b>

---

## Paramétrisation et indicateur de raffinement

<b>1. Introduction</b>	<b>90</b>
<b>2. Formulation du problème inverse</b>	<b>91</b>
2.1 Information à priori	91
2.2 Paramétrisation	91
<b>3. Méthode de Paramétrisation</b>	<b>92</b>
3.1 Paramétrisation par interpolation	92
3.2 Paramétrisation par la procédure multi-échelle	92
3.3 Paramétrisation par zonation	93
<b>4. Indicateurs de raffinement</b>	<b>94</b>
4.1 Technique de résolution avec les indicateurs de raffinement	94
4.2 Calcul des indicateurs de raffinement	97
<b>5. Méthode des états adjoints</b>	<b>99</b>
5.1 Calcul mathématique	99
<b>6. Algorithmes</b>	<b>104</b>
6.1 Maillage et types des indicateurs	104
6.2 Algorithme EDM_PARAM	106
<b>7. Résultats numériques</b>	<b>107</b>
<b>8. Application sur un cas réel «Site Expérimental Hydrogéologique de Poitiers »</b>	<b>107</b>
8.1 Présentation du site avec le modèle EDM_PARAM	107
8.2 Simulation du site « SEH » avec le modèle EDM_PARAM	111
8.2.1 <i>Discrétisation spatiale et temporelle</i>	111
8.2.2 <i>Estimation des paramètres</i>	113
8.3 Simulation avec les données de l’année 2005	125

<b>9. Discussion des résultats</b>	<b>127</b>
9.1 Comparaison entre les résultats du modèle EDM_PARAM et ceux d'Ackerer and Delay 2009	132
9.1.1 Conductivité :	132
9.1.1 Coefficient d'emmagasinement:	133
<b>9. Conclusion</b>	<b>134</b>
<b>Conclusion Générale</b>	<b><u>134</u></b>
<b>Annexe</b>	<b><u>137</u></b>
<b>Bibliographie</b>	<b><u>188</u></b>
<b>Liste des figures</b>	<b><u>198</u></b>
<b>Liste des tableaux</b>	<b><u>201</u></b>



## Introduction

Le problème de l'écoulement de fluides à travers les milieux poreux se pose dans de nombreuses activités industrielles et environnementales comme l'extraction de pétrole ou de gaz présents dans le sous-sol, le stockage de déchets radioactifs ou non, le génie chimique, ...

Certains de ces milieux sont constitués d'une matrice poreuse et de fractures. Ces fractures peuvent jouer un rôle hydraulique en contribuant de manière considérable à la capacité des sous-sols à transporter l'eau et les polluants. Le système des fractures admet une petite capacité de stockage et une grande conductivité, alors que la majorité du fluide se trouve dans des matrices ayant une conductivité faible comparée à celle des fractures.

Les milieux fracturés naturels étant difficile d'accès, la modélisation constitue, en tant du point de vue technique qu'économique, l'outil le mieux adapté à la compréhension de l'hydrodynamique dans ces milieux. Plusieurs modèles ont été développés pour prendre en compte les fractures dans les milieux poreux. Le modèle double porosité (DP) (Barenblatt et al, 1960 ; Warren et Root, 1963) est l'un des modèles le plus utilisé. Il consiste à simuler les milieux fracturés d'une manière continue en utilisant des porosités et perméabilités différentes pour la matrice et les fractures avec un terme de couplage entre ces deux compartiments. Ce modèle fait appel à des paramètres physiques (conductivité et emmagasinement) et non physiques (coefficient d'échange fracture/matrice). Dans le cas général, ces paramètres sont déterminés à partir de mesures de la variable d'état (pressions dans les matrices et les fissures) à l'aide d'un modèle analytique simplifié (Delay and Porel, 2003; Delay et al, 2007 ; Kaczmaryk and Delay, 2007<sup>a,b</sup>, Kaczmaryk, 2008).

L'objectif de ce travail est le développement d'un modèle numérique robuste permettant de décrire le milieu avec toute son hétérogénéité en 2 dimensions et d'identification les paramètres du modèle par approche inverse.

Une difficulté pratique de l'identification des paramètres est qu'elle nécessite souvent une bonne connaissance du problème direct, ce qui se traduit par le recours à une grande variété de notions tant physiques que mathématiques. Le problème inverse est souvent reformulé comme un problème de minimisation d'une fonctionnelle d'erreur entre les mesures réelles et les observations. La procédure d'estimation des paramètres se constitue des étapes suivantes :

- Résolution du problème direct.
- Définition d'une fonction à minimiser.
- Minimisation de la fonction objectif par un algorithme robuste et efficace.

La première partie de ce travail est consacrée à la résolution du problème direct. Le modèle mathématique résultant de la modélisation du milieu fracturé avec le modèle DP se base sur la loi de Darcy et la conservation de masse. Pour la résolution de ce modèle, nous adoptons la méthode des Eléments Finis Mixtes Hybrides (EFMH) (Chavent and Roberts, 1991). Cette méthode permet de réduire le problème à la résolution d'un système linéaire dont la matrice associée est symétrique, définie positive. Dans ce travail, nous allons utiliser une technique de condensation pour le schéma EFMH développée par Younes et al. (2006). Cette technique permet d'éviter les oscillations non-physiques des EFMH.

Dans la deuxième partie de ce travail, nous nous intéressons à la définition d'une fonction à minimiser ainsi qu'aux algorithmes de minimisation. Il s'agit d'une fonction quadratique définie par la différence entre les observations mesurées et celles calculées par le problème direct. Pour résoudre le problème de minimisation, nous avons utilisé une *méthode locale* qui actualise un point du domaine en exploitant uniquement l'information fournie par le calcul de la fonction objectif et de son gradient. L'algorithme de minimisation, basé sur le principe des directions de descentes, est celui de Marquardt – Levenberg (ML). Cet algorithme nécessite le calcul du gradient de la fonction objectif qui peut être assuré par trois méthodes : perturbations, sensibilités et états adjoints. La méthode des sensibilités est retenue car elle permet le calcul exact du gradient et de la matrice Jacobienne associée.

La troisième partie de ce travail porte sur la paramétrisation. Une des difficultés essentielles de la résolution du problème inverse provient du faible nombre de mesures disponibles (coût élevé des mesures expérimentales), et tout à fait insuffisant pour pouvoir espérer estimer les valeurs de paramètres par maille de calcul. Il est donc nécessaire de choisir une paramétrisation qui puisse tenir compte de la quantité des mesures disponibles. Si le nombre de paramètres est très grand par

rapport au nombre de mesures, alors le problème sera mal posé et s'il est trop petit, alors le modèle ne pourra pas restituer correctement les observations. Parmi les différentes méthodes de paramétrisation, on peut citer : la paramétrisation par interpolation, multi-échelle et par zonation. A cause de sa simplicité, on s'intéresse à la paramétrisation par zonation (Cooly, 1977) qui consiste à subdiviser le domaine étudié en plusieurs zones considérées comme homogène.

La méthode de zonation introduit une difficulté supplémentaire qui est l'identification des frontières entre les zones. Pour se faire, nous utilisons la technique des indicateurs de raffinement introduite par Chavent et Bissel (1998). L'idée de cette technique est d'ajouter ou d'éliminer progressivement un ou plusieurs degrés de liberté (zones) qui sont sélectionnés suivant des indicateurs de raffinement. Ces indicateurs permettent d'identifier les frontières permettant une diminution importante de la fonction objectif. Les indicateurs sont définis par la somme (pour chaque zone) des gradients (par maille) de la fonction objectif. Sachant que le calcul des gradients par maille avec la méthode de sensibilité est très coûteux en temps calcul, nous allons utiliser dans ce travail la méthode des états adjoints (Chavent, 1991). Le principal avantage de cette méthode est la possibilité de réaliser le calcul des gradients (par maille) à un coût proportionnel à celui d'une seule équation linéarisée, et en particulier, *indépendant* du nombre de paramètres.

Le modèle numérique et la méthode d'identification développés dans ce travail seront testés sur quelques cas numériques et sur un cas réel (le Site Expérimental Hydrogéologique « SEH » de Poitiers).



# Chapitre 1

## Modélisation des Milieux Poreux Fracturés

- 1. Introduction**
- 2. Caractéristiques du milieu poreux saturé**
  - 2.1. Porosité
  - 2.2. Perméabilité
- 3. Equation de l'écoulement en milieu poreux saturé**
  - 3.1. La loi de Darcy
  - 3.2. L'équation de continuité
  - 3.3. Conditions initiales et conditions aux limites
    - 3.3.1. *Conditions de Dirichlet*
    - 3.3.2. *Conditions de Neumann*
- 4. Caractéristiques du milieu fracturé**
- 5. Modélisation d'un milieu fracturé**
  - 5.1. Modèle discrète (Non - Homogeneous model NH)
  - 5.2. Modèle Equivalent Continuum (EC)
  - 5.3. Modèle Double Porosité (DP)
- 6. Conclusion**

### 1. Introduction

Dans ce premier chapitre, nous allons décrire les modèles mathématiques utilisés pour la modélisation de l'écoulement en milieu poreux et/ou fracturé. Ces modèles se réfèrent généralement à l'hydrodynamique d'une nappe souterraine. L'hydrodynamique est décrite par un système d'équations aux dérivées partielles composé par la loi de Darcy et l'équation de continuité. Dans un premier temps nous allons rappeler les caractéristiques des milieux poreux saturés et les modèles d'écoulement dans ces milieux. Dans un second temps nous allons développer les caractéristiques d'un milieu fracturé ainsi que les différentes approches de modélisation.

### 2. Caractéristiques du milieu poreux saturé

En général, un volume de matériau poreux est naturellement occupé par trois phases. La phase solide est constituée principalement d'éléments minéraux et au sein de ces matériaux, l'eau et l'air sont les principales phases (liquide et gazeuse) présentes. Les pores sont les espaces qui ne sont pas occupés par les constituants solides.

## 2.1. Porosité

La porosité totale d'un matériau représente la densité des pores pouvant être occupé par un fluide liquide au gazeux. Elle est exprimée par le rapport du volume des vides au volume total occupé par l'échantillon:

$$\omega = \frac{\text{Volume des vides}}{\text{Volume total de l'échantillon}} \quad (1.1)$$

En milieu saturé en eau, la phase gazeuse est totalement absente. La proportion maximale en eau du matériau est donc égale à la porosité totale de ce matériau.

## 2.2. Perméabilité

La perméabilité d'une roche caractérise l'aptitude de cette roche à laisser circuler un fluide sous l'effet d'un gradient de charge. Ce paramètre est relié à la dimension et la connexion des pores entre eux. Des pores clos et non connectés empêchent le fluide de s'écouler librement d'un pore à un autre. L'ouverture des pores peut plus ou moins favoriser l'écoulement entre les éléments de la roche. La perméabilité est aussi reliée à la viscosité du fluide qui est la mesure de sa résistance à l'écoulement. La perméabilité intrinsèque s'exprime, indépendamment des caractéristiques du fluide sous la forme:

$$k = \frac{Q\mu}{A(\Delta p / \Delta s)} \quad (1.2)$$

où

$Q$  : le débit du fluide qui s'écoule,  $[L^3T^{-1}]$ ;

$\mu$  : la viscosité dynamique du fluide,  $[ML^{-1}T^{-1}]$ ;

$A$  : l'aire de la section traversée par le fluide,  $[L^2]$ ;

$\Delta p / \Delta s$  : la variation de la charge par l'unité de longueur,  $[ML^{-2}T^{-2}]$ ;

## 3. Equation de l'écoulement en milieu poreux saturé

La dynamique de l'eau en milieu poreux saturé est régie par deux équations principales qui sont la loi de Darcy et l'équation de continuité.

### 3.1. La loi de Darcy

L'eau souterraine s'écoule des niveaux d'énergie élevée vers les niveaux d'énergie plus faible. Cette énergie est essentiellement le résultat de l'altitude et de la pression. La loi de Darcy en milieu poreux exprime la vitesse de filtration en régime permanent ou transitoire en fonction du gradient de pression et de la gravité. Pour un fluide compressible, la loi de Darcy s'écrit sous la forme générale (Bear, 1979):

$$u = -\frac{k}{\mu}(\nabla p + \rho g \nabla z) \quad (1.3)$$

où

$u$  : le vecteur vitesse de Darcy,  $[LT^{-1}]$ ;

$\mu$  : la viscosité dynamique du fluide,  $[ML^{-1}T^{-1}]$ ;

$k$  : la perméabilité intrinsèque du milieu,  $[L^2]$ ;

$p$  : la pression,  $[ML^{-1}T^{-2}]$ ;

$\rho$  : la masse volumique,  $[ML^{-3}]$ ;

$g$  : l'accélération de la pesanteur,  $[LT^{-2}]$ ;

$z$  : la cote définie selon un axe vertical ascendant,  $[L]$ ;

En négligeant la variation spatiale de la masse volumique, la loi de Darcy se simplifie de la façon suivante:

$$u = -\frac{k\rho g}{\mu} \nabla \left( \frac{p}{\rho g} + z \right) = -K \nabla h \quad (1.4)$$

où

$h = \frac{p}{\rho g} + z$  représente le potentiel hydraulique ou la charge piézométrique,  $[L]$ ;

$K = \frac{k\rho g}{\mu}$  est le coefficient de conductivité hydraulique ou de perméabilité,  $[LT^{-1}]$ ;

Le coefficient de perméabilité  $K$ , ou encore la perméabilité intrinsèque  $k$ , sont des coefficients scalaires si le milieu poreux est isotrope ou si l'écoulement est unidirectionnel. Quand le milieu dans l'espace à trois dimensions est anisotrope, le coefficient de conductivité hydraulique est défini par un tenseur symétrique de la forme:

$$K = \begin{bmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{xy} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{xz} & K_{yz} & K_{zz} \end{bmatrix} \quad (1.5)$$

En se plaçant dans le repère de coordonnées dont les axes sont les directions pour lesquelles l'écoulement est effectivement parallèle au gradient de charge, le tenseur de conductivité se réduit à ses composantes diagonales:

$$K = \begin{bmatrix} K_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & K_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & K_{zz} \end{bmatrix} \quad (1.6)$$

En pratique, deux perméabilités sont distinguées: une perméabilité verticale  $K_{zz}$  et une autre horizontale  $K_{xx} = K_{yy}$  (de Marsily, 1981)

### 3.2. L'équation de continuité

L'équation de continuité exprime le principe de conservation de la masse d'un fluide en mouvement. Dans un volume élémentaire, la masse du fluide prélevé ou injecté est égale à la somme de la variation de la masse du fluide durant un intervalle de temps élémentaire et des flux massiques traversant la surface de ce volume (Bear, 1979).

$$\frac{\partial(\omega\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = \rho f \quad (1.7)$$

où  $f$  représente le terme puits/source par unité de volume,  $[T^{-1}]$ .

Si le milieu poreux est indéformable, la porosité  $\omega$  est indépendante du temps. En négligeant la présence du polluant dans le domaine, autrement dit, si l'on ne considère que la partie hydrodynamique, la masse volumique  $\rho$  ne dépend que de la pression  $p$  pour une température constante.

$$\frac{\partial(\omega\rho)}{\partial t} = \frac{\partial(\omega\rho)}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{s}{g} \frac{\partial p}{\partial t} \quad (1.8)$$

où  $s = g \frac{\partial(\omega\rho)}{\partial p}$ ,  $[L^{-1}]$  est le coefficient d'emmagasinement spécifique qui représente la capacité du milieu poreux à libérer du fluide sous l'effet d'une augmentation de la pression.

En introduisant cette dernière expression dans l'équation (1.7), on obtient une forme de l'équation de continuité en fonction de la pression. Si l'on admet que la variation spatiale de la masse volumique est négligeable, en simplifiant par  $\rho$ , l'équation de continuité devient:

$$\frac{s}{\rho g} \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u} = f \quad (1.9)$$

La forme la plus courante de l'équation de continuité est une expression liant la variation temporelle de la charge et la variation spatiale de la vitesse de Darcy. La relation entre la charge et la pression est donnée par

$$p = \rho g (h - z) \quad (1.10)$$

soit,

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} &= g (h - z) \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho g \frac{\partial h}{\partial t} = \\ &((h - z)s/\omega) \frac{\partial p}{\partial t} + \rho g \frac{\partial h}{\partial t} \end{aligned} \quad (1.11)$$

d'où

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \left( \frac{1}{1 - (h - z)s/\omega} \right) \rho g \frac{\partial h}{\partial t} \quad (1.12)$$

Dans la plupart des cas, la quantité  $(h - z)s/\omega$  est négligeable devant 1 d'où

$$\frac{\partial p}{\partial t} \approx \rho g \frac{\partial h}{\partial t} \quad (1.13)$$

En remplaçant la relation (1.13) dans l'équation (1.9), l'équation de bilan de masse pour un fluide incompressible dans un milieu poreux indéformable s'écrit sous la forme générale:

$$s \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot u = f \quad (1.14)$$

### 3.3. Conditions initiales et conditions aux limites

En plus de l'équation de continuité (1.14) et la loi de Darcy (1.4) qui décrivent l'écoulement transitoire d'un fluide à travers un domaine donné, il faut spécifier d'autres caractéristiques qui expriment l'état initial ( $t=0$ ) et les conditions aux limites.

Plusieurs types de conditions aux limites peuvent être considérés:

#### 3.3.1. Conditions de Dirichlet

Dans ce cas, la charge est imposée sur les frontières concernées :

$$h(x, t) = h^D(x, t) \quad (1.15)$$

où  $h^D$  est une fonction connue.

Les conditions à charge imposée peuvent être par exemple : contact de la nappe avec une rivière, une ligne de source, etc.

#### 3.3.2. Conditions de Neumann

Ces conditions imposent le flux normal à la frontière. Elles s'expriment par :

$$u.n = -K \frac{\partial h}{\partial n} = q^N(x,t) \quad (1.16)$$

où  $n$  est la normale unitaire à la limite et  $q^N$  une fonction connue.

Une limite à flux imposé peut être: un prélèvement ou injection à travers les frontières, un flux nul au long d'une limite imperméable, etc.

#### 4. Caractéristiques du milieu fracturé

La notion des milieux fracturés se base sur l'existence des fissures influençant l'écoulement des fluides à travers ces milieux (Figure 1.1). Un milieu poreux fracturé est imaginé comme un système interconnecté des fissures divisant le milieu dans une série de blocs poreux, appelé « matrice poreuse» (figure 1.2). Les caractéristiques d'écoulement d'un milieu fracturé dépendent du degré de fracturation, de la connectivité du réseau de fractures, et de la distribution des valeurs de la porosité et de la perméabilité dans les matrices poreuses et les fractures. Les matrices poreuses favorisent le stockage du fluide alors que les fractures forment les chemins de circulation préférentielle des fluides.

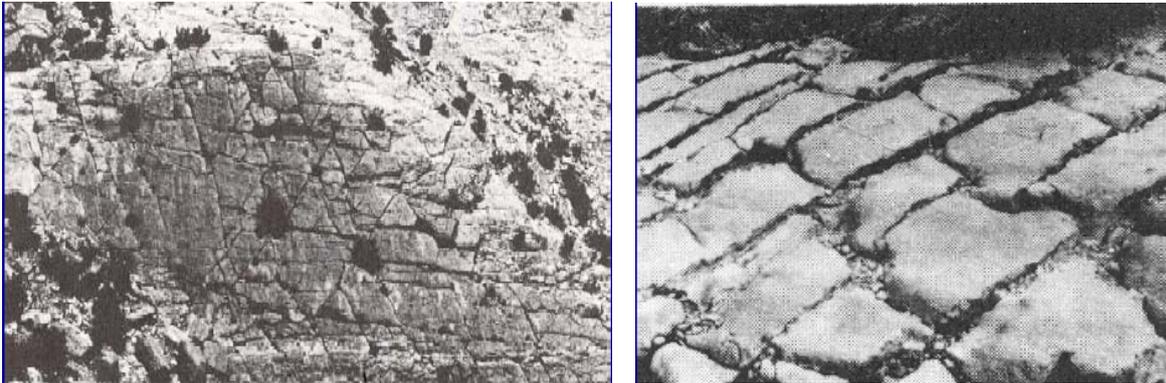


Figure 1.1: Milieux poreux naturels et fracturés.

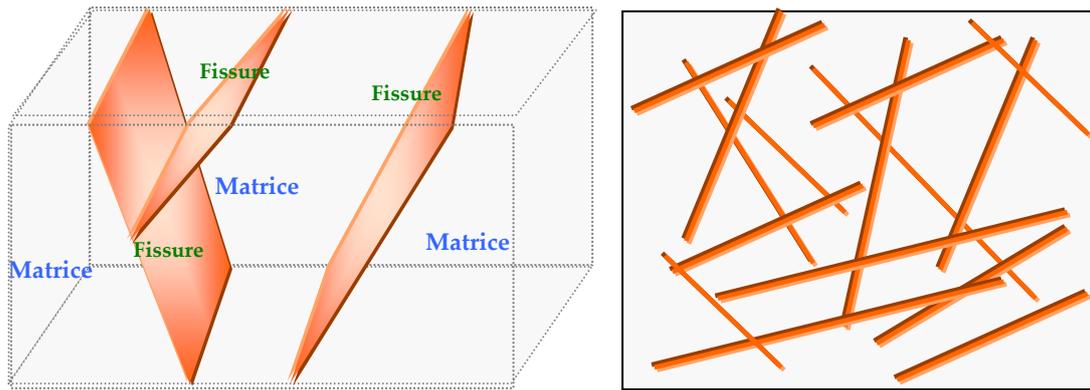


Figure 1.2: Milieux fracturés 3D / 2D modèles

## 5. Modélisation d'un milieu fracturé

Du point de vue conceptuel, plusieurs modèles peuvent être adoptés pour étudier l'écoulement en milieux fracturés. Ces modèles sont basés sur la loi de Darcy (Bear et Verruijt, 1987 ; Pruess et Narashiman, 1985 ; Duguid et Lee, 1977, Wilson et Witherspoon, 1970). La sélection d'un modèle dépend des résultats finals requis, de la géométrie et de l'échelle du milieu fracturé, des informations disponibles sur le domaine et d'autres limitations pratiques telle que la capacité des moyens informatiques (Samardzioska et Popov, 2005). Dans cette partie, nous allons présenter les trois modèles les plus utilisés :

### 5.1. Modèle discrète (Non - Homogeneous model NH)

Ce modèle traite le milieu fracturé comme un milieu non homogène (figure 1.3). La porosité et la perméabilité ont des valeurs discontinues qui varient brusquement. Pour la simulation de l'écoulement à petite échelle, chaque fracture est modélisée explicitement. Ce modèle est considéré comme le modèle le plus précis car les fractures sont étudiées cas par cas sans aucune approximation. Cependant, le modèle NH est compliqué car le nombre des fractures est grand même dans un milieu peu fracturé. En plus, ce modèle est très gourmand en moyens informatiques (temps de calcul et place mémoire) et nécessite une description complète de la géométrie des fractures (Samardzioska et Popov, 2005).

Le modèle NH peut être utilisé pour les problèmes avec un faible nombre des fractures significatives. Dès que le nombre des fractures augmente, le modèle NH devient moins pertinent.

Ce modèle est formé par deux équations qui sont l'équation de continuité et la loi de Darcy. Ces deux équations sont utilisées pour les fractures et les matrices poreuses. Les interfaces fracture-matrice sont traitées comme dans le cas d'un milieu hétérogène.

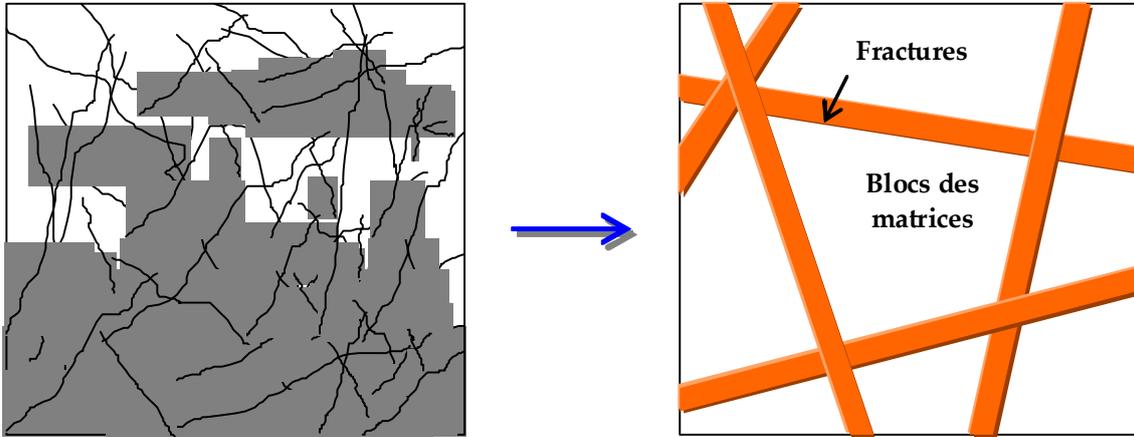


Figure 1.3: Le concept de modèle NH.

## 5.2. Modèle Equivalent Continuum (EC)

Ce modèle est développé la première fois par Berkowitz et al, (1988). Il consiste à remplacer les valeurs discontinues de la porosité et de la perméabilité par des valeurs moyennes équivalentes (figure 1.4). Ces valeurs moyennes peuvent être obtenues par une procédure d'homogénéisation. La différence entre le modèle EC et le modèle NH est que les fractures ne sont pas modélisées explicitement, mais elles sont prises en compte par les valeurs moyennes de la porosité et de la perméabilité. Ainsi les fractures et/ou les zones de fracture à forte densité peuvent être représentées dans le modèle EC en ajoutant des zones à forte conductivité hydraulique dans l'orientation appropriée.

Le modèle EC traite le milieu fracturé comme un milieu homogène avec des propriétés hydrauliques moyennes (Long et al, 1982 ; Sitharam et al, 2001). Dans le modèle «EC», il n'y a pas de distinction entre les fissures portant le fluide et les blocs des matrices, l'écoulement de fluide se fait sur tout le domaine. Ce modèle est utilisé dans les domaines des mécaniques des roches et dans l'hydrologie, particulièrement pour les problèmes de grande taille (Long et al, 1982 ; Sitharam et al, 2001).

L'inconvénient d'un tel modèle est l'utilisation des valeurs moyennes sur une grande partition du domaine. Par conséquent, il sera impossible d'estimer les variables d'états dans certains points du domaine. Ce modèle est alors convenable pour représenter le comportement global des fluides dans le milieu fracturé pour une grande échelle.

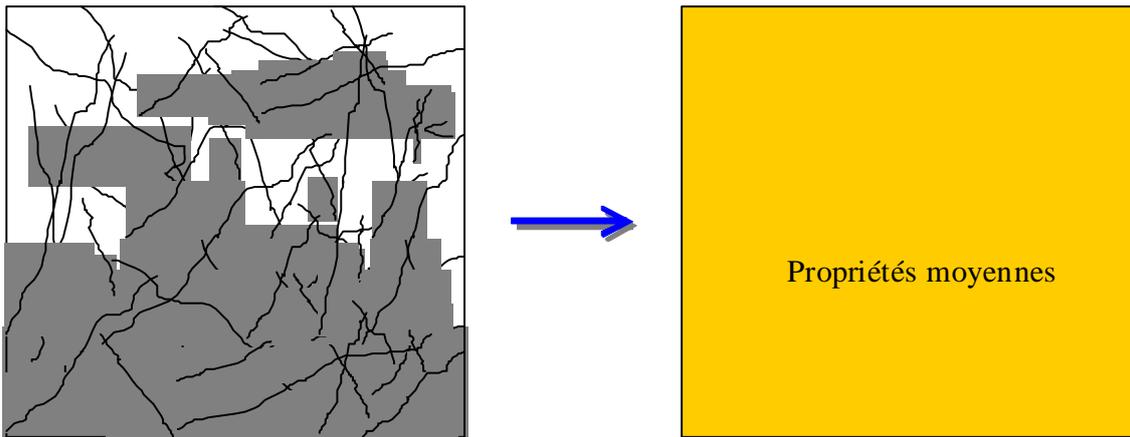


Figure 1.4: Le concept de modèle EC.

### 5.3. Modèle Double Porosité (DP)

Le modèle DP (Barenblatt et al, 1960) permet d'éviter les inconvénients du modèle EC. Il consiste à simuler les milieux fracturés de manière continue en utilisant des porosités différentes pour représenter ce milieu (Warren et Root, 1963). Le massif rocheux fracturé est modélisé par des blocs matriciels généralement peu perméables, recoupés par une fracturation régulière.

Ce modèle tente de restituer la spécificité de deux types de porosité en suivant deux principes:

- les écoulements sont favorisés par les fissures qui seront considérées comme un milieu très perméable. Elles constituent des drains où les fluides circulent et se renouvellent.
- la porosité de la matrice est faible mais a une capacité d'emmagasinement importante. Il existe des échanges entre la matrice et le fluide présent entre les plans de fractures.

Finalement le concept de double porosité reprend la notion de deux milieux homogènes équivalents et distincts: le réseau de fracture et la matrice poreuse (figure 1.5).

Alors que l'écoulement se fait dans les deux milieux séparés, les échanges ont lieu aux interfaces. Les écoulements sont régis par les équations classiques des milieux continus. Ce modèle fait intervenir deux « Volumes Élémentaires Représentatifs » [V.E.R] (Marle, 1971), l'un pour la matrice et l'autre pour les fractures.

Avec le V.E.R, le milieu est vu comme un milieu continu et homogène. Le réseau est constitué d'un grand nombre de fractures qu'il n'y a plus lieu de distinguer les unes des autres: les propriétés mécaniques intègrent les propriétés moyennes de la fracturation, et sont

spatialement stables. Le plus petit domaine répondant à cette définition est généralement dit Volume Élémentaire Représentatif.

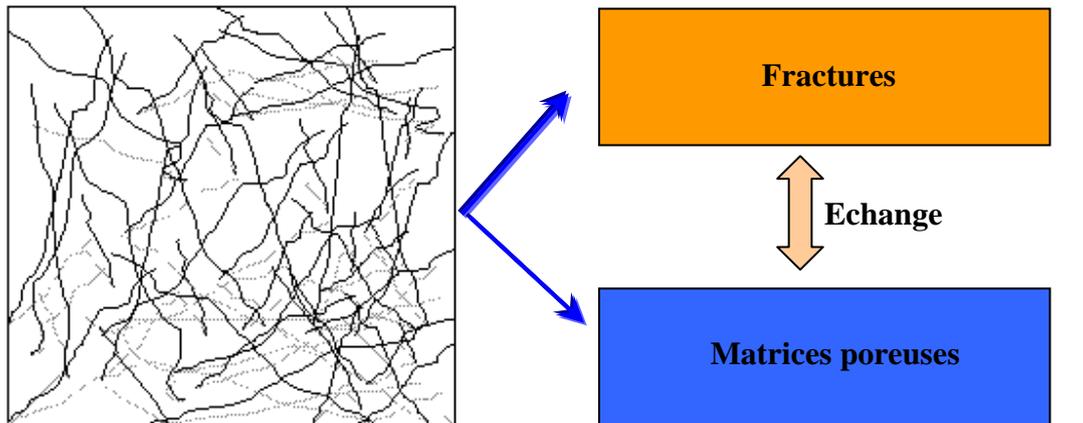


Figure 1.5: Le concept de modèle DP

Le milieu fracturé est idéalisé comme un milieu périodique comme le montre la figure (1.6). L'homogénéisation de ce milieu idéalisé est effectuée par un paramètre  $\varepsilon$  égal au rapport de la période à la taille du domaine. Nous obtenons ainsi un milieu avec des propriétés moyennes du milieu initial (Douglas et al, 1993). L'échelle des hétérogénéités est l'échelle microscopique et l'échelle du milieu homogénéisé est l'échelle macroscopique (figure 1.6). L'écoulement dans les deux échelles est relié par des conditions d'interface des blocs des matrices qui conservent la masse. Ces conditions sur les interfaces se présentent comme des conditions aux limites sur les blocs et comme un terme source dans les équations de l'échelle macroscopique (Hornung et. Showalter, 1990 ; Peszynska, 1992).

Le transfert de fluide entre les blocs des matrices et les fractures peut être important. Ce transfert est pris en compte dans le modèle à double porosité avec un terme de couplage entre le milieu homogénéisé et les blocs 'matrices'.

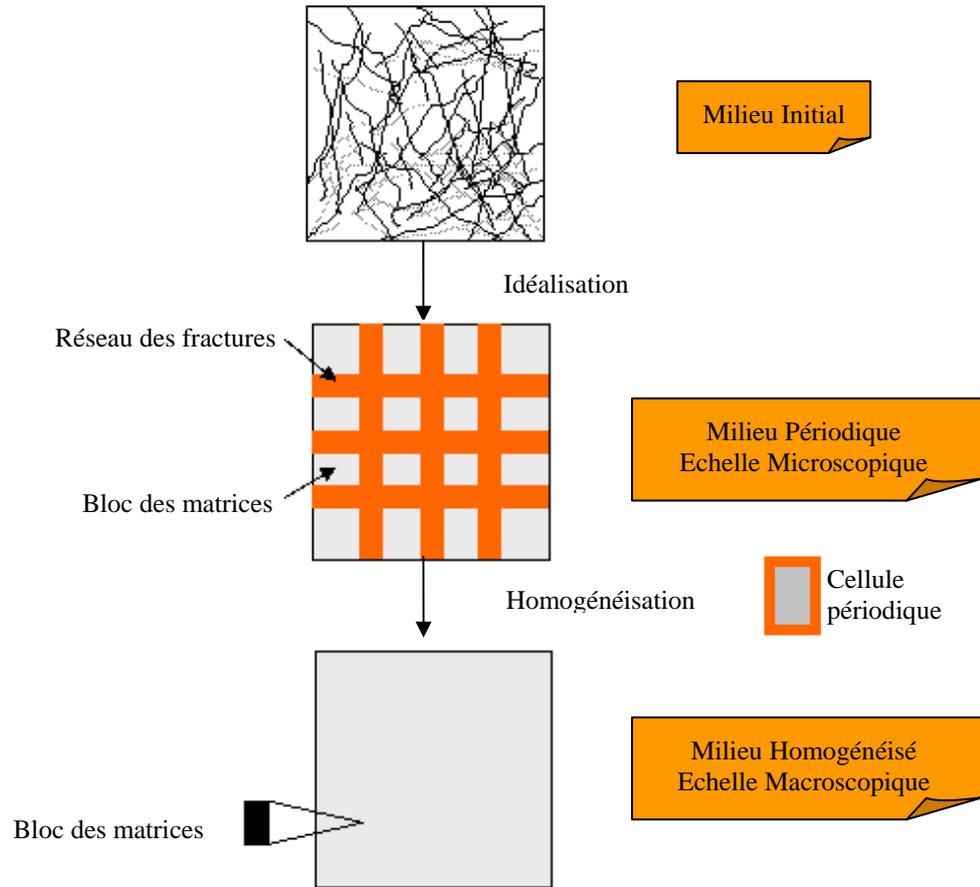


Figure 1.6: Le concept de modèle double porosité complète

Le modèle DP utilisé dans ce travail considère que l'écoulement de fluide dans le milieu fracturé est géré par deux équations couplées par un terme qui décrit l'échange entre les fissures et les blocs matricielles (Coats et Smith, 1964 ; Gerke et van Genuchten, 1993 a ; Warren et Root, 1963).

Le modèle DP suppose que le flux dans les fissures est plus rapide que celui dans les matrices, et que le flux à travers les blocs des matrices est considéré négligeable (Barenblatt et al, 1960 ; Horst et al, 1996; Gerke et Genuchten, 1993 b), (figure 1.7).

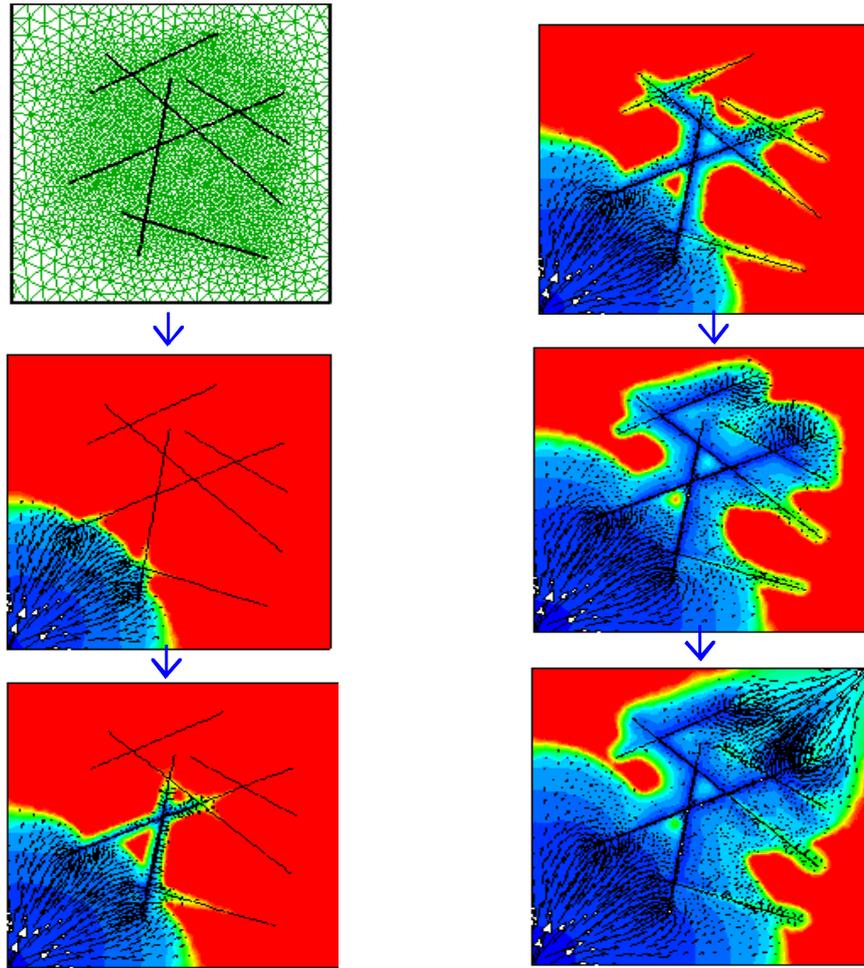


Figure 1.7: Ecoulement d'un fluide dans un milieu fracturé

## 6. Conclusion

La détermination du système d'équations décrivant l'écoulement des fluides dans un milieu fracturé nécessite une modélisation pratique qui décrit le comportement de ce milieu en présence des fractures. Plusieurs modèles peuvent être utilisés pour répondre à cette question. On peut citer ainsi trois modèles NH, DP, et EC qui possèdent chacun des avantages spécifiques pour le traitement des fissures. Le modèle NH traite le milieu en modélisant chaque fissure séparément, le modèle EC traite le milieu globalement en calculant des paramètres globaux moyens, tandis que le modèle DP, utilisé dans notre travail, simule le milieu d'une manière continue en utilisant des porosités et perméabilités différentes.

Le modèle DP est défini par deux équations qui sont la conservation de la masse et la loi de Darcy. Ces équations forment ce que nous appelons le modèle mathématique de la diffusion d'un fluide dans le milieu fracturé.



## Chapitre 2

# Résolution du problème direct avec la méthode des Éléments Finis Mixtes

1. **Introduction**
2. **Modèle mathématique**
3. **Résolution du problème direct**
  - 3.1. La méthode des éléments finis mixtes (EFM)
4. **La méthode des EFMH pour l'écoulement en milieu fracturé**
  - 4.1. L'espace de Raviart-Thomas
  - 4.2. Discrétisation de la loi de Darcy
  - 4.3. Discrétisation de l'équation de continuité
  - 4.4. Discrétisation temporelle
  - 4.5. Système final
5. **Oscillations non physiques avec la méthode des EFMH**
  - 5.1. Présentation du schéma de condensation de la masse (EFMHC)
6. **Le code de calcul EDM**
7. **Validation du code EDM**
  - 7.1. En terme de précision
    - 7.1.1. *Comparaison avec la méthode des EFMH*
    - 7.1.2. *Comparaison entre EDM et l'approche de séparation d'opérateur (OS)*
  - 7.2. En terme d'efficacité
8. **Conclusion**

## 1. Introduction

Le but de ce chapitre est d'utiliser la méthode des éléments finis mixtes pour la résolution des équations décrivant l'écoulement d'eau souterraine en milieu fracturé (problème direct). Dans un premier temps, nous allons présenter le modèle mathématique utilisé dans ce travail, et, dans un second temps, nous développerons une solution numérique de ce modèle avec la méthode des éléments finis mixtes tout en discutant les formulations possibles de cette méthode.

## 2. Modèle mathématique

Le modèle double porosité (DP) est utilisé dans ce travail pour la simulation de la diffusion de fluide dans les milieux fracturés. Avec ce modèle, l'écoulement du fluide est géré par les équations suivantes:

Equation de continuité dans les fractures:

$$s \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot q = f + \sigma (h_m - h) \quad (2.1)$$

où

$s$  : Le coefficient d'emmagasinement des fractures,  $[L^{-1}]$ ;

$h$  : La charge hydraulique dans les fractures (variable d'état),  $[L]$ ;

$h_m$  : La charge hydraulique dans la matrice (variable d'état),  $[L]$ ;

$\sigma$  : Le coefficient d'échange matrice/fracture,  $[L^{-1}T^{-1}]$ ;

$f$  : Le terme puits/source,  $[T^{-1}]$ ;

$q$  : Le flux dans les fractures donné par la loi de Darcy :

$$q = -K \nabla h \quad (2.2)$$

où  $K$  est la conductivité hydraulique des fractures  $[LT^{-1}]$ ;

Equation de continuité dans la matrice :

$$s_m \frac{\partial h_m}{\partial t} = -\sigma (h_m - h) \quad (2.3)$$

où  $s_m$  est le coefficient d'emmagasinement des matrices  $[L^{-1}]$ ;

La conductivité hydraulique des matrices ( $K_m$ ) n'apparaît pas dans la deuxième équation, l'écoulement dans la matrice est supposé négligeable par rapport à l'écoulement dans les fractures. Les conditions aux limites utilisées dans ce travail sont celles de Dirichlet et de Neumann. Pour les conditions de Dirichlet, les variables d'état sont imposées sur les frontières du domaine. En régime permanent l'utilisation de ce type de conditions est nécessaire pour assurer l'unicité de la solution. Pour les conditions de Neumann, le flux est imposé à la frontière du domaine.

### 3. Résolution du problème direct

Différentes méthodes numériques comme la méthode des Différences Finies (DF), des Volumes Finis (VF), des Eléments Finis Galerkin (EF), et des Eléments Finis Mixtes (EFM), peuvent être utilisées pour résoudre les équations d'écoulement en milieu poreux. Ces méthodes ont des avantages et des inconvénients différents. Pour choisir le schéma le mieux adapté à la résolution du problème, plusieurs propriétés sont souhaitables :

- Conservation locale de la masse ;
- Continuité des flux aux interfaces des différents éléments de discrétisation;
- Approximation précise du champ de vitesse en milieu fortement hétérogène;
- Préservation de la positivité de la solution (schéma monotone);
- Capacité à traiter des problèmes anisotropes (tenseur de perméabilité plein);
- Flexibilité dans la manipulation de domaines géométriques complexes;
- Traitement satisfaisant des différents types des conditions aux limites;
- Résolution efficace du système linéaire.

Les méthodes de DF et des VF permettent le calcul d'une charge (ou pression) moyenne par maille. Elles donnent un bilan de masse exacte au niveau de chaque élément. Ces deux méthodes sont monotones. Cette propriété évite les oscillations non physiques et préserve la positivité de la solution. Cependant, ces deux méthodes présentent des contraintes sur la discrétisation spatiale. La méthode DF ne se prête pas à des domaines à géométrie complexe et nécessite un maillage régulier. La méthode VF est plus flexible que celles des DF, mais elle nécessite le respect des conditions de Delaunay sur la discrétisation spatiale des maillages triangulaires. La vérification de ces conditions peut même présenter une réelle difficulté pour les maillages de tétraèdres dans les problèmes tridimensionnels. Par ailleurs, les deux méthodes (DF et VF) ne sont pas adaptées à la résolution des problèmes avec des tenseurs de conductivité hydraulique non diagonaux (anisotropes).

Avec la méthode des EF, les équations sont discrétisées par des polynômes de degré  $k \geq 1$  sur le domaine maillé. En pratique, on prend des triangles ou des quadrilatérales dans des problèmes à deux dimensions. Ceci permet de décrire d'une manière souple les limites du domaine à géométrie complexe ainsi que les limites des hétérogénéités. De plus, cette méthode est capable de traiter toutes les directions d'anisotropies. Le système linéaire auquel on aboutit avec cette méthode est symétrique et défini positif.

Ce type de système se résout efficacement avec des algorithmes itératifs robustes comme celui de Choleski ou du gradient conjugué. Avec la méthode des EF de plus bas degré, la charge est approchée aux nœuds du maillage. Par contre, les flux ne sont pas définis d'une manière unique aux interfaces des éléments. Par conséquent, le bilan de masse n'est pas conservé au niveau local de chaque élément.

Par ailleurs, la résolution numérique des équations d'écoulements par les méthodes des DF, VF ou EF, a soulevé une préoccupation essentielle : ces méthodes sont en effet conçues pour résoudre le problème en donnant comme résultat la fonction d'état (la charge ou la pression). La vitesse d'écoulement est donc déduite par différenciation de la variable d'état. Le calcul de la vitesse de celle-ci génère des erreurs supplémentaires notamment en milieu fortement hétérogène. Afin de permettre un calcul direct et plus précis du débit, une formulation mixte de la fonction d'état et de son gradient a été développée.

### **3.1. La méthode des éléments finis mixtes (EFM)**

L'idée de base des méthodes mixtes est d'approcher simultanément la charge piézométrique et la vitesse d'écoulement. Dans les domaines des écoulements potentiels, cette méthode a été présentée la première fois par Meissner (1973). La réalisation mathématique et numérique des EFM a été rendue possible grâce au travail pionnier de Raviart et Thomas (1977) ; et Thomas (1977). La discrétisation de la vitesse est basée sur les propriétés de l'espace de Raviart-Thomas. D'autres familles d'espaces ont été introduites. Pour plus des détails sur l'analyse et la construction d'éléments finis mixtes, on peut se référer aux travaux de Brezzi and Fortin (1991), Brezzi et al. (1985, 1987), Douglas and Roberts (1985) et Nedelec (1980, 1986).

Lorsque nous abordons une hydrodynamique de nappe en régime permanent, l'équation aux dérivées partielles à traiter est une équation elliptique. Avec la méthode des EFM associée à un espace de Raviart-Thomas de plus bas degré ( $RT_0$ ), nous aboutissons à un système linéaire dont les inconnues sont les charges moyennes par mailles et les flux à travers les interfaces entre éléments. Toutefois, cette approche présente une difficulté numérique liée à une matrice non-définie positive associée au système linéaire à résoudre (voir Chavent and Roberts, 1991; Chavent and J. Jaffré, 1986; Batten et al., 1996; Brezzi and Fortin, 1991). Afin de remédier à cet inconvénient, une nouvelle formulation a été proposée qui permet une hybridation des formulations mixtes (Éléments Finis Mixtes Hybrides EFMH), en introduisant une inconnue supplémentaire représentant des multiplicateurs de Lagrange. Ces

derniers servent à imposer la continuité de la composante normale des flux entre éléments adjacents. La formulation EFMH permet de réduire le problème à la résolution d'un système linéaire dont la matrice associée est symétrique, définie positive (Chavent and Roberts, 1991 ; Roberts and Thomas, 1989 ; Marini, 1985).

La méthode des EFMH appartient à la classe des méthodes des éléments finis non-conformes. Cette technique réduit la formulation mixte, où les inconnues sont les charges moyennes et les flux, à une formulation qui a pour inconnues primales les charges moyennes par facette (arête). Plusieurs études ont montré la connexion des discrétisations mixtes aux méthodes des DF et des VF. Dans le cas d'une discrétisation rectangulaire et d'un tenseur de conductivité hydraulique diagonal, Russell and Wheeler (1983) ont montré qu'en utilisant des formules spéciales pour l'intégration numérique, la méthode des EFM se réduit au schéma des DF. Avec la même condition sur le tenseur de perméabilité, Baranger et al. (1995) ont trouvé la connexion avec les VF dans le cas d'un maillage triangulaire qui vérifie les conditions de Delaunay. Toujours avec les maillages triangulaires, Younes et al. (1999) ont développé une nouvelle formulation mixte sans l'utilisation de formules d'intégration numérique, qui est strictement équivalente à la méthode des EFMH. Cette formulation conduit à un système dont le nombre d'inconnues est égal au nombre des mailles. L'inconvénient de cette approche est que le système à résoudre est non symétrique dans le cas d'un problème transitoire. En régime permanent, des critères liés à la discrétisation spatiale du domaine et à son hétérogénéité doivent être respectés pour obtenir un système symétrique, défini positif. Ainsi, dans un même ordre d'idée, Arbogast et al. (1997, 1998) ont développé une autre formulation mixte pour des maillages plus généraux et sans contrainte sur le tenseur de perméabilité.

Mosé et al. (1994) ont comparé l'approximation mixte hybride avec la méthode des éléments finis conformes. En milieu hétérogène, ils ont trouvé que le calcul du champ de vitesse avec les EFMH a une meilleure précision numérique qu'avec les EF. Dans le cas d'un pompage dans un milieu homogène, Ackerer et al. (1990) et Mosé (1990) ont montré que le vecteur vitesse obtenu par les EFMH est plus précis que celui obtenu par les DF. De même, Durlofsky (1994) a trouvé une supériorité de la méthode des EFM sur les VF lorsque le milieu présente un fort contraste de perméabilité.

Dans ce travail, nous allons utiliser la méthode des EFMH pour la résolution des équations d'écoulement en milieu fracturé. Ensuite nous montrons que la formulation EFMH peut présenter des oscillations non physiques dans certains cas (cette méthode ne respect pas le principe de maximum discret) et nous proposons l'utilisation de la procédure de condensation de la masse pour remédier à ce problème.

## 4. La méthode des EFMH pour l'écoulement en milieu fracturé

Dans cette partie, nous présentons une mise en œuvre simplifiée de la méthode des EFMH. Les développements qui suivent sont inspirés par le travail de Chavent and Roberts (1991). La méthode est développée sur un maillage triangulaire irrégulier qui permet de discrétiser d'une façon plus précise l'hétérogénéité et les limites du domaine.

### 4.1. L'espace de Raviart-Thomas

L'espace de Raviart-Thomas de plus bas degré  $RT_0$  est défini sur chaque élément du maillage. Sur un élément triangulaire  $E$ , cet espace est donné par :

$$RT_0(E) = \{X_E / X_E = (a + bx, c + by)\} \quad (2.4)$$

Les fonctions de base  $(w_{i=(1,2,3)}^E)$  de l'espace  $RT_0(E)$  sur un élément de référence sont représentées sur la figure (2.1). Ces fonctions sont données par :

$$w_i^E = \frac{1}{2|E|} \begin{pmatrix} x - x_i \\ y - y_i \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

Avec  $|E|$  est l'air de l'élément  $E$ ,  $(x_i, y_i)$  les coordonnées du sommet ( $i$ ) (Figure 2.1).

Les principales caractéristiques de ces fonctions sont les suivantes:

$$\int_{E_j} w_i^E \cdot n_{E_j} = \delta_{ij} \quad (2.6)$$

Avec  $E_j$  est la  $j^{\text{ème}}$  arête de l'élément  $E$  et  $n_{E_j}$  le vecteur normal unitaire de  $E_j$ , dirigé vers l'extérieur de l'élément ( $E$ ).  $\delta_{ij}$  étant le symbole de Kronecker.

La propriété (2.6), permet d'écrire :

$$\int_E \nabla \cdot w_i^E dE = \frac{1}{|E|} \quad (2.7)$$

En outre sur l'arête  $E_j$  on a:

$$w_i^E \cdot n_{E_j} = \frac{1}{|E_j|} \delta_{ij} \quad (2.8)$$

Avec  $|E_j|$  est la longueur de l'arête  $E_j$ .

Sur un élément  $E$  du maillage, la vitesse est approchée par  $q^E \in RT_0(E)$  et représenté comme une combinaison linéaire des fonctions  $w_{i=1,2,3}^E$  :

$$q^E = \sum_{i=1}^3 w_i^E Q_i^E \quad (2.9)$$

Avec  $Q_{i=1,2,3}^E$  sont les flux à travers les arêtes de  $(E)$  (Figure 2.1).

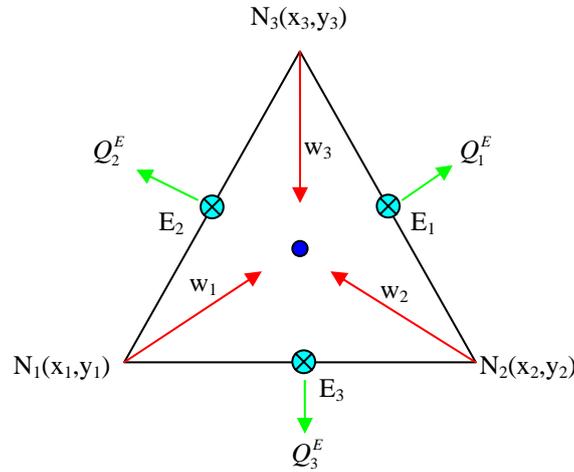


Figure 2.1 : Les fonctions tests sur un élément  $E$ .

Le vecteur  $q^E$  a les propriétés suivantes :

$$\nabla \cdot q^E \text{ est constant sur } (E) \quad (2.10)$$

$$\int_{E_i} q^E \cdot n_{E_j} dl = Q_i^E \quad (2.11)$$

Par conséquent, le vecteur vitesse  $q^E$  peut être déterminé en tout point dans  $(E)$ , par la connaissance des flux  $Q_i^E$  à travers les arêtes de  $(E)$ .

#### 4.2. Discrétisation de la loi de Darcy

Par la méthode des EFM, la loi de Darcy (2.2) et l'équation de continuité (2.1) sont discrétisées séparément. En inversant le tenseur de perméabilité, la loi de Darcy s'écrit sous la forme équivalente :

$$K^{-1}q = -\nabla h \quad (2.12)$$

En multipliant cette dernière équation par les fonctions tests  $w_{i=1,2,3}^E$  d'un élément  $E$ , et en utilisant la formule de Green, on obtient la formulation variationnelle de l'équation (2.12) :

$$\int_E \left[ (K^E)^{-1} q^E \right] \cdot w_i^E = \int_E h \nabla \cdot w_i^E - \sum_{j=1}^3 \int_{E_j} h w_i^E n_{E_j} \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.13)$$

Avec  $K^E$  est l'approximation de  $K$  sur l'élément  $E$  (constante sur chaque élément).

En utilisant les propriétés (2.7) et (2.8), on obtient :

$$\int_E \left[ (K^E)^{-1} q^E \right] \cdot w_i^E = \frac{1}{|E|} \int_E h - \frac{1}{|E_i|} \int_{E_i} h = h^E - Th_i^E \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.14)$$

Avec  $h^E$  est la charge moyenne sur l'élément ( $E$ ) et  $Th_i^E$  la charge moyenne sur la facette  $E_i$  (ou bien la trace de la charge sur la facette).

En utilisant (2.9), l'équation (2.14) peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\sum_{j=1}^3 B_{ij}^E Q_j^E = h^E - Th_i^E \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.15)$$

Avec  $B^E$  est une matrice locale donnée par :

$$B_{ij}^E = \int {}^t w_i^E (K^E)^{-1} w_j^E \quad (2.16)$$

${}^t w_i^E$  est le vecteur transposé de  $w_i^E$ .

La matrice  $B^E$  étant inversible, l'équation (2.15) s'écrit sous une forme équivalente:

$$Q_i^E = \sum_{j=1}^3 (B_{ij}^E)^{-1} h^E - \sum_{j=1}^3 (B_{ij}^E)^{-1} Th_j^E \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.17)$$

Où  $(B^E)^{-1}$  est la matrice inverse de  $B^E$ .

Soit  $\alpha_i^E = \sum_{j=1}^3 (B_{ij}^E)^{-1}$ , l'équation (2.17) devient:

$$Q_i^E = \alpha_i^E h^E - \sum_{j=1}^3 (B_{ij}^E)^{-1} Th_j^E \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.18)$$

L'équation (2.18) conduit à :

$$\sum_{i=1}^3 Q_i^E = \alpha^E h^E - \sum_{i=1}^3 \alpha_i^E Th_i^E \quad (2.19)$$

Avec  $\alpha^E = \sum_{i=1}^3 \alpha_i^E$

### 4.3. Discrétisation de l'équation de continuité

On cherche maintenant à écrire des formes discrètes des équations de conservation de la masse (2.1) et (2.3). En intégrant cette équation sur un élément ( $E$ ) et en utilisant les propriétés de l'espace d'approximation (2.7), (2.8) et (2.9), on obtient :

$$|E| s^E \frac{dh^E}{dt} + \sum_{i=1}^3 Q_i^E - F^E - \sigma^E |E| (h_m^E - h^E) = 0 \quad E = 1..Nm \quad (2.20)$$

$$s_m^E \frac{dh_m^E}{dt} = -\sigma^E (h_m^E - h^E) \quad E = 1..Nm \quad (2.21)$$

Avec  $h^E$  (resp.  $h_m^E$ ) est la valeur moyenne de la charge des fractures (resp. matrice) dans l'élément  $E$ .  $s^E$ ,  $s_m^E$ , et  $\sigma^E$  sont les approximations de  $s$ ,  $s_m$ , et  $\sigma$  sur l'élément  $E$  (supposées constantes par élément).  $Q_i^E$  sont les flux a travers les facettes de  $E$ .  $F^E$  est le

terme puits / source associé à  $E$  (valeur moyenne de  $f$  sur  $E$ ) et  $Nm$  le nombre de mailles dans le domaine.

En remplaçant (2.19) dans (2.20) on obtient l'équation suivante :

$$|E|s^E \frac{dh^E}{dt} + \alpha^E h^E - \sum_{i=1}^3 \alpha_i^E Th_i^E - F^E - \sigma^E |E| (h_m^E - h^E) = 0 \quad E = 1..Nm \quad (2.22)$$

#### 4.4. Discrétisation temporelle

Le système ((2.22) et (2.21)) est formé par des équations différentielles ordinaires. La discrétisation temporelle de ces équations avec un schéma implicite en temps conduit au système algébrique suivant:

$$\begin{aligned} |E|s^E \frac{h^{E,n+1} - h^{E,n}}{\Delta t} + \alpha^E h^{E,n+1} - \sum_{i=1}^3 \alpha_i^E Th_i^{E,n+1} \\ - F^E - \sigma^E |E| (h_m^{E,n+1} - h^{E,n+1}) = 0 \quad E = 1..Nm \end{aligned} \quad (2.23)$$

Avec  $n$  est l'indice de temps et  $\Delta t$  le pas de temps utilisé pour la discrétisation temporelle.

Pour l'équation de continuité dans les matrices poreuses, la forme discrétisée est donnée par:

$$s_m^E \frac{dh_m^E}{dt} = -\sigma^E (h_m^E - h^{E,n+1}) \quad E = 1..Nm \quad (2.24)$$

Il est clair que cette équation admet une solution analytique qui peut être écrite sous la forme suivante:

$$h_m^{E,n+1} = (h_m^{E,n} - h^{E,n+1}) e^{-\tau^E \Delta t} + h^{E,n+1} \quad (2.25)$$

Avec  $\tau^E = \frac{\sigma^E}{s_m^E}$ .

Ainsi en remplaçant (2.25) dans (2.23), on peut éliminer  $h_m^{E,n+1}$  et on obtient l'équation suivante:

$$\begin{aligned}
 & |E|s^E \frac{h^{E,n+1} - h^{E,n}}{\Delta t} + \alpha^E h^{E,n+1} - \sum_{i=1}^3 \alpha_i^E Th_i^{E,n+1} \\
 & -F^E - \sigma^E |E| (h_m^{E,n} - h^{E,n+1}) e^{-\tau^E \Delta t} = 0 \quad E = 1..Nm
 \end{aligned} \tag{2.26}$$

L'équation (2.26) permet de calculer  $h^{E,n+1}$  en fonction de  $Th_i^{E,n+1}$  et de  $h_m^{E,n}$  :

$$\begin{aligned}
 h^{E,n+1} = & \frac{\Delta t}{|E|s^E + \Delta t\alpha^E + |E|\Delta t\sigma^E e^{-\tau^E \Delta t}} \sum_{i=1}^3 \alpha_i^E Th_i^{E,n+1} + \\
 & \frac{\Delta t}{|E|s^E + \Delta t\alpha^E + |E|\Delta t\sigma^E e^{-\tau^E \Delta t}} F^E + \\
 & \frac{|E|s^E}{|E|s^E + \Delta t\alpha^E + |E|\Delta t\sigma^E e^{-\tau^E \Delta t}} h^{E,n} \\
 & \frac{|E|\Delta t\sigma^E e^{-\tau^E \Delta t}}{|E|s^E + \Delta t\alpha^E + |E|\Delta t\sigma^E e^{-\tau^E \Delta t}} h_m^{E,n}
 \end{aligned} \tag{2.27}$$

Enfin, la charge dans les fractures sur un élément ( $E$ ) sera donnée par:

$$h^{E,n+1} = \sum_{i=1}^3 \gamma_i^E Th_i^{E,n+1} + g^E \tag{2.28}$$

Avec

$$\gamma_i^E = \frac{\alpha_i^E \Delta t}{|E|s^E + \Delta t\alpha^E + |E|\Delta t\sigma^E e^{-\tau^E \Delta t}} \alpha_i^E \tag{2.29}$$

Et

$$g^E = \frac{\Delta t F^E + |E|\Delta t\sigma^E e^{-\tau^E \Delta t} h_m^{E,n} + |E|s^E h^{E,n}}{|E|s^E + \Delta t\alpha^E + |E|\Delta t\sigma^E e^{-\tau^E \Delta t}} \tag{2.30}$$

En remplaçant (2.28) dans (2.18), on peut exprimer les flux sur les facettes d'un élément ( $E$ ) en fonction des traces de la charge sur ces facettes :

$$Q_i^{E,n+1} = \sum_{j=1}^3 \left[ \alpha_i^E \gamma_j^E - (B_{ij}^E)^{-1} \right] Th_j^{E,n+1} + \alpha_i^E g^E \quad i=1,2,3 \quad (2.31)$$

#### 4.5. Système final

Le système final peut être obtenu en utilisant la continuité des flux à travers des facettes :

$$Q_k^{E,n+1} + Q_l^{E',n+1} = 0 \quad (2.32)$$

Où ( $E$ ) et ( $E'$ ) sont deux éléments adjacents (Figure 2.2).

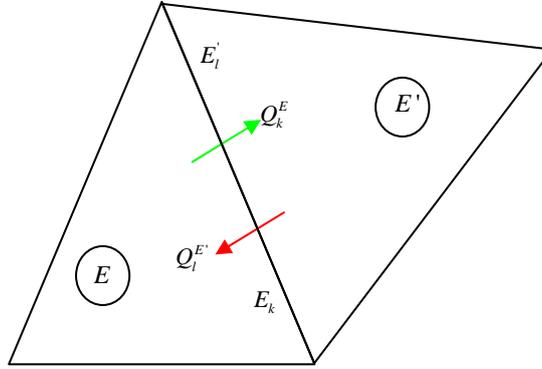


Figure 2.2 : Continuité deux flux sur chaque facette

En remplaçant les flux par ces valeurs de l'équation (2.31), on obtient:

$$\sum_{j=1}^3 \left[ \alpha_k^E \gamma_j^E - (B_{kj}^E)^{-1} \right] Th_j^{E,n+1} + \alpha_k^E g^E + \sum_{j=1}^3 \left[ \alpha_l^{E'} \gamma_j^{E'} - (B_{lj}^{E'})^{-1} \right] Th_j^{E',n+1} + \alpha_l^{E'} g^{E'} = 0 \quad (2.33)$$

En utilisant la continuité des traces de charge :

$$Th_k^E = Th_l^{E'} \quad (2.34)$$

On obtient l'équation finale :

$$\begin{aligned} & \left[ \alpha_k^E \gamma_k^E - (B_{kk}^E)^{-1} + \alpha_l^{E'} \gamma_l^{E'} - (B_{ll}^{E'})^{-1} \right] Th_k^{E,n+1} + \\ & \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^3 \left[ \alpha_k^E \gamma_j^E - (B_{kj}^E)^{-1} \right] Th_j^{E,n+1} + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq l}}^3 \left[ \alpha_l^{E'} \gamma_j^{E'} - (B_{lj}^{E'})^{-1} \right] Th_j^{E',n+1} + \alpha_k^E g^E + \alpha_l^{E'} g^{E'} = 0 \end{aligned} \quad (2.35)$$

Les inconnues de cette équation sont les traces de la charge sur les facettes. Ainsi en écrivant cette équation sur les facettes, on obtient un système linéaire formé par  $nf$  équations avec  $nf$  inconnues ( $nf$  est le nombre des facettes). La forme matricielle de ce système est donnée par l'équation suivante:

$$[M] \cdot \{Th^{n+1}\} = \{R^n\} \quad (2.36)$$

Avec  $M$  est une matrice symétrique définie positive de dimension  $(nf \times nf)$  et qui dépend du paramètre  $(k, s, s_m, \sigma)$ .

En notant,  $E$  et  $E'$  les éléments situés de part et de l'autre d'une facette  $X$ , répertoriée localement  $F_k^E$  et  $F_l^{E'}$  on peut préciser le vecteur  $\{R^n\}$ :

$$R_X^n = \bar{R}_X^{E,n} + \bar{R}_X^{E',n} = \bar{R}_{F_k^E}^{E,n} + \bar{R}_{F_l^{E'}}^{E',n} \quad (2.37)$$

Avec

$$\begin{aligned} \bar{R}_{F_k^E}^{E,n} &= \alpha_k^E g^E \\ \bar{R}_{F_l^{E'}}^{E',n} &= \alpha_l^{E'} g^{E'} \end{aligned} \quad (2.38)$$

Les coefficients de la matrice  $[M]$  sont donnés par les relations suivantes:

❖ Pour les coefficients diagonaux:

$$m_{XX} = \overset{-E}{m_{XX}} + \overset{-E'}{m_{XX}} = \overset{-E}{m_{kk}} + \overset{-E'}{m_{ll}} \quad (2.39)$$

Avec

$$\begin{aligned} \overset{-E}{m_{kk}} &= \alpha_k^E \gamma_k^E - (B_{kk}^E)^{-1} \\ \overset{-E'}{m_{ll}} &= \alpha_l^{E'} \gamma_l^{E'} - (B_{ll}^{E'})^{-1} \end{aligned} \quad (2.40)$$

❖ Pour les coefficients hors-diagonaux:

Si la facette  $Y$  n'appartient pas au même élément que la facette  $X$ , alors:

$$m_{XY} = 0 \quad (2.41)$$

Si l'élément  $E$  contient les facettes  $X$  et  $Y$ , répertoriées localement avec les indices respectifs  $k$  et  $l$ , alors :

$$m_{XY} = \overline{m}_{XY} = \overline{m}_{kl} = \alpha_k^E \gamma_l^E - (B_{kl}^E)^{-1} \quad (2.42)$$

La résolution de ce système permet de calculer les traces de la charge dans les fractures ( $Th^{n+1}$ ) sur chaque facette du domaine. Ensuite, en utilisant l'équation (2.28), on peut calculer la charge moyenne dans chaque éléments ( $h^{n+1}$ ). Enfin, pour calculer les charges moyennes dans les matrices poreuses ( $h_m^{n+1}$ ), il suffit d'utiliser l'équation locale (2.25).

## 5. Oscillations non physiques avec la méthode des EFMH

Si les éléments finis standards sont généralement préférés par rapport aux différences finies pour leur adaptation à des géométries complexes, il n'en reste pas moins que cette méthode peut produire des oscillations non-physiques.

Ce problème peut ainsi se manifester lorsque les éléments finis sont appliqués à l'équation de l'écoulement en milieu poreux saturé et non saturé pour modéliser des fronts raides d'infiltration (Milly, 1985 ; Celia et al., 1990 ; Pan et al., 1996 ; Ju and Kung, 1997 ; Karthikeyan et al., 2001). Cette difficulté est liée à l'expression discrète du terme exprimant la variation de masse dans le volume (ou matrice de masse). Des comparaisons matricielles avec la méthode des DF, pour laquelle aucune oscillation n'apparaît, confirme cette idée (Belfort, 2006).

Différentes solutions au problème d'oscillations ont été développées, parmi lesquelles la condensation de la masse ou «mass lumping» (Neumann, 1972; Milly, 1985) ou des schémas distribués (Pan et al., 1996).

Pour ce type de problème, l'application de la méthode des EFMH standards n'améliore pas véritablement le problème d'oscillation (Chounet et al., 1999 ; Farthing et al., 2003 ; Belfort

et Lehmann, 2005). Une technique de quadrature, souvent référencée comme méthode de condensation de la masse «mass-lumping», a alors été utilisée pour éviter ce problème. Cette méthode consiste à diagonaliser la matrice de masse afin de respecter la positivité de la solution.

Contrairement à la méthode de «mass-lumping» développée pour les éléments finis, la quadrature n'assure pas la condensation de la masse dans le système matriciel obtenu avec la méthode des EFMH (Belfort, 2006).

Younes et al. (2006) ont alors développé une technique de condensation pour le schéma EFMH appliqué à une équation d'advection – dispersion. Cette technique est adoptée dans ce travail pour la modélisation de l'écoulement en milieu fracturé.

### 5.1. Présentation du schéma de condensation de la masse (EFMHC)

L'idée principale des EFMHC consiste à exprimer le flux  $Q_i^E$  au niveau de chaque facette en distinguant les composantes stationnaires et transitoire:

$$Q_i^E = \tilde{Q}_i^E + \frac{|E|}{3} f_E + \sigma^E \frac{|E|}{3} (Thm_i^E - Th_i^E) - s^E \frac{|E|}{3} \frac{\partial Th_i^E}{\partial t} \quad (2.43)$$

Où  $\tilde{Q}_i^E$  correspond au flux obtenu en régime stationnaire sans terme puits/source ni terme d'échange (fractures/matrices poreuses).

L'expression du flux, déjà obtenue au terme de la formulation variationnelle de la loi de Darcy (2.18), est introduite dans l'équation de continuité en régime permanent :

$$\nabla \cdot q^E = 0 \quad (2.44)$$

En exprimant la charge moyenne  $h^E$  en fonction des traces de la charge  $Th_j^E$ ,

$$h^E = \frac{1}{\alpha^E} \sum_{i=1}^3 \alpha_i^E Th_i^E \quad (2.45)$$

Et en injectant l'expression obtenue dans l'équation (2.18), il vient :

$$\tilde{Q}_i^E = \sum_{j=1}^3 \left[ \frac{\alpha_i^E \alpha_j^E}{\alpha^E} - (B_{ij}^E)^{-1} \right] Th_j^E \quad (2.46)$$

Le flux global sortant par la facette  $E_i$  s'écrit ainsi:

$$Q_i^E = \sum_{j=1}^3 \left[ \frac{\alpha_i^E \alpha_j^E}{\alpha^E} - (B_{ij}^E)^{-1} \right] Th_j^E + \frac{|E|}{3} f_E + \sigma^E \frac{|E|}{3} (Thm_i^E - Th_i^E) - s^E \frac{|E|}{3} \frac{\partial Th_i^E}{\partial t} \quad (2.47)$$

Donc après la discrétisation temporelle, le flux global sortant par la facette  $E_i$  au pas de temps  $(n+1)$  s'écrit sous la forme suivante:

$$Q_i^{E,n+1} = \sum_{j=1}^3 \left[ \frac{\alpha_i^E \alpha_j^E}{\alpha^E} - (B_{ij}^E)^{-1} \right] Th_j^{E,n+1} + \frac{|E|}{3} f_E + \sigma^E \frac{|E|}{3} (Thm_i^{E,n+1} - Th_i^{E,n+1}) - s^E \frac{|E|}{3} \frac{Th_i^{E,n+1} - Th_i^{E,n}}{\Delta t} \quad (2.48)$$

Ainsi, avec la procédure de condensation de la masse, la solution analytique de l'équation de continuité dans les matrices poreuses peut être écrite sous la forme suivante:

$$Thm_i^{E,n+1} = (Thm_i^{E,n} - Th_i^{E,n+1}) e^{-\tau^{E_i} \Delta t} + Th_i^{E,n+1} \quad (2.49)$$

Avec

$$h_m^E = \frac{1}{\alpha^E} \sum_{i=1}^3 \alpha_i^E Thm_i^E \quad (2.50)$$

$$\tau^{E_i} = \frac{|E| \sigma^E + |E'| \sigma^{E'}}{|E| s_m^E + |E'| s_m^{E'}} \quad (2.51)$$

Où  $E$  et  $E'$  sont les deux mailles voisines de la facette  $E_i$

En substituant (2.49) dans (2.48) on obtient l'expression finale du flux à travers la facette  $E_i$  :

$$\begin{aligned}
 Q_i^{E,n+1} &= \sum_{j=1}^3 \left[ \frac{\alpha_i^E \alpha_j^E}{\alpha^E} - (B_{ij}^E)^{-1} \right] Th_j^{E,n+1} + \frac{|E|}{3} f_E + \\
 \sigma^E \frac{|E|}{3} (Thm_i^{E,n} - Th_i^{E,n+1}) e^{-\tau^E \Delta t} - s^E \frac{|E|}{3} \frac{Th_i^{E,n+1} - Th_i^{E,n}}{\Delta t}
 \end{aligned} \tag{2.52}$$

En écrivant la continuité des flux au niveau de chaque facette du domaine, on obtient également le système matriciel final:

$$[Mc] \{Th^{n+1}\} = \{Rc^n\} \tag{2.53}$$

En notant,  $E$  et  $E'$  les éléments situés de part et de l'autre d'une facette  $X$ , répertoriée localement  $F_k^E$  et  $F_l^{E'}$  on peut préciser le vecteur  $\{Rc^n\}$ :

$$Rc_X^n = \overline{Rc}_X^{E,n} + \overline{Rc}_X^{E',n} = \overline{Rc}_{F_k^E}^{E,n} + \overline{Rc}_{F_l^{E'}}^{E',n} \tag{2.54}$$

Avec

$$\begin{aligned}
 \overline{Rc}_{F_k^E}^{E,n} &= -\frac{|E|}{3} \left[ f_E + \sigma^E e^{-\tau^E \Delta t} Thm_k^{E,n} + \frac{s^E}{\Delta t} Th_k^{E,n} \right] \\
 \overline{Rc}_{F_l^{E'}}^{E',n} &= -\frac{|E'|}{3} \left[ f_{E'} + \sigma^{E'} e^{-\tau^{E'} \Delta t} Thm_l^{E',n} + \frac{s^{E'}}{\Delta t} Th_l^{E',n} \right]
 \end{aligned} \tag{2.55}$$

Les coefficients de la matrice  $[Mc]$  sont donnés par les relations suivantes:

❖ Pour les coefficients diagonaux:

$$mc_{XX} = \overline{mc}_{XX}^E + \overline{mc}_{XX}^{E'} = \overline{mc}_{kk}^E + \overline{mc}_{ll}^{E'} \tag{2.56}$$

Avec

$$\begin{aligned}
 \overline{mc}_{kk}^E &= NB_{kk}^E - \frac{|E|}{3} \left[ \sigma^E e^{-\tau^E \Delta t} + \frac{s^E}{\Delta t} \right] \\
 \overline{mc}_{ll}^{E'} &= NB_{ll}^{E'} - \frac{|E'|}{3} \left[ \sigma^{E'} e^{-\tau^{E'} \Delta t} + \frac{s^{E'}}{\Delta t} \right]
 \end{aligned} \tag{2.57}$$

Avec  $NB$  une matrice locale calculée au niveau de chaque élément par

$$\begin{aligned} NB_{kk}^E &= \left[ \frac{\alpha_k^E \alpha_k^E}{\alpha^E} - (B_{kk}^E)^{-1} \right] \\ NB_{kl}^E &= \left[ \frac{\alpha_k^E \alpha_l^E}{\alpha^E} - (B_{kl}^E)^{-1} \right] \end{aligned} \quad (2.58)$$

❖ Pour les coefficients hors-diagonaux:

Si la facette  $Y$  n'appartient pas au même élément que la facette  $X$ , alors:

$$mc_{XY} = 0 \quad (2.59)$$

Si l'élément  $E$  contient les facettes  $X$  et  $Y$ , répertoriées localement avec les indices respectifs  $k$  et  $l$ , alors:

$$mc_{XY} = \overline{mc}_{XY}^E = \overline{mc}_{kl}^E = \frac{\alpha_k^E \alpha_l^E}{\alpha^E} - (B_{kl}^E)^{-1} \quad (2.60)$$

Les termes issus de la discrétisation de la matrice de masse apparaissent uniquement dans les coefficients diagonaux de la matrice  $[Mc]$ . La méthode proposée s'apparente alors effectivement une technique de condensation de la masse.

La résolution du système (2.53) permet de calculer les traces des charges dans les fractures sur toutes les facettes. Ainsi, l'utilisation de l'équation locale (2.49), permet de calculer les traces des charges dans les matrices poreuses.

## 6. Le code de calcul (Ecoulement – Double –Milieu: EDM)

Dans cette partie, nous présentons le code de calcul (EDM) développé dans ce travail pour la simulation de l'écoulement en milieu fracturé. EDM est développé en FORTRAN 95, il est basé sur la méthode des EFMH avec la procédure de condensation de la masse. Pour chaque pas de temps, EDM résout le système linéaire globale (2.53) pour calculer les traces de la charge dans les fractures sur tous les facettes du domaine et ensuite il calcule les traces des charges dans les fractures sur toutes les facettes en utilisant l'équation (2.49). Ainsi en utilisant les équations (2.45) et (2.50), EDM calcule les charges dans les fractures et dans les matrices poreuses sur toutes les mailles. Pour la résolution des systèmes linéaires, on a

implémenté dans EDM un nouveau solveur direct basé sur l'algorithme unifrontal/multifrontal (Davis and Duff, 1999). Ce solveur est inclus dans la librairie UMFPACK 2.2. Dans les cas où la matrice du système linéaire est constante (comme la matrice obtenue pour l'écoulement en milieu fracturé  $[Mc]$ ) le solveur UMFPACK permet de réduire le temps de calcul en décomposant la matrice en LU uniquement pour le premier pas de temps.

L'algorithme utilisé dans EDM est présenté dans la figure (2.3) :

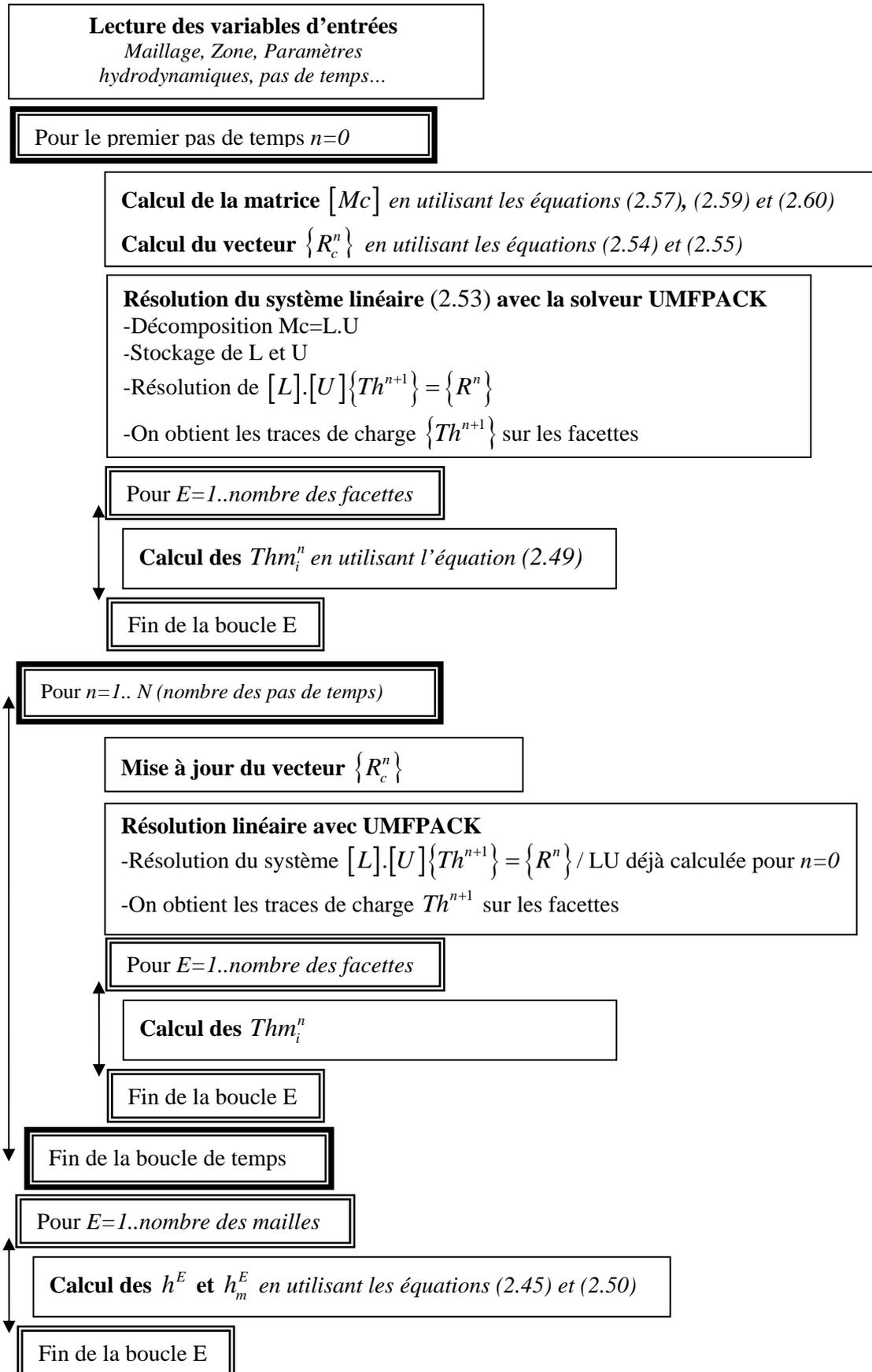


Figure 2.3 : Algorithme du code EDM.

## 7. Validation du code EDM

Dans cette partie, le code EDM est validé en termes de précision et d'efficacité:

### 7.1. En terme de précision

Les résultats du code EDM sont validés par comparaison avec la méthode des EFMH standard et avec l'approche de séparation d'opérateur.

#### 7.1.1. Comparaison avec la méthode des EFMH

Pour comparer le code EDM avec la méthode des EFMH standard, on a utilisé les cas tests suivants:

- Premier cas test:

On considère un domaine rectangulaire de longueur  $L = 200m$  et de largeur  $l = 100m$ . Les conditions aux limites sont données sur la figure (2.4). Sur cette figure on distingue des conditions de Neumann (flux nul) sur toute la frontière à l'exception du segment  $\delta$  où on impose une condition de Dirichlet ( $h = 100m$ ). Pour les conditions initiales on suppose que  $h = h_m = 0$  dans tout le domaine. Les paramètres hydrodynamiques du milieu sont :  $k = 1.10^{-5} m.s^{-1}$ ,  $s = 1.10^{-6} m^{-1}$ ,  $s_m = 3.10^{-5} m^{-1}$  et  $\sigma = 5.10^{-10} m.s^{-1}$ . La durée de la simulation est  $T = 48$  heures.

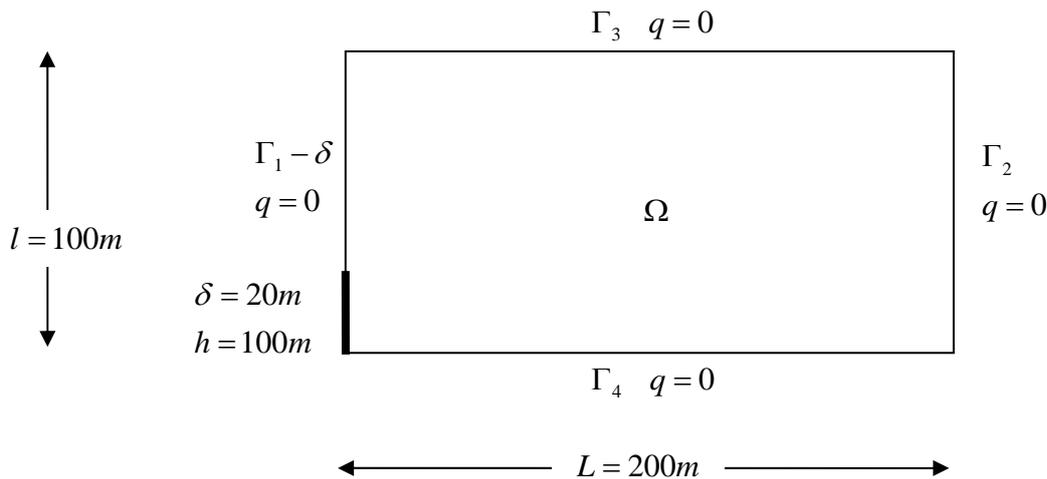


Figure 2.4: Domaine géométrique et conditions aux limites pour le premier cas test.

Ce cas test est simulé avec le code EDM en utilisant un pas de temps  $\Delta t = 0.1s$ . Pour la discrétisation spatiale on a utilisé un maillage triangulaire irrégulier formé par 1750 éléments

(2.5). La distribution de la charge ainsi que le champ de vitesse sont représentés dans la figure (2.6).

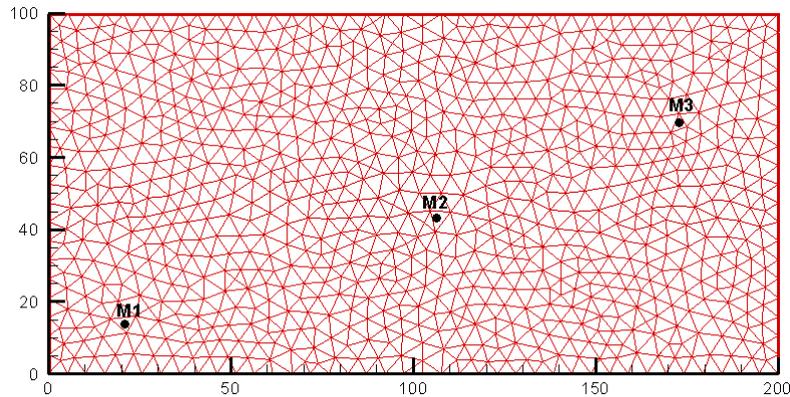


Figure 2.5 : Maillage utilisé pour les simulations

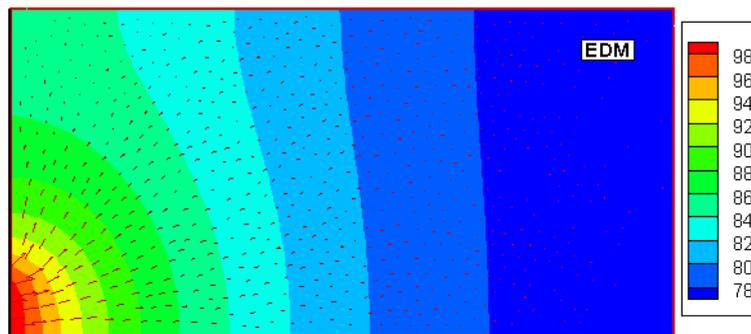


Figure 2.6 : La distribution spatiale de la charge hydraulique et le champ de vitesse obtenus par le code EDM.

Ce cas test est aussi simulé avec le code EDM mais en utilisant un grand pas de temps ( $\Delta t = 100s$ ). La figure (2.7) représente les variations de la charge en fonction du temps sur trois points du domaine (M1, M2, M3 voir figure 2.5) obtenues avec le code EDM pour  $\Delta t = 0.1s$  et  $\Delta t = 100s$ . Cette figure montre que le code EDM converge vers la même solution pour le grand et le petit pas de temps. En effet le schéma numérique utilisé pour la discrétisation temporelle (premier ordre) introduit une erreur numérique proportionnelle au pas de temps. Cependant dans notre cas, cette erreur est négligeable à cause de la propriété diffusive du système.

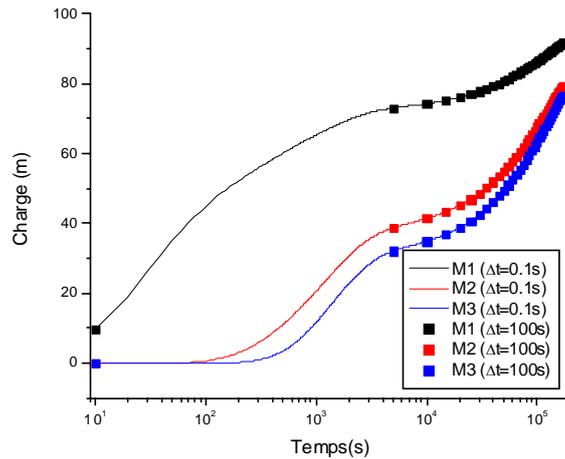


Figure 2.7 : Variations de la charge en fonction du temps sur M1, M2 et M3.

Le même cas test est simulé aussi avec la méthode des EFMH pour  $\Delta t = 0.1s$  et  $\Delta t = 100s$ . La figure (2.8) montre que le code EDM et la méthode des EFMH convergent vers les mêmes solutions. Cependant pour  $\Delta t = 0.1s$ , la solution par la méthode des EFMH présente des charges négatives (la plus petite valeur est de  $-3.10^{-1}$ ). La procédure de condensation de la masse utilisée dans le code EDM permet d'éviter ce problème (les charges dans tout le domaine sont entre 0 et 100) sans l'introduction d'erreurs numériques supplémentaires.

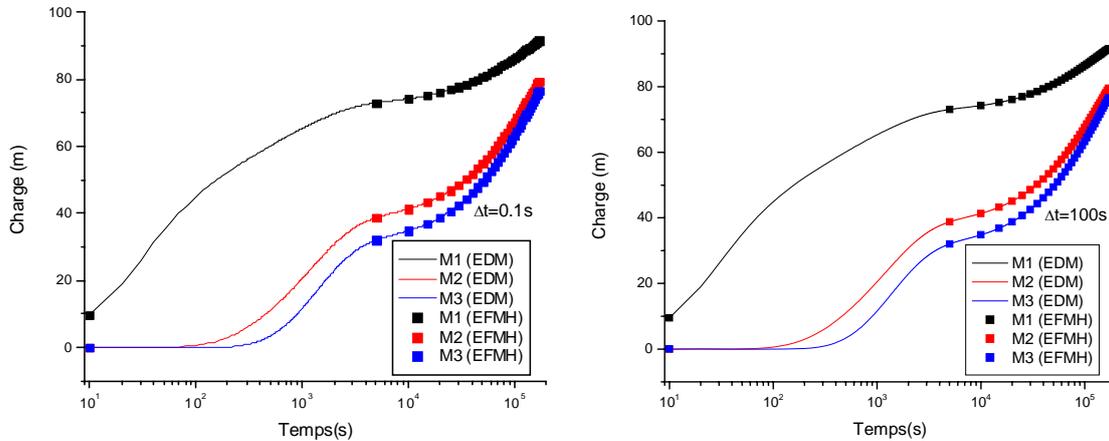


Figure 2.8 : Variation de la charge en fonction du temps sur M1, M2 et M3 avec le code EDM et la méthode des EFMH.

## 2<sup>ème</sup> cas test: Effet d'un terme puits/source

Pour étudier l'effet du terme puits/source, on considère une 2<sup>ème</sup> expérience numérique basée sur le premier cas test mais en ajoutant un terme puits ( $F = -1.10^{-3} s^{-1}$ ) au centre du domaine. Les résultats obtenus pour  $\Delta t = 0.1s$  et  $\Delta t = 100s$  avec le code EDM et la méthode

des EFMH sont présentés sur la figure (2.9). Cette figure montre que le terme puits n'a pas d'influence sur le comportement du code EDM et de la méthode des EFMH.

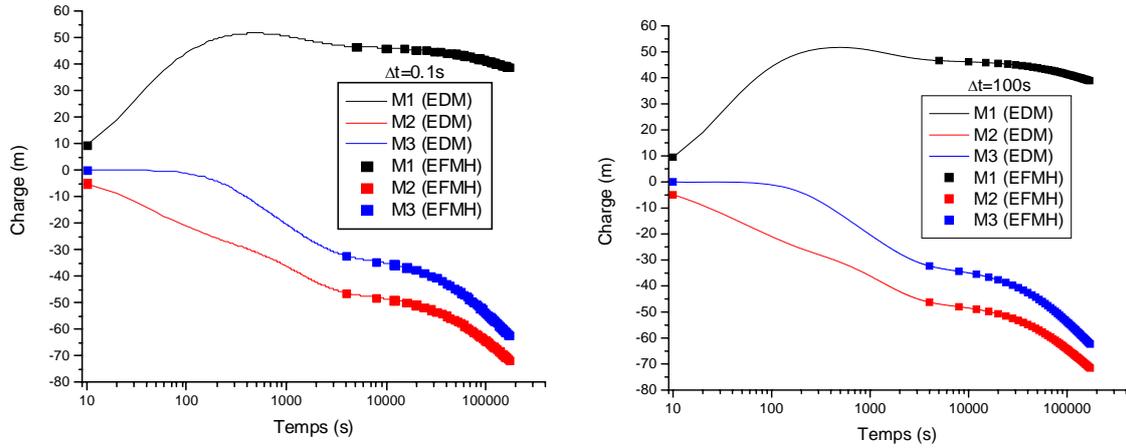


Figure 2.9: Variation de la charge en fonction du temps sur M1, M2 et M3 avec le code EDM et la méthode des EFMH pour le 2<sup>ème</sup> cas test

### 3<sup>ème</sup> cas test: Effet de l'hétérogénéité

Dans cette partie, on cherche à étudier l'influence de l'hétérogénéité sur le code EDM. Ainsi on considère une 3<sup>ème</sup> expérience numérique basé sur le deuxième cas test mais en supposant que le domaine spatiale est hétérogène et que cette hétérogénéité est répartie sur trois zones. Les paramètres dans ces zones sont présentés dans le tableau 2.1. La répartition géométrique des zones est donnée par la figure (2.10).

Paramètre	$k$	$s$	$s_m$	$\sigma$
Zone 1	$1.10^{-5}$	$1.10^{-6}$	$3.10^{-5}$	$5.10^{-10}$
Zone 2	$4.10^{-5}$	$3,5.10^{-6}$	$3.10^{-5}$	$3.10^{-11}$
Zone 3	$8.10^{-5}$	$7.10^{-6}$	$3.10^{-5}$	$10^{-11}$

Tableau 2.1 : Les paramètres hydrodynamiques pour le 3<sup>ème</sup> cas test.

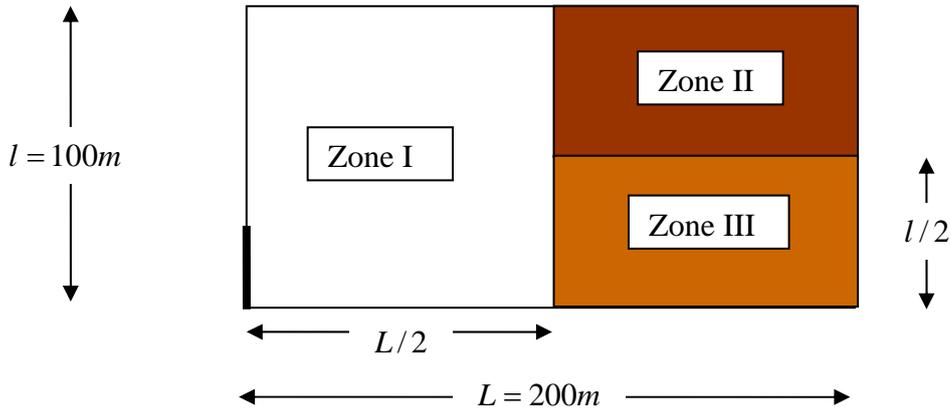


Figure 2.10 : Répartition géométrique des zones pour le 3<sup>ème</sup> cas test.

De la même façon, ce cas test est simulé avec  $\Delta t = 0.1s$  et  $\Delta t = 100s$ . Les résultats de ces simulations sont présentés dans la figure (2.11). Cette figure montre que le code EDM permet de prendre en compte l'hétérogénéité du domaine sans introduire des erreurs numériques supplémentaires.

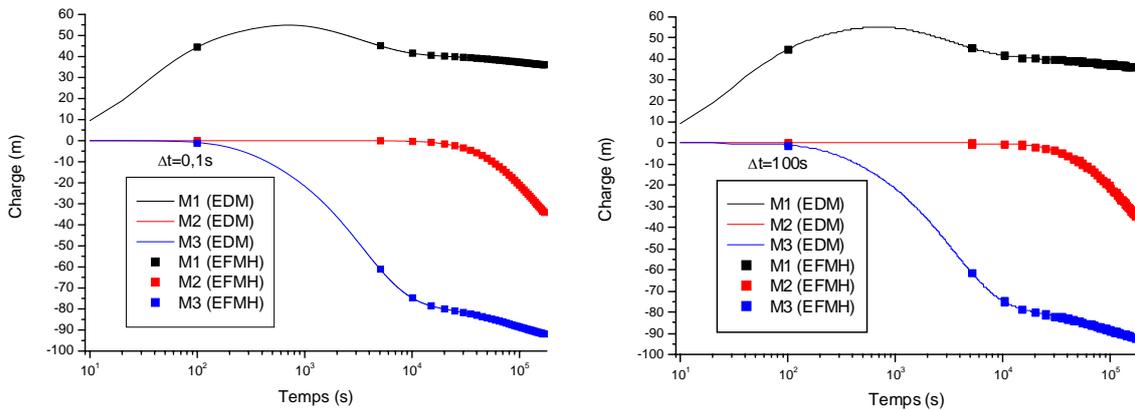


Figure 2.11 : La variation de la charge en fonction du temps sur M1, M2 et M3 avec le code EDM et la méthode des EFMH pour le 3<sup>ème</sup> cas test.

Les résultats de ces trois cas test montrent l'aptitude du code EDM à simuler des écoulements en milieu fracturé homogène et hétérogène sans ou avec terme puits/source. Ainsi ces résultats montrent que la procédure de condensation de la masse utilisée dans le code EDM permet d'éviter les oscillations non physiques introduites par la méthode des EFMH sans aucune erreur numérique supplémentaire.

7.1.2. *Comparaison entre EDM et l'approche de séparation d'opérateur (OS)*

Le couplage entre les équations de continuité dans les fractures et les matrices poreuses est assuré dans le code EDM par une approche globale. Cette approche consiste à calculer simultanément les charges dans les fractures et dans les matrices poreuses. Dans cette partie, les résultats du code EDM sont validés par comparaison avec l'approche (OS), qui consiste à résoudre séquentiellement les équations d'écoulement dans les fractures et les matrices poreuses. L'approche (OS) est largement utilisée dans la littérature de milieu poreux et surtout pour simuler les phénomènes de transfert de masse. Pour le transport non réactif, cette approche a été utilisée pour séparer les opérateurs d'advection et de dispersion afin d'utiliser des méthodes numériques appropriées pour chaque opérateurs (Dawson et al., 1998 ; Konikow et Bredehoeft, 1978; Ewing, 1988). Pour le transport réactif, l'approche (OS) est utilisée pour résoudre séquentiellement les opérateurs de transport et de chimie, ce qui permet de réduire les tailles des systèmes à résoudre (Cederberg et al., 1985; Yeh and Tripathi, 1989, 1990; Saaltink et al., 2001). Malgré ces avantages, l'approche (OS) a un inconvénient majeur qui est la précision. En effet, plusieurs travaux ont démontré que dans certains cas, cette approche introduit des erreurs intrinsèques. Pour le transport non réactif, l'erreur de séparation d'opérateurs est négligeable. Dans le cas de transport réactif avec des réactions cinétiques, ces erreurs dépendent des phénomènes chimiques pris en compte (Valocchi and Malmstead, 1992 ; Carrayrou et al., 2004). Pour le transport réactif avec réactions à l'équilibre, les erreurs de séparation d'opérateurs sont plus importantes. Elles sont proportionnelles au pas de temps utilisé pour la discrétisation temporelle et se présentent sous la forme d'une diffusion numérique (Herzer and Kinzelbach, 1989).

Pour la simulation de l'écoulement en milieu fracturé, l'approche (OS) nécessite, pour chaque pas de temps, les deux étapes suivantes :

Première étape: Résolution de l'équation de continuité dans les fractures sans prendre en compte le terme d'échange avec les matrices poreuses. Ainsi on résout l'équation suivante:

$$s \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot q = f \quad (2.61)$$

$$q = -k \nabla h \quad (2.62)$$

Ces deux équations sont résolues avec la formulation condensée de la méthode des EFMH.

Deuxième étape : la résolution d'un système local des équations différentielles ordinaires (EDO) afin de prendre en compte l'effet des matrices poreuses. Le système ODE est écrit sur chaque facette, il est donné par:

$$\begin{aligned}\frac{dTh_i^E}{dt} &= \left( \frac{\sigma^E + \sigma^{E'}}{s^E + s^{E'}} \right) (Thm_i^E - Th_i^E) \\ \frac{dThm_i^E}{dt} &= - \left( \frac{\sigma^E + \sigma^{E'}}{s^E + s^{E'}} \right) (Thm_i^E - Th_i^E)\end{aligned}\tag{2.63}$$

Où  $E$  et  $E'$  sont les deux mailles ayant en commun l'arête  $E_i$ .

Le système (2.63) est résolu localement (au niveau de chaque facette) avec la méthode de Runge-Kutta à l'ordre 4 et en utilisant un pas de temps plus petit que celui utilisé dans la première étape.

Pour implémenter l'approche (OS), on a utilisé un code de calcul pour l'écoulement en milieu poreux saturé basé sur la méthode des EFMH avec condensation de la masse (développé au laboratoire) où on a introduit la résolution local du système (2.63).

Pour comparer le code EDM avec l'approche (OS) on a utilisé les trois cas tests présentés ci-dessus. Ainsi on a simulé avec l'approche OS ces trois cas tests en utilisant un petit ( $\Delta t = 0.1s$ ) et un grand ( $\Delta t = 100s$ ) pas de temps. Les résultats obtenus sont présentés respectivement dans les figures (2.12), (2.13) et (2.14).

Les trois figures (2.12), (2.13) et (2.14) montrent que pour les petits pas de temps, le code EDM et l'approche (OS) convergent vers les mêmes solutions (pour les trois cas tests). En effet, pour des petits pas de temps, les erreurs numériques introduites par l'approche (OS) sont négligeables. Pour des grands pas de temps, on remarque des écarts entre les résultats obtenus par le code EDM et l'approche OS. Cette différence se présente sous la forme d'une diffusion numérique, elle est due aux erreurs de séparation d'opérateur introduites par l'approche (OS).

Finalement, les comparaisons de code EDM avec la méthode des EFMH standard et avec l'approche (OS), permettent de valider les résultats de ce code et de montrer ses avantages. En effet, EDM permet d'éviter les oscillations non physiques rencontrées avec la méthode des EFMH standard sans introduire des erreurs numériques supplémentaires. L'utilisation d'une approche globale dans ce code permet d'utiliser des grands pas de temps sans introduire des erreurs numériques intrinsèques.

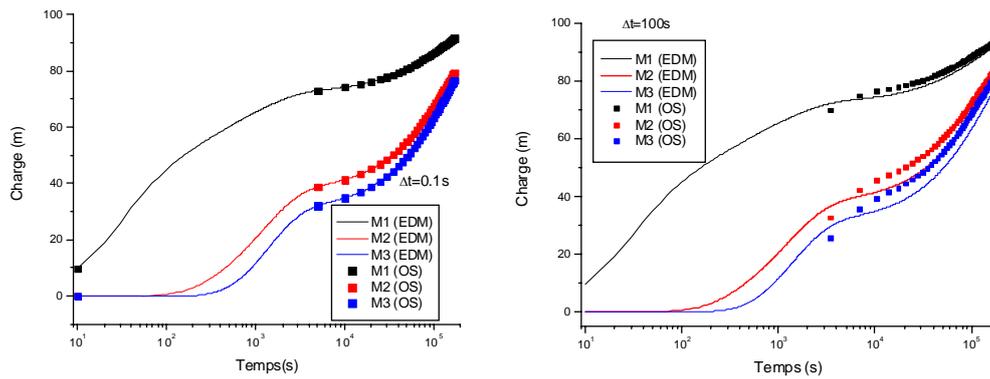


Figure 2.12: la variation de la charge en fonction du temps sur M1, M2 et M3 avec le code EDM et l'approche OD pour le 1<sup>er</sup> cas test.

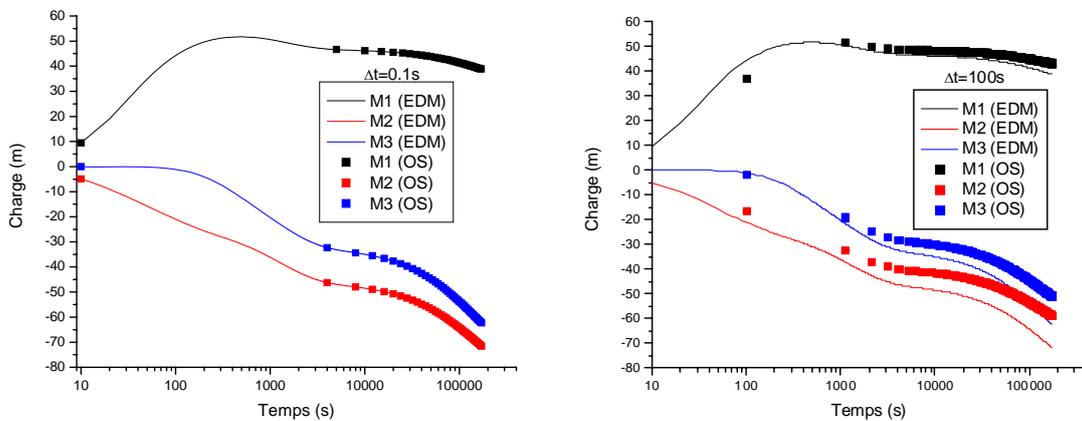


Figure 2.13: La variation de la charge en fonction du temps sur M1, M2 et M3 avec le code EDM et l'approche OD pour le 2<sup>ème</sup> cas test.

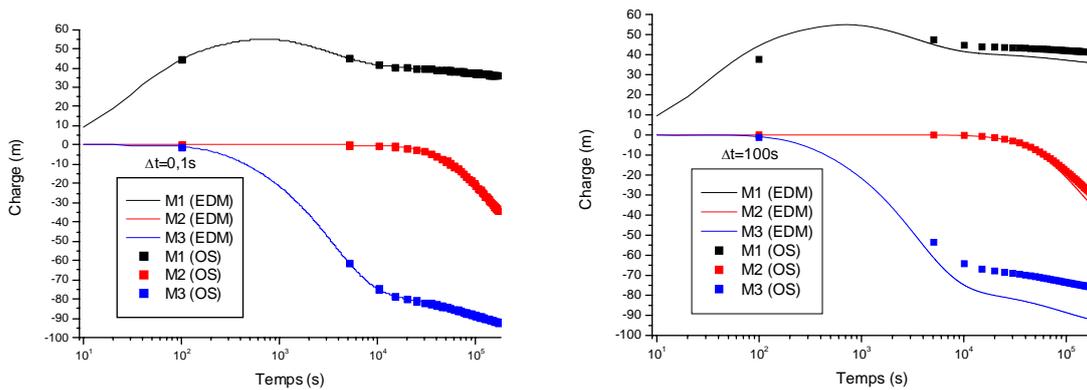


Figure 2.14: La variation de la charge en fonction du temps sur M1, M2 et M3 avec le code EDM et l'approche OD pour le 3<sup>ème</sup> cas test.

## 7.2. En terme d'efficacité

L'efficacité du code EDM (temps de calcul) est validée par comparaison entre le solveur direct UMFPACK (implémenté dans EDM) et le solveur itératifs PGCET basé sur la méthode des gradients conjugués.

Le premier cas test est utilisé pour cette comparaison. Plusieurs simulations ont été réalisées en raffinant le maillage (de 1700 à 108000 éléments). Les temps de calcul obtenus par les deux solveurs sont présentés dans le tableau 2.2. Sur ce tableau on présente aussi les temps de calcul du code EDM avec le solveur UMFPACK en recalculant la décomposition LU de la matrice après chaque pas de temps (2<sup>ème</sup> colonne). Le tableau 2.2 montre que l'option «matrice constante» dans UMFPACK permet un gain important en temps de calcul. Ainsi ce tableau montre que le solveur UMFPACK est plus efficace que le solveur itératif PGCT.

Nombre d'éléments	UMFPACK (matrice constante)	UMFPACK (matrice variable)	PGCET
1 700	0.093	0.578	2.154
20 000	1.546	13.0625	59.56
57 000	5.109	58.406	309.55
108 000	12.943	159.45	708.450

Tableau 2.2: Les temps de calcul (en second) obtenus par les solveurs UMFPACK et PGCET.

## 8. Conclusion

Le modèle DP est adopté dans ce chapitre pour la modélisation de l'écoulement en milieu poreux saturés. Ce modèle repose sur trois équations qui sont : l'équation de continuité dans les fractures, la loi de Darcy dans les fractures et l'équation de continuité dans les matrices poreuses. Un code de calcul (EDM) basé sur la formulation condensée de la méthode des EFMH est développé pour la résolution de ces équations. Un nouveau solveur linéaire direct (UMFPACK) est implémenté dans le code EDM afin de minimiser les temps de calcul. Les résultats du code EDM sont validés sur plusieurs expériences numériques par comparaison avec la méthode des EFMH standard et avec l'approche de séparation d'opérateurs. L'efficacité du code EDM est étudiée par comparaison entre solveur direct et solveur itératif. Dans le chapitre suivant, le code EDM sera utilisé pour la résolution du problème direct dans l'algorithme d'estimation des paramètres.



## Chapitre 3

# Résolution du problème inverse

- 1. Généralité**
- 2. Technique de résolution du problème inverse**
  - 2.1 Méthodes inverses directes
  - 2.2 Méthodes inverses indirectes
    - 2.2.1 *Méthodes déterministes et méthodes bayésiennes*
    - 2.2.2 *Méthodes linéaires et méthodes non – linéaires*
- 3. Optimisation des paramètres avec les méthodes non-linéaires**
  - 3.1 Minimisation de la fonction 'objectif'
    - 3.1.1 *Méthodes globales et méthodes locales*
  - 3.2 Méthodes à directions de descente
    - 3.2.1 *Algorithme du gradient (steepest Descent method)*
    - 3.2.2 *Algorithme du gradient conjugué*
    - 3.2.3 *Algorithme de Newton*
    - 3.2.4 *Algorithme de Quasi - Newton*
    - 3.2.5 *Algorithme de Gauss - Newton*
    - 3.2.6 *Algorithme de Marquardt - Levenberg*
- 4. Calcul des Gradients de la fonction 'objectif'**
  - 4.1 Méthode des différences finies
  - 4.2 Méthode des sensibilités
- 5. Le modèle numérique INV\_EDM pour l'estimation des paramètres en double milieu**
  - 5.1 La fonction 'objectif'
  - 5.2 Les paramètres à estimer
  - 5.3 Calcul du gradient (milieu homogène)
  - 5.4 Calcul du gradient (milieu hétérogène: 2 zones)
  - 5.5 La matrice Jacobienne
- 6. L'algorithme du code INV\_EDM**
- 7. Expériences numériques**
  - 7.1 Convergence en fonction des paramètres initiaux
- 8. Conclusion**

## 1. Généralité

Un problème d'estimation de paramètres par approche inverse consiste à rechercher les coefficients d'une équation aux dérivées partielles à partir de mesures de la variable d'état. Il est formulé comme un problème de minimisation, la variable de minimisation étant le vecteur des paramètres à estimer, et la fonction à minimiser étant une évaluation de la différence entre la variable calculée par le modèle avec un jeu donné de paramètres et celle observée.

Les problèmes inverses sont généralement difficiles à résoudre. Ils sont souvent mal posés au sens de Hadamard (Hadamard, 1952), (*Un problème inverse mal posé* est un problème dont la solution n'existe pas, ou si elle existe, n'est pas unique ou ne dépend pas de façon continue

des données). En effet, on parle d'**inexistence** lorsqu'aucune fonction satisfaisant les équations du système n'existe, de **non – unicité** lorsque plus d'une solution existe, c'est à dire lorsque différentes combinaisons de valeurs de paramètres permettent un ajustement optimum sur les observations, et d'**instabilité** lorsque de faibles variations des données d'entrées modifient de manière importante les résultats du modèle. On parle également d'**insensibilité** lorsque les observations ne contiennent pas assez d'information pour assurer l'estimation des paramètres. D'autres difficultés spécifiques sont dues à des temps de calcul importants liés à la grande taille des systèmes à résoudre et aux choix de la paramétrisation.

Pour bien résoudre un problème inverse, il faut d'abord assurer:

- le bon choix de la formulation: choix des paramètres à estimer, de la fonction à minimiser, le problème de minimisation associé est plus ou moins bien posé et enfin la bonne compréhension du problème physique ;
- une paramétrisation pertinente ;
- l'efficacité et la robustesse de la résolution du problème direct: amélioration des méthodes numériques pour la résolution du problème direct ;
- l'optimisation: adopter des méthodes efficaces adaptées aux difficultés de ce problème (grande taille, coût de la fonction à minimiser).

Ces quatre étapes seront nécessaires pour assurer la bonne présentation du problème inverse ainsi que pour la validité de la solution ou des paramètres à estimer.

Dans ce chapitre, on cherche à identifier les paramètres par approche inverse pour l'écoulement en milieu fracturé. Sachant que le modèle DP est adopté pour le problème direct, les paramètres à estimer sont les coefficients des équations aux dérivées partielles de ce modèle (voir chapitre 2).

Dans un premier temps, nous allons présenter les différentes techniques de résolution du problème inverse et, dans un second temps, nous développerons un modèle numérique pour l'estimation des paramètres pour l'écoulement en milieu fracturé.

## **2. Technique de résolution du problème inverse**

Des nombreuses méthodes existent pour la résolution du problème inverse. Yeh (1986) et McLaughlin and Townley (1996) proposent des synthèses complètes de ces méthodes. L'historique du développement de ces différentes approches est donné par La Venue (1998) et de Marsily et *al.* (1999). Neuman (1973) a regroupé toutes les méthodes de résolution du

problème inverse en deux catégories: les méthodes inverses directes et les méthodes inverses indirectes.

### 2.1 Méthodes inverses directes

Les méthodes inverses directes (Nelson, 1960, 1961, 1968) consistent à formuler le problème inverse en utilisant les valeurs des paramètres comme des inconnus. Pour simplifier la présentation de cette méthode, on se limite dans ce paragraphe à identifier le paramètre  $\beta$  dans l'équation de diffusion suivante (régime permanent):

$$\nabla \cdot (-\beta \nabla u) = f \quad (3.1)$$

L'idée des méthodes directes est de résoudre l'équation (3.1) directement dont l'inconnue est le paramètre  $\beta$ , en supposant que la variable d'état ( $u$ ) soit connue. En manipulant cette équation algébriquement, on peut l'écrire sous la forme suivante:

$$\nabla u \cdot \nabla \beta + (\Delta u) \beta = -f \quad (3.2)$$

L'équation de base, qui est une équation aux dérivées partielles du second ordre, devient une équation aux dérivées partielles du premier ordre dans laquelle les valeurs du paramètre  $\beta$  sont les inconnues. Les méthodes inverses directes nécessitent la connaissance de la variable d'état en tous points du domaine ainsi que leurs dérivées première et seconde. Puisque on ne dispose que de quelques mesures de la variable d'état, les données manquantes sont estimées par interpolation. Une erreur associée à cette interpolation est alors introduite sous forme d'un terme d'erreur dans l'équation (3.2), qui est ensuite minimisée par le choix des paramètres. Cette approche est qualifiée «directe» puisque le problème peut être résolu directement de manière non itérative. Elle est peu utilisée en raison de la grande sensibilité de la solution obtenue aux erreurs sur les variables d'état. De plus, ces méthodes ont été peu à peu abandonnées depuis une dizaine d'années au profit des techniques inverses indirectes en raison de la maturation de ces dernières et du développement intense des ordinateurs.

### 2.2 Méthodes inverses indirectes

Les méthodes inverses indirectes tentent, par modification des paramètres initiaux, de minimiser un critère basé sur la différence entre les variables mesurées et calculées aux divers points d'observation. Les paramètres optimisés produisent ainsi le meilleur ajustement des valeurs de la variable d'état pour le modèle conceptuel donné. La figure (3.1) présente l'approche générale utilisée par les méthodes inverses indirectes.

L'avantage de ces approches inverses indirectes par rapport aux approches directes est que la formulation du problème inverse est applicable aux situations pour lesquelles les observations sont peu nombreuses et mal réparties. Les méthodes indirectes conduisent généralement à de meilleures solutions (Carrera et Neuman, 1986).

Un grand nombre de méthodes indirectes de résolution du problème inverse ont été développées. Les différences principales entre toutes ces techniques proviennent de la conceptualisation adoptée pour le champ des paramètres (distinction entre méthodes déterministes et méthodes bayésiennes) et de la formulation des équations reliant ce champ à la distribution des paramètres (distinction entre méthodes linéaires et méthodes non - linéaires).

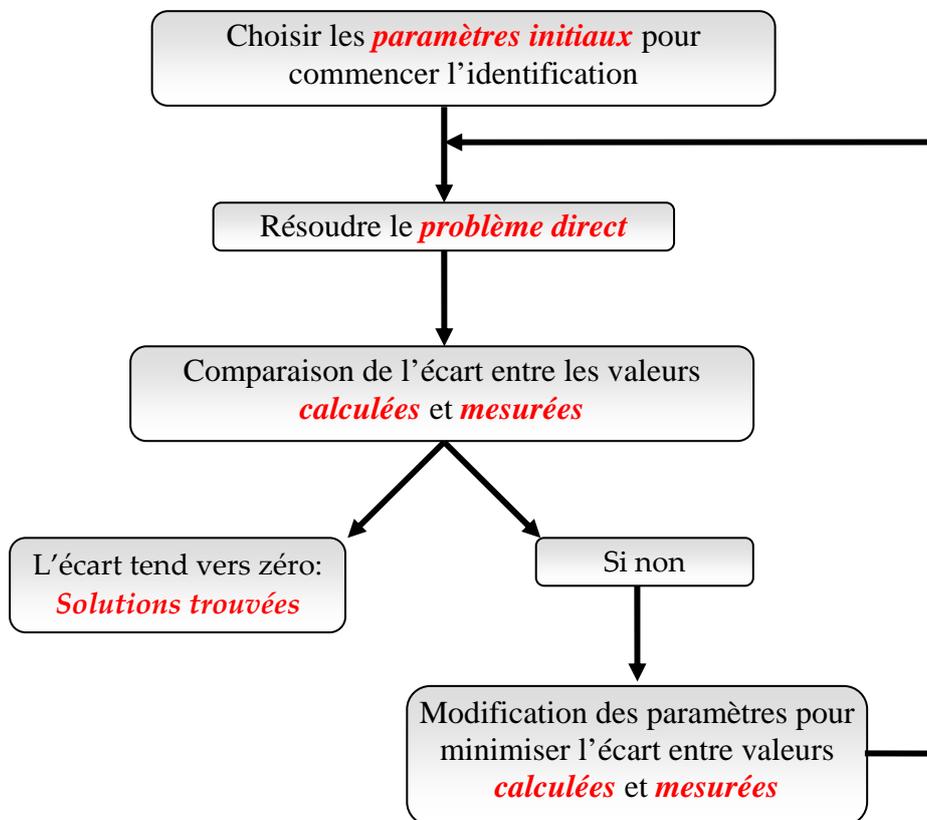


Figure 3.1 : Approche générale d'identification des paramètres

### 2.2.1 Méthodes déterministes et méthodes bayésiennes

Les hypothèses faites sur le champ des paramètres se basent sur la conceptualisation que le modélisateur a de ce champ inconnu. Il existe deux interprétations distinctes: le premier point de vue, qualifié de *déterministe*, considère le champ réel des paramètres comme unique et inconnu. L'incertitude associée à ce champ provient de notre incapacité à effectuer des mesures précises de la propriété, conduisant à une erreur d'estimation considérée comme

aléatoire et de distribution normale. Au contraire, les méthodes *bayésiennes* considèrent les paramètres comme des fonctions aléatoires : le champ réel des paramètres est une réalisation du champ aléatoire de moyenne constante connue et de covariance imposée. McLaughlin et Townley (1996) ont examiné ces deux points de vue de manière rigoureuse, ainsi que leurs implications sur la formulation du problème inverse.

### 2.2.2 Méthodes linéaires et méthodes non - linéaires

Une autre distinction faite sur les nombreuses méthodes indirectes réside dans la formulation des équations reliant le champ des paramètres à la distribution de ces paramètres. Cette distinction permet de répartir les méthodes indirectes en deux catégories: les méthodes linéaires et les méthodes non – linéaires.

Dans les méthodes *linéaires* (Kitanidis et Vomvoris, 1983 ; Hoeksema et Kitanidis, 1984 ; Rubin et Dagan, 1987a), un modèle décrivant la variabilité spatiale du champ des paramètres est proposé. Dans l'équation différentielle utilisée pour relier la variabilité spatiale des variables d'états à la variabilité spatiale du logarithme des paramètres, les champs des variables d'états et du logarithme des paramètres sont chacun décomposés en une composante déterministe correspondant à un champ de valeurs moyennes et en une composante stochastique représentée par un champ de perturbations constitué de faibles variations autour de la valeur moyenne en chaque élément. Une relation stochastique linéaire est alors établie entre les perturbations des variables d'état et du logarithme des paramètres. Les paramètres sont alors optimisés par une méthode de Gauss–Newton, en comparant les valeurs mesurées des paramètres et les valeurs estimées aux points donnés.

Les méthodes *non – linéaires* utilisent une procédure itérative pour optimiser les paramètres: les étapes de résolution du système direct, de vérification de l'ajustement entre les valeurs calculées et observées et de modification du champ des paramètres pour améliorer l'ajustement sont répétées jusqu'à ce que la différence entre les valeurs mesurées et calculées atteigne un minimum. Le critère à minimiser, souvent appelé *fonction 'objectif'*, est typiquement exprimé soit par une fonction pondérée au sens de moindres carrés, soit par une fonction de vraisemblance.

Zimmerman et al. (1998) ont comparé les résultats obtenus par diverses méthodes de résolution du problème inverse sur des cas communs. Cet exercice a mis en évidence la supériorité des méthodes non - linéaires par rapport aux méthodes linéaires. Dans la suite de

ce travail, nous allons utiliser la méthode non – linéaire pour la formulation du problème inverse.

### 3. Optimisation des paramètres avec les méthodes non-linéaires

Avec les méthodes non-linéaires, l'optimisation des paramètres conduit à minimiser une fonction objective ( $J$ ) définie comme étant la somme pondérée du carré des écarts entre les observations et les valeurs calculées numériquement. Pour simplifier la présentation, on considère les définitions mathématiques suivantes:

On considère la fonction ‘objectif’ suivante :

$$J(\alpha) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{Nm} W_i (u_i - u_i^{mes})^2 \quad (3.3)$$

Avec  $\alpha = (\alpha^1, \alpha^2, \dots, \alpha^{Np})$  est le vecteur des paramètres à estimer ( $Np$  étant le nombre total des paramètres),  $u$  représente la variable d'état calculée en utilisant un modèle numérique. Sachant que le modèle numérique nécessite un maillage pour la discrétisation spatiale, soit  $Nm$  le nombre des éléments dans ce maillage et soit  $u^{mes}$  les valeurs mesurées de la variable d'état.  $W_i$  est donné par:

$$W_i = \begin{cases} 1 & \text{s'il y a un point de mesure sur (i)} \\ 0 & \text{si non} \end{cases} \quad (3.4)$$

Donc le problème d'optimisation peut être écrit sous la forme suivante:

$$\min(J(\alpha))_{\alpha \in \mathbb{R}^{Np}} \quad (3.5)$$

où  $J$  est la fonction ‘objectif’,  $\alpha$  représente les paramètres  $\alpha = (\alpha^1, \alpha^2, \dots, \alpha^{Np})$  et  $Np$  le nombre des paramètres. On note aussi  $\nabla J(\alpha)$  et  $\nabla^2 J(\alpha)$  le gradient et le Hessian de la fonction ( $J$ ) donnés par:

$$\nabla J(\alpha) = \begin{bmatrix} \frac{\partial J}{\partial \alpha^1} \\ \frac{\partial J}{\partial \alpha^2} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \frac{\partial J}{\partial \alpha^{Np}} \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

$$\nabla^2 J(\alpha) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 J}{\partial \alpha^1 \partial \alpha^1} & \frac{\partial^2 J}{\partial \alpha^1 \partial \alpha^2} & \cdot & \cdot & \frac{\partial^2 J}{\partial \alpha^1 \partial \alpha^{Np}} \\ & \frac{\partial^2 J}{\partial \alpha^2 \partial \alpha^2} & & & \frac{\partial^2 J}{\partial \alpha^2 \partial \alpha^{Np}} \\ & & \cdot & & \cdot \\ & & & \cdot & \cdot \\ \text{Symétrique} & & & & \frac{\partial^2 J}{\partial \alpha^{Np} \partial \alpha^{Np}} \end{bmatrix} \quad (3.7)$$

On notera aussi un produit scalaire par  $\langle .. \rangle$  sur  $R^{Np}$  et  $\| \cdot \| = \langle .. \rangle^{\frac{1}{2}}$  représente la norme associée à ce produit.

La matrice Jacobienne définie par les dérivées des variables d'état par rapport aux paramètres est:

$$\mathcal{J}(\alpha) = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial \alpha^1} & \frac{\partial u_1}{\partial \alpha^2} & \cdots & \frac{\partial u_1}{\partial \alpha^{Np}} \\ \frac{\partial u_2}{\partial \alpha^1} & \frac{\partial u_2}{\partial \alpha^2} & \cdots & \frac{\partial u_2}{\partial \alpha^{Np}} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial u_{Nm}}{\partial \alpha^1} & \frac{\partial u_{Nm}}{\partial \alpha^2} & \cdots & \frac{\partial u_{Nm}}{\partial \alpha^{Np}} \end{bmatrix} \quad (3.8)$$

Le but d'un algorithme d'optimisation est trouver le minimum de la fonction 'objectif' en effectuant le moins d'opérations mathématiques possibles.

### 3.1 Minimisation de la fonction ‘objectif’

Dans de nombreux cas de problèmes non – linéaires, outre le minimum global, la fonction ‘objectif’ peut posséder des minimums locaux (figure 3.2). Un algorithme de minimisation peut ne pas détecter un minimum global et s’arrêter à un minimum local. En se basant uniquement sur des informations locales, aucun algorithme ne distingue un minimum local comme  $M'$  d’un minimum global  $M$  (figure 3.3). Dans le but de trouver le minimum global, il est donc nécessaire de minimiser la fonction ‘objectif’ en commençant par une variété de points de départ différents. Dans l’exemple de la figure (3.3), un algorithme robuste sera capable de trouver  $M$  seulement s’il débute à partir d’un point quelconque situé à gauche de  $M''$ .

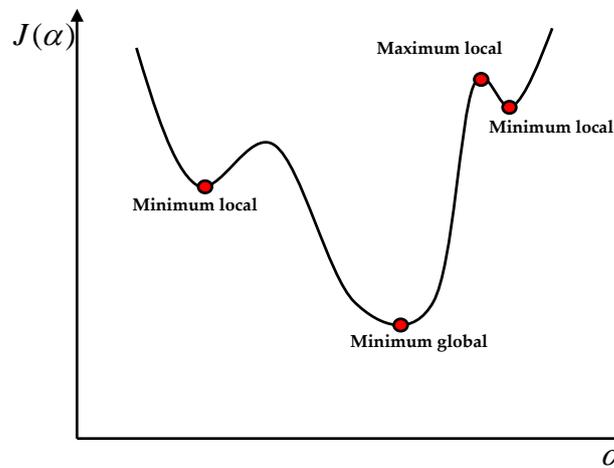


Figure 3.2 : Minima locaux et minimum global pour une fonction à un paramètre  $\alpha$

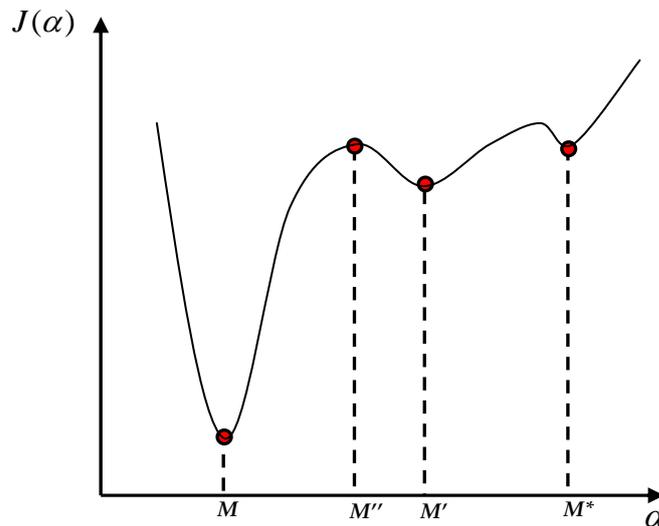


Figure 3.3: Fonction moindre carrée

Les méthodes de minimisation sont réparties en deux catégories: les méthodes locales et les méthodes globales.

### 3.1.1 Méthodes globales et méthodes locales

Les *méthodes globales* simulent un échantillon de paramètres en exploitant uniquement l'information fournie par le calcul de  $J(\alpha)$  (comme les *algorithmes génétiques ou de recuit simulé*).

En fait, pour obtenir le minimum global d'une fonction en utilisant les méthodes globales, il serait nécessaire de parcourir tout l'espace des variables indépendantes, ce qui est généralement impossible vu la grandeur de l'espace, le nombre de variables et le temps de calcul prohibitif.

Il est connu que toute fonction ayant un minimum peut être assez bien approchée par une parabole près du minimum (développement limité). En effet, on peut exprimer la fonction  $J$  en  $\alpha$  en série de Taylor:

$$J(\alpha + \Delta\alpha) = J(\alpha) + \frac{dJ}{d\alpha}(\alpha)\Delta\alpha + \dots \quad (3.9)$$

A partir de ce développement, on peut définir les méthodes locales qui utilisent, en plus du calcul de  $J$ , les informations sur les gradients de cette fonction.

Les *méthodes locales* actualisent un point  $\alpha$  du domaine en exploitant uniquement l'information fournie par le calcul de  $J(\alpha)$  et des valeurs:

- du critère en des points voisins de  $(\alpha)$  (comme *méthodes de simplexe*) ;
- de  $\nabla J(\alpha)$  (*méthodes de gradient*) ;
- éventuellement de  $\nabla^2 J(\alpha)$  (*méthodes Newtoniennes*).

Dans ce travail, on s'intéresse aux méthodes locales et surtout aux algorithmes fondés sur la notion de *directions de descente*.

### 3.2 Méthodes à directions de descente

La méthode à directions de descente est la plus ancienne et la plus largement connue. On commencera tout d'abord par quelques définitions mathématiques concernant la présentation de cette méthode.

**Définition:** une direction  $d$  est une direction de descente (pour  $J$ ) en  $\alpha$  si et seulement si:

$$\text{Pour tout } \xi > 0, \exists \rho \in ]0, \xi[ \quad J(\alpha + \rho d) < J(\alpha) \quad (3.10)$$

c.à.d. on peut faire «descendre» la valeur du critère avec un petit pas  $\rho$  dans la direction  $d$ .

**Théorème:** Si  $J$  est dérivable en  $\alpha$ ,  $d$  est une direction de descente en  $\alpha$  si:

$$\langle \nabla J(\alpha), d \rangle < 0 \quad (3.11)$$

Le théorème (3.11) donne  $\langle \nabla J(\alpha), d \rangle < 0$ , et en appliquant la définition du produit scalaire ( $\langle \vec{u}, \vec{v} \rangle = \|\vec{u}\| \cdot \|\vec{v}\| \cdot \cos(\vec{u}, \vec{v})$ ) on peut conclure que  $d$  fait avec l'opposé du gradient un angle  $\theta$  strictement aigu définie par:

$$\theta = \arccos \frac{\langle \nabla J(\alpha), d \rangle}{\|\nabla J(\alpha)\| \cdot \|d\|} \quad (3.12)$$

Donc l'ensemble de directions de descentes forme un demi - espace ouvert de  $\mathbb{R}^{Np}$  (figure 3.4).

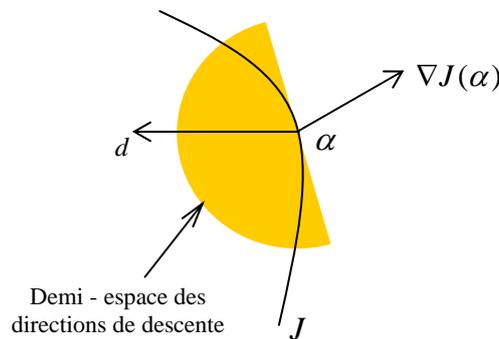


Figure 3.4: Demi – espace des directions de descente

La définition de la direction de descente donne  $J(\alpha + \rho d) < J(\alpha)$ , pour tout  $\rho > 0$  suffisamment petit ( $J$  décroît strictement dans la direction  $d$ ). De telles directions sont intéressantes en optimisation car, pour faire décroître  $J$ , il suffit de faire un déplacement le long de  $d$ . Les méthodes à directions de descente utilisent cette idée pour minimiser une fonction, elles construisent la suite des itérés  $\{ \alpha_k \}_{k \geq 1}$  approchant une solution  $\alpha^*$  par la récurrence:

$$\alpha_{k+1} = \alpha_k + \rho_k d_k \text{ pour } k \geq 1 \quad (3.13)$$

Notant ici que  $\alpha_k$  est le vecteur des paramètres à l'itération  $k$  ( $\alpha_k = (\alpha_k^1, \alpha_k^2, \dots, \alpha_k^{Np})$ ), et de même pour la direction  $d$  ( $d_k = (d_k^1, d_k^2, \dots, d_k^{Np})$ ).

L'algorithme de la méthode à directions de descente est présenté dans la figure (3.5).

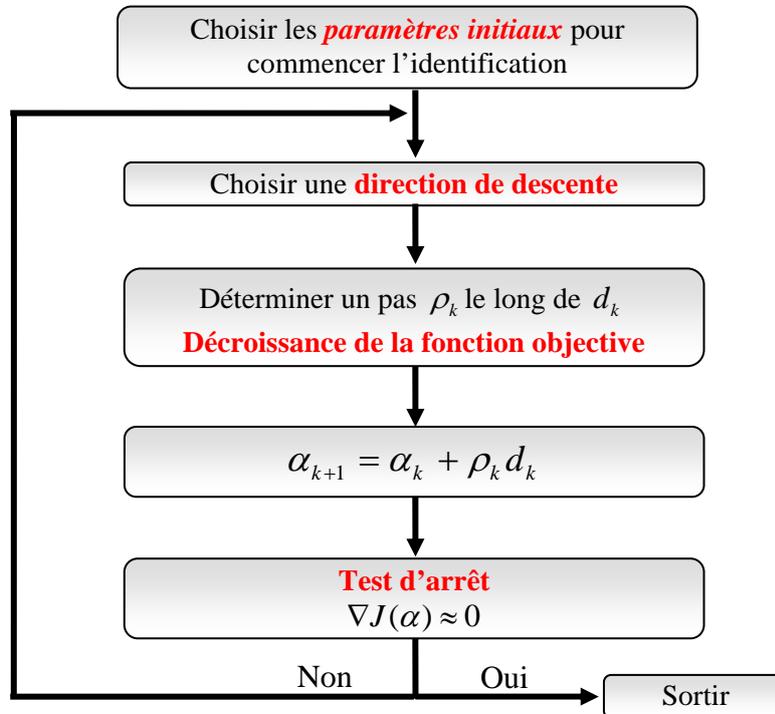


Figure 3.5: Algorithme des méthodes à directions de descente.

Nous allons présenter dans la partie suivante les différents algorithmes fondés sur la notion de direction de descente.

### 3.2.1 Algorithme du gradient (steepest Descent method)

Dans cet algorithme, on prend pour direction de recherche

$$d_k = -\nabla J(\alpha_k) \quad (3.14)$$

Cette direction est une direction de descente si  $\alpha_k$  n'est pas un point stationnaire puisque

$$J(\alpha_k) \cdot (-\nabla J(\alpha_k)) = \langle \nabla J(\alpha_k), -\nabla J(\alpha_k) \rangle = -\|\nabla J(\alpha_k)\|^2 < 0 \quad (3.15)$$

L'algorithme du gradient est facile à mettre en œuvre. Cependant, si le produit scalaire utilisé pour calculer le gradient n'est pas bien choisi, cet algorithme convergera très lentement proche des minimums. En pratique, on observe souvent que  $-\nabla J(\alpha_k)$  est une bonne

direction de descente loin d'une solution mais qu'elle est à éviter dès que l'on entre dans le voisinage d'une solution  $\alpha^*$ , là où les termes du second ordre d'un développement de Taylor de  $J$  autour de  $\alpha^*$  jouent un rôle plus important. L'inconvénient de cet algorithme est d'ignorer la courbure de  $J$  décrite par son Hessien.

### 3.2.2 Algorithme du gradient conjugué

L'idée de cet algorithme est de minimiser la fonction 'objectif' selon une première direction  $d_k$ . On arrive à un point  $\alpha_k$  qui est le minimum sur cette direction. Ensuite, on va déterminer la direction suivante  $d_{k+1}$  pour continuer la minimisation. La base de l'algorithme du gradient conjugué est de choisir une direction  $d_{k+1}$  perpendiculaire à  $d_k$ , comme cela on est sûr de ne jamais détruire le minimum que nous venons de trouver dans une dimension. En fait, la direction de descente  $d_k$  n'est pas exactement le gradient de la fonction. Il variera à chaque itération. La direction  $d_{k+1}$  est calculée à partir de  $d_k$  en utilisant cette relation:

$$d_{k+1} = \nabla J(\alpha_{k+1}) + \frac{\|\nabla J(\alpha_{k+1})\|}{\nabla J(\alpha_k)} d_k \quad (3.16)$$

Et le pas  $\rho_k$  est donné par:

$$\rho_k = \frac{-\nabla J(\alpha_k) \cdot d_k}{(d_k)^T \cdot H_k \cdot d_k} \quad (3.17)$$

Avec  $H_k = \nabla^2 J(\alpha_k)$  est la matrice Hessien et T représente le vecteur transposé.

Cet algorithme converge très vite vers le minimum, mais nécessite la connaissance du Hessien de la fonction 'objectif' pour déterminer le pas de descente. Ce calcul est l'étape la plus coûteuse de l'algorithme du gradient conjugué. Pour rendre le calcul moins cher, on utilise des algorithmes qui ne nécessitent pas le calcul du Hessien comme celui de Quasi - Newton.

### 3.2.3 Algorithme de Newton

Dans cet algorithme, on détermine une direction  $d_k$  par la formule suivante:

$$d_k = -\nabla^2 J(\alpha_k)^{-1} \cdot \nabla J(\alpha_k) \quad (3.18)$$

Il faut que le Hessien ( $\nabla^2 J(\alpha_k)$ ) soit inversible pour que la définition de la direction existe. Considérons l'approximation de la fonction  $J$  deux fois différentiable (développement de Taylor à l'ordre 2):

$$J(\alpha) = J(\alpha_k) + \nabla J(\alpha_k)^T (\alpha - \alpha_k) + \frac{1}{2} (\alpha - \alpha_k)^T \nabla^2 J(\alpha_k) (\alpha - \alpha_k) \quad (3.19)$$

La fonction 'objectif'  $J(\alpha)$  atteint un minimum en  $\alpha_{k+1}$  si  $\nabla J(\alpha_{k+1}) = 0$ . Alors, en dérivant l'équation (3.19) par rapport à  $(\alpha)$  et en remplaçant  $(\alpha)$  par  $(\alpha_{k+1})$  nous obtenons:

$$\nabla J(\alpha_{k+1}) \approx \nabla J(\alpha_k) + \nabla^2 J(\alpha_k) (\alpha_{k+1} - \alpha_k) = 0 \quad (3.20)$$

Ce qui donne:

$$\alpha_{k+1} = \alpha_k - (\nabla^2 J(\alpha_k))^{-1} \cdot \nabla J(\alpha_k) \quad (3.21)$$

Et par suite la direction de recherche utilisée est définie par :

$$d_k = -(\nabla^2 J(\alpha_k))^{-1} \cdot \nabla J(\alpha_k) \quad (3.22)$$

Dans l'algorithme de Newton, la direction est utilisée directement pour actualiser les variables d'optimisation ( $\alpha_{k+1} = \alpha_k + \rho_k d_k$ ) jusqu'à la convergence. La majeure partie du calcul est due à l'inversion du Hessien de  $J$  en  $\alpha_k$ .

Cette technique fait que la méthode peut être instable. Proche de la solution, la convergence quadratique peut être démontrée. En pratique, des modifications à chaque itération de la méthode de Newton sont essentielles pour garantir la convergence. Lorsque le Hessien n'est pas défini positif, la direction de recherche n'existe plus ou elle n'est pas une direction de descente. Il faudra donc conditionner cette matrice et la remplacer par une autre matrice définie positive ou bien chercher d'autres directions de descente. Ensuite, si la solution initiale est très loin de l'optimum, il faudra ajuster les directions de recherche.

#### 3.2.4 Algorithme de Quasi - Newton

Les algorithmes de Quasi-Newton s'inspirent de l'algorithme de Newton pour définir la direction de recherche. Au lieu d'utiliser la direction définie par l'algorithme de Newton celle - ci s'écrit :

$$d_k = -(B_k)^{-1} \cdot \nabla J(\alpha_k) \quad (3.23)$$

avec  $B_k$  est une matrice symétrique définie positive mise à jour au cours des itérations. Le principe de l'algorithme de Quasi – Newton est de générer une séquence de matrices symétriques définies positives qui soient des approximations de la matrice Hessien réelle ou de son inverse. La matrice  $B_k$  qui est l'estimation de la matrice Hessien converge vers la valeur exacte des dérivées secondes de sorte qu'en fin de convergence, on retrouve une convergence de type Newton. La même relation que celle de Newton est utilisée pour le calcul de  $\alpha_{k+1}$  mais avec la nouvelle direction de recherche  $d_k$  :

$$\alpha_{k+1} = \alpha_k + \rho_k d_k \quad (3.24)$$

Si le nouveau  $\alpha_{k+1}$  ne satisfait pas au critère de convergence, une nouvelle approximation de la matrice  $B_k$  sera nécessaire.

Cette approximation est donnée par:

$$B_{k+1} = \lambda_k B_k + M_k \quad (3.25)$$

avec  $\lambda_k$  est un scalaire réel et  $M_k$  une matrice choisie telle que  $B_{k+1}$  soit symétrique définie positive.

Il existe plusieurs possibilités pour le choix de la mise à jour de la matrice  $B_k$ . On impose généralement la satisfaction de la condition de Quasi – Newton. Elle s'obtient en développant le gradient en série autour de  $\alpha_{k+1}$ .

La formule de correction qui permet d'obtenir la matrice approchée à l'itération  $k+1$  à partir de celle à l'itération  $k$  utilise les informations obtenues lors de la dernière itération, c.à.d. les valeurs du gradient en ce point.

Différentes méthodes permettent d'effectuer une remise à jour de type Quasi – Newton. La formule la plus connue est Broyden-Fletcher–Goldfard– Shanno (BFGS) (Broyden, Fletcher, Goldfard, Shanno, 1970).

### 3.2.5 Algorithme de Gauss - Newton

La méthode de Gauss-Newton et ses variations ont été intensivement employées dans la solution du problème inverse (Jacquard et Jain, 1965 ; Thomas et al., 1972 ; Yoon et Yeh 1976 ; Yeh et Yoon, 1981 ; Cooley, 1977, 1982, 1983, 1985). Cet algorithme se base sur l'algorithme de Newton qui utilise comme direction de descente la solution de l'équation:  $\nabla^2 J(\alpha_k) d_k = -\nabla J(\alpha_k)$ .

En utilisant la matrice Jacobienne, on peut écrire le gradient de la fonction 'objectif' sous la forme suivante:

$$\nabla J(\alpha) = \mathcal{J}(\alpha)^T \Omega(\alpha) v(\alpha) \quad (3.26)$$

Avec  $\Omega(\alpha)$  est la matrice diagonale donnée par  $\Omega_{i,i(i=1,Nm)} = w_i$ .  $v(\alpha)$  est un vecteur donné par;  $v_{i(i=1,Nm)} = u_i - u_i^{mes}$ . Ainsi le Hessien peut être calculé en dérivant l'équation (3.26) par rapport à  $(\alpha)$ :

$$\nabla^2 J(\alpha) = \mathcal{J}(\alpha)^T \Omega(\alpha) \mathcal{J}(\alpha) + \Omega(\alpha) v(\alpha) \nabla^2 v(\alpha) \quad (3.27)$$

$\nabla^2 v(\alpha)$  est la partie provenant de la dérivée seconde des variables d'état par rapport aux paramètres. L'algorithme de Gauss – Newton, contrairement à Newton, n'utilise qu'une partie du Hessien de  $J$ . De manière à éviter le calcul des dérivées secondes, le Hessien est approximé par :

$$\nabla^2 J(\alpha) \approx \mathcal{J}(\alpha)^T \Omega(\alpha) \mathcal{J}(\alpha) \quad (3.28)$$

La direction de Gauss – Newton sera la solution particulière du système:

$$[\mathcal{J}(\alpha_k)^T \Omega(\alpha_k) \mathcal{J}(\alpha_k)] d_k = -\mathcal{J}(\alpha_k)^T \Omega(\alpha_k) v(\alpha_k) \quad (3.29)$$

Et enfin la modification sur le nouveau paramètre  $\alpha_{k+1}$  se fait à partir de la relation

$$\alpha_{k+1} = \alpha_k + \rho_k d_k .$$

### 3.2.6 Algorithme de Marquardt - Levenberg

L'algorithme de Marquardt (1963) et Levenberg (1944) est un algorithme itératif qui localise le minimum d'une fonction 'objectif' définie comme une somme des carrés.

Cet algorithme est une combinaison de la méthode des *Gradients* et celle de *Gauss – Newton*. Lorsque la solution courante est loin de la solution, l'algorithme se comporte comme la méthode des gradients. Proche de la solution, il se comporte comme la méthode de Gauss–Newton. L'algorithme est alors itératif. Commencant avec des paramètres initiaux, il produit une série de vecteurs qui converge vers le minimum global.

On considère un scalaire  $\delta$  appelé «facteur de mélange» qui détermine le mélange entre la méthode des gradients et celle de Gauss – Newton. L'algorithme de Marquardt–Levenberg consiste à trouver le nouveau paramètre  $\alpha$  en utilisant la relation suivante:

$$\alpha_{k+1} = \alpha_k + \rho_k d_k \quad (3.30)$$

Avec  $d_k$  est la solution de l'équation :

$$[\mathcal{J}(\alpha_k)^T \Omega(\alpha_k) \mathcal{J}(\alpha_k) + \delta_k I] d_k = -\mathcal{J}(\alpha_k)^T \Omega(\alpha_k) v(\alpha_k) \quad (3.31)$$

Et  $I$  la matrice unité.

L'algorithme qui utilise une telle direction de descente s'appelle l'algorithme de Levenberg-Marquardt, (voir Walter et Pronzato, 1994).

Pour tout  $\delta_k > 0$  la matrice est définie positive, et cela assure que  $d_k$  est une direction de descente.

Il est clair que dans l'expression de la direction (3.31) :

- si  $\delta_k$  est grand, alors on tombe sur la méthode des gradients avec un pas  $\rho_k = \frac{1}{\delta_k}$  qui tend vers zéro ;
- pour une petite valeur de  $\delta_k$ , l'algorithme « Marquardt-Levenberg » et la méthode de Gauss – Newton sont très proches.

Parmi les avantages de l'algorithme de Marquardt – Levenberg on peut citer la fiabilité, la convergence après quelques itérations et la précision de la solution.

Enfin, cet algorithme nécessite le calcul approché de la matrice Hessien à chaque itération. Dans ce travail, on a utilisé la méthode de Marquardt – Levenberg pour la résolution du problème inverse. Il est clair que l'utilisation de cette méthode nécessite le calcul du gradient de la fonction 'objectif'.

#### 4. Calcul des Gradients de la fonction 'objectif'

Le calcul du gradient de la fonction 'objectif' est la partie la plus coûteuse pour n'importe quel algorithme utilisé. Trois méthodes peuvent être utilisées pour déterminer ce gradient: la méthode des perturbations, la méthode des sensibilités et la méthode des états adjoints.

Ces trois méthodes diffèrent en temps calcul et en précision. Dans ce qui suit, nous présenterons en détails la méthode des différences finies et des sensibilités. La méthode des états adjoints sera présentée dans le chapitre suivant.

##### 4.1 Méthode des différences finies

Pour calculer la dérivée par rapport à un paramètre  $\alpha^{l(l=1..Np)}$ , cette méthode consiste à ajouter une perturbation  $\delta\alpha^l$  à la fonction 'objectif' en approximant le gradient par l'expression suivante:

$$\frac{\partial J}{\partial \alpha^l} \approx \frac{J(\alpha^l + \delta\alpha^l) - J(\alpha^l)}{\delta\alpha^l} \quad (3.32)$$

Il est clair que le nombre de systèmes à résoudre pour l'évaluation du gradient de la fonction 'objectif' est égal au nombre de paramètres plus un.

L'inconvénient de cette méthode, malgré sa simplicité, provient du choix de  $\delta\alpha^l$  puisqu'il n'y a aucun moyen de choisir a priori la bonne valeur de cette perturbation. Cette méthode donne des résultats approchés des gradients.

##### 4.2 Méthode des sensibilités

La méthode de sensibilité n'utilise aucune approximation. Elle donne un résultat exact et conduit à déterminer les coefficients de sensibilité en formulant  $N_p$  systèmes pour chaque pas de temps (avec  $N_p$  est le nombre de paramètres). Les sensibilités aux points de mesure permettent de calculer le gradient de la fonction 'objectif'. Cette méthode est adoptée dans ce

travail pour le calcul de gradient de la fonction ‘objectif’. Elle sera développée d’une manière plus détaillée dans la section suivante.

Le principal inconvénient de cette méthode est que le temps de calcul du gradient est proportionnel au nombre de paramètres qui peut être très grand. C’est le principal avantage de la méthode de l’état adjoint présentée dans le chapitre suivant, où le calcul sera réalisé à un coût proportionnel à celui d’une seule équation linéarisée indépendant du nombre de paramètres. Mais par contre, la méthode de la sensibilité donne la Jacobienne en plus du gradient. Une fois la Jacobienne calculée, il est possible d’utiliser Gauss–Newton ou bien Marquardt–Levenberg pour la minimisation de la fonction ‘objectif’. Si le nombre de paramètres n’est pas trop élevé, Marquardt–Levenberg avec la méthode de sensibilité sera plus efficace que Quasi–Newton avec l’état adjoint.

## **5. Le modèle numérique INV\_EDM pour l’estimation des paramètres en double milieu**

Cette partie est consacrée au développement du modèle numérique INV\_EDM pour l’estimation des paramètres d’écoulement en milieu fracturé. Le modèle INV\_EDM est basé sur la méthode de Marquardt – Levenberg pour l’optimisation de la fonction ‘objectif’. Dans le modèle INV\_EDM, le problème direct est résolu avec la méthode des éléments finis mixtes hybrides via le code EDM présenté dans le chapitre précédent. Le gradient de la fonction ‘objectif’ ainsi que la matrice Jacobienne nécessaires à la méthode de Marquardt – Levenberg, sont calculés avec la méthode de sensibilité. La résolution des systèmes linaires (pour le problème direct et pour le calcul du gradient) se fait par le solveur direct UMFPACK. Le modèle INV\_EDM est développé en FORTRAN 95. Dans la partie suivante, nous allons présenter les différentes étapes du modèle INV\_EDM.

### **5.1 La fonction ‘objectif’**

La méthode des éléments finis mixtes hybrides est utilisée dans le modèle INV\_EDM pour la discrétisation du problème direct. Les inconnus de cette méthode sont les traces de la charge dans les matrices poreuses et les fractures sur les interfaces entre les éléments du maillage ( $Th$ ,  $Thm$ ). Ainsi la fonction ‘objectif’ est définie dans le modèle INV\_EDM par l’écart entre les traces de la charge (dans les matrices poreuses et dans les fractures) calculées et mesurées:

$$J = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=1}^{Nf} W_i^{n+1} (Th_i^{n+1} - Th_{mes,i}^{n+1})^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=1}^{Nf} W_{m,i}^{n+1} (Thm_i^{n+1} - Thm_{mes,i}^{n+1})^2 \quad (3.33)$$

avec  $N$  le nombre des pas de temps,  $Nf$  le nombre total de cotés du maillage,  $Th_i^{n+1}$  (resp.  $Thm_i^{n+1}$ ) la trace de la charge dans les fractures (resp. les matrices poreuses) sur le côté ( $i$ ) au pas de temps ( $n+1$ ).  $Th_{mes,i}$  (resp.  $Thm_{mes,i}$ ) représente la charge mesurée dans les fractures (resp. les matrices poreuses).  $W_i^{n+1}$  et  $W_{m,i}^{n+1}$  sont donnés par:

$$W_i^{n+1} = W_{m,i}^{n+1} = \begin{cases} 1 & \text{s'il y a un point de mesure sur le coté } (i) \text{ au pas de temps } (n+1) \\ 0 & \text{si non} \end{cases} \quad (3.34)$$

Les charges calculées sont obtenues par le modèle numérique EDM présenté dans le chapitre précédent. Ce modèle est basé sur la méthode des EFMH (voir chapitre 2).

## 5.2 Les paramètres à estimer

Le modèle double porosité (DP) nécessite quatre paramètres qui sont la conductivité hydraulique ( $K$ ), les coefficients d'emmagasinement dans les fractures et les matrices poreuses ( $s, s_m$ ), et le coefficient d'échange ( $\sigma$ ). Pour identifier un milieu à double porosité, il faut donc estimer ces quatre paramètres. Cependant, en tenant compte des équations du problème direct (2.43-2.60), on remarque que les deux paramètres ( $\sigma$ ) et ( $s_m$ ) sont liés (les deux paramètres se trouvent uniquement sous forme d'une fraction, voir équation 2.51). Ainsi, il est très difficile (voir impossible) d'estimer ces deux paramètres simultanément. Il faut donc imposer un paramètre et chercher l'autre. Dans ce travail, on impose la valeur de  $s_m$  (parce que c'est un coefficient d'emmagasinement, donc il a un sens physique et il peut être mesuré) et on cherche à calculer la valeur de  $\sigma$  (qui n'a pas de vrai sens physique).

## 5.3 Calcul du gradient (milieu homogène)

Ce paragraphe est consacré au calcul du gradient de la fonction 'objectif'. Afin de simplifier la présentation de ce calcul, on va commencer avec un milieu homogène et on va chercher à calculer les gradients de la fonction 'objectif' par rapport aux trois paramètres  $K$ ,  $s$  et  $\sigma$ . Le gradient de la fonction 'objectif' est donné par:

$$\frac{\partial J}{\partial P_p} = \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=1}^{N_f} W_i^{n+1} (Th_i^{n+1} - Th_{mes,i}^{n+1}) \frac{\partial Th_i^{n+1}}{\partial P_p} + \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=1}^{N_f} W_{m,i}^{n+1} (Thm_i^{n+1} - Thm_{mes,i}^{n+1}) \frac{\partial Thm_i^{n+1}}{\partial P_p} \quad (3.35)$$

où  $P_p$  représente les trois paramètres ( $P_1 = K$ ,  $P_2 = s$  et  $P_3 = \sigma$ ). L'évaluation de ce gradient nécessite le calcul des dérivées des variables d'états par rapport aux paramètres ( $\partial Th_i^{n+1} / \partial P_p$  et  $\partial Thm_i^{n+1} / \partial P_p$ ). Dans ce travail, ces valeurs sont calculées avec la méthode de sensibilité qui consiste à dériver le système direct (2.53) par rapport à chaque paramètre. Cela nous permet d'écrire:

$$\frac{\partial}{\partial P_p} ([Mc] \{Th^{n+1}\}) = \frac{\partial}{\partial P_p} \{Rc^n\} \quad p = 1, 2, 3 \quad (3.36)$$

alors

$$\frac{\partial [Mc]}{\partial P_p} \{Th^{n+1}\} + [Mc] \frac{\partial \{Th^{n+1}\}}{\partial P_p} = \frac{\partial \{Rc^n\}}{\partial P_p} \quad p = 1, 2, 3 \quad (3.37)$$

Pour détailler le calcul des dérivées de l'équation (3.37), on note,  $E$  et  $E'$  les éléments situés de part et de l'autre d'un coté  $X$ , répertorié localement  $F_k^E$  et  $F_l^{E'}$ . Le domaine étant homogène donc  $K^E = K^{E'} = K$ ,  $s^E = s^{E'} = s$  et  $\sigma^E = \sigma^{E'} = \sigma$ . On peut donc préciser le vecteur  $\partial \{Rc^n\} / \partial P_p$ :

$$\frac{\partial Rc_X^n}{\partial P_p} = \frac{\overline{\partial Rc}_X^{E,n}}{\partial P_p} + \frac{\overline{\partial Rc}_X^{E',n}}{\partial P_p} = \frac{\overline{\partial Rc}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial P_p} + \frac{\overline{\partial Rc}_{F_l^{E'}}^{E',n}}{\partial P_p} \quad p = 1, 2, 3 \quad (3.38)$$

Pour  $p = 1$

$$\begin{aligned} \frac{\overline{\partial Rc}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial P_p} &= \frac{\overline{\partial Rc}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial K} = -\frac{|E|}{3} \left[ \sigma \frac{\partial Thm_k^{E,n}}{\partial K} e^{-\tau^{E_k} \Delta t} + \frac{s}{\Delta t} \frac{\partial Th_k^{E,n}}{\partial K} \right] \\ \frac{\overline{\partial Rc}_{F_l^{E'}}^{E',n}}{\partial P_p} &= \frac{\overline{\partial Rc}_{F_l^{E'}}^{E',n}}{\partial K} = -\frac{|E'|}{3} \left[ \sigma \frac{\partial Thm_l^{E',n}}{\partial K} e^{-\tau^{E_l} \Delta t} + \frac{s}{\Delta t} \frac{\partial Th_l^{E',n}}{\partial K} \right] \end{aligned} \quad (3.39)$$

Avec

$$\tau^{E_k} = \tau^{E_l} = \frac{\sigma}{s_m} \quad (3.40)$$

Pour  $p = 2$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \overline{RC}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial P_p} &= \frac{\partial \overline{RC}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial s} = -\frac{|E|}{3} \left[ \sigma \frac{\partial Thm_k^{E,n}}{\partial s} e^{-\tau^{E_k} \Delta t} + \frac{1}{\Delta t} Th_k^{E,n} + \frac{s}{\Delta t} \frac{\partial Th_k^{E,n}}{\partial s} \right] \\ \frac{\partial \overline{RC}_{F_l^{E'}}^{E',n}}{\partial P_p} &= \frac{\partial \overline{RC}_{F_l^{E'}}^{E',n}}{\partial s} = -\frac{|E'|}{3} \left[ \sigma \frac{\partial Thm_l^{E',n}}{\partial s} e^{-\tau^{E_l} \Delta t} + \frac{1}{\Delta t} Th_l^{E',n} + \frac{s}{\Delta t} \frac{\partial Th_l^{E',n}}{\partial s} \right]\end{aligned}\quad (3.41)$$

Pour  $p = 3$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \overline{RC}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial P_p} &= \frac{\partial \overline{RC}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial \sigma} \\ &= -\frac{|E|}{3} \left[ Thm_k^{E,n} e^{-\tau^{E_k} \Delta t} - \Delta t \frac{\sigma}{s_m} Thm_k^{E,n} e^{-\tau^{E_k} \Delta t} + \sigma \frac{\partial Thm_k^{E,n}}{\partial \sigma} e^{-\tau^{E_k} \Delta t} + \frac{s}{\Delta t} \frac{\partial Th_k^{E,n}}{\partial \sigma} \right] \\ \frac{\partial \overline{RC}_{F_l^{E'}}^{E',n}}{\partial P_p} &= \frac{\partial \overline{RC}_{F_l^{E'}}^{E',n}}{\partial \sigma} \\ &= -\frac{|E'|}{3} \left[ Thm_l^{E',n} e^{-\tau^{E_l} \Delta t} - \Delta t \frac{\sigma}{s_m} Thm_l^{E',n} e^{-\tau^{E_l} \Delta t} + \sigma \frac{\partial Thm_l^{E',n}}{\partial \sigma} e^{-\tau^{E_l} \Delta t} + \frac{s}{\Delta t} \frac{\partial Th_l^{E',n}}{\partial \sigma} \right]\end{aligned}\quad (3.42)$$

Les coefficients de la matrice  $\partial[Mc]/\partial P_p$  sont donnés par les relations suivantes:

❖ Pour les coefficients diagonaux:

$$\frac{\partial mc_{XX}}{\partial P_p} = \frac{\partial \overline{mc}_{XX}^E}{\partial P_p} + \frac{\partial \overline{mc}_{XX}^{E'}}{\partial P_p} = \frac{\partial \overline{mc}_{kk}^E}{\partial P_p} + \frac{\partial \overline{mc}_{ll}^{E'}}{\partial P_p}\quad (3.43)$$

Avec, pour  $p = 1$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \overline{mc}_{kk}^E}{\partial P_p} &= \frac{\partial \overline{mc}_{kk}^E}{\partial K} = \frac{NB_{kk}^E}{K} \\ \frac{\partial \overline{mc}_{ll}^{E'}}{\partial P_p} &= \frac{\partial \overline{mc}_{ll}^{E'}}{\partial K} = \frac{NB_{ll}^{E'}}{K}\end{aligned}\quad (3.44)$$

La matrice  $NB$  est la matrice locale des EFMH défini dans le chapitre 2 (équation 2.58)

Pour  $p = 2$

$$\begin{aligned}\frac{\overline{\partial mc_{kk}}^E}{\partial P_p} &= \frac{\overline{\partial mc_{kk}}^E}{\partial s} = -\frac{|E|}{3\Delta t} \\ \frac{\overline{\partial mc_{ll}}^{E'}}{\partial P_p} &= \frac{\overline{\partial mc_{ll}}^{E'}}{\partial s} = -\frac{|E'|}{3\Delta t}\end{aligned}\quad (3.45)$$

Pour  $p = 3$

$$\begin{aligned}\frac{\overline{\partial mc_{kk}}^E}{\partial P_p} &= \frac{\overline{\partial mc_{kk}}^E}{\partial \sigma} = -\frac{|E|}{3} \left[ 1 - \frac{\sigma \Delta t}{s_m} \right] e^{-\tau^{E_k} \Delta t} \\ \frac{\overline{\partial mc_{ll}}^{E'}}{\partial P_p} &= \frac{\overline{\partial mc_{ll}}^{E'}}{\partial \sigma} = -\frac{|E'|}{3} \left[ 1 - \frac{\sigma \Delta t}{s_m} \right] e^{-\tau^{E'_i} \Delta t}\end{aligned}\quad (3.46)$$

❖ Pour les coefficients hors-diagonaux:

Si le coté  $Y$  n'appartient pas au même élément que le coté  $X$ , alors:

$$\frac{\partial mc_{XY}}{\partial P_p} = 0 \quad (3.47)$$

Si l'élément  $E$  contient les cotés  $X$  et  $Y$ , répertoriées localement avec les indices respectifs  $k$  et  $l$ , alors:

$$\frac{\partial mc_{XY}}{\partial P_p} = \frac{\overline{\partial mc_{XY}}^E}{\partial P_p} = \frac{\overline{\partial mc_{kl}}^E}{\partial P_p} = \begin{cases} \frac{NB_{kl}^E}{K} & \text{pour } p=1 \\ 0 & \text{pour } p=2 \text{ ou } 3 \end{cases} \quad (3.48)$$

Il faut noter que dans les équations (3.41) et (3.42) vont apparaître les dérivées des traces des charges dans les matrices poreuses par rapport aux paramètres. Donc, il est nécessaire de calculer ces dérivées après chaque pas de temps. Ce qui est fait en utilisant l'équation (2.49).

Ainsi on peut écrire:

$$\frac{\partial Thm_i^{E,n+1}}{\partial P_p} = \frac{\partial}{\partial P_p} \left[ (Thm_i^{E,n} - Th_i^{E,n+1}) e^{-\tau^{E_i} \Delta t} \right] + \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial P_p} \quad (3.49)$$

Pour  $p = 1$ , on obtient:

$$\frac{\partial Thm_i^{E,n+1}}{\partial K} = \left( \frac{\partial Thm_i^{E,n}}{\partial K} - \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial K} \right) e^{-\tau^{E_i} \Delta t} + \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial K} \quad (3.50)$$

Pour  $p = 2$

$$\frac{\partial Thm_i^{E,n+1}}{\partial s} = \left( \frac{\partial Thm_i^{E,n}}{\partial s} - \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial s} \right) e^{-\tau^{E_i} \Delta t} + \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial s} \quad (3.51)$$

Pour  $p = 3$

$$\frac{\partial Thm_i^{E,n+1}}{\partial \sigma} = \left( \frac{\partial Thm_i^{E,n}}{\partial \sigma} - \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial \sigma} \right) e^{-\tau^{E_i} \Delta t} - \frac{\Delta t}{s_m} (Thm_i^{E,n} - Th_i^{E,n+1}) e^{-\tau^{E_i} \Delta t} + \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial \sigma} \quad (3.52)$$

#### 5.4 Calcul du gradient (milieu hétérogène: 2 zones)

Cette partie est consacrée au calcul du gradient de la fonction ‘objectif’ dans le cas d’un milieu hétérogène. Un milieu avec deux zones est considéré pour simplifier la présentation. Ainsi, pour les cas hétérogènes avec plus que deux zones, le gradient peut être calculé en suivant la logique présentée ici.

On considère un domaine hétérogène avec deux zones  $Z_1$  et  $Z_2$ . Les paramètres dans la première zone sont  $K_1$ ,  $s_1$ ,  $s_{m,1}$  et  $\sigma_1$  et dans la deuxième zone  $K_2$ ,  $s_2$ ,  $s_{m,2}$  et  $\sigma_2$ . Le vecteur gradient de la fonction ‘objectif’ sera donné par:

$$\nabla J = \begin{bmatrix} \frac{\partial J}{\partial K_1} \\ \frac{\partial J}{\partial s_1} \\ \frac{\partial J}{\partial \sigma_1} \\ \frac{\partial J}{\partial K_2} \\ \frac{\partial J}{\partial s_2} \\ \frac{\partial J}{\partial \sigma_2} \end{bmatrix} \quad (3.53)$$

Il faut calculer  $\frac{\partial J}{\partial P_p^{Z_1}}$  et  $\frac{\partial J}{\partial P_p^{Z_2}}$  pour  $p = 1, 2, 3$  avec  $P_1^{Z_1} = K_1$ ,  $P_2^{Z_1} = s_1$ ,  $P_3^{Z_1} = \sigma_1$ ,  $P_1^{Z_2} = K_2$ ,

$P_2^{Z_2} = s_2$  et  $P_3^{Z_2} = \sigma_2$ . Comme dans le cas homogène, le calcul des gradient nécessite le calcul des dérivées des variables d’état par rapport aux paramètres  $(\partial Th_i^{n+1} / \partial P_{p=1,2,3}^{Z_{j=1,2}})$  et

$\partial Th_i^{n+1} / \partial P_{p=1,2,3}^{Z_{j=1,2}}$ ). Ces dérivées sont calculées par la méthode de sensibilité, en dérivant le système direct (2.53):

$$\frac{\partial [Mc]}{\partial P_p^{Z_i}} \{Th^{n+1}\} + [Mc] \frac{\partial \{Th^{n+1}\}}{\partial P_p^{Z_i}} = \frac{\partial}{\partial P_p^{Z_i}} \{Rc^n\} \quad p=1,2,3 / i=1,2 \quad (3.54)$$

Les dérivées des variables d'état peuvent être calculées en résolvant le système linéaire suivant:

$$[Mc] \frac{\partial \{Th^{n+1}\}}{\partial P_p^{Z_i}} = \frac{\partial}{\partial P_p^{Z_i}} \{Rc^n\} - \frac{\partial [Mc]}{\partial P_p^{Z_i}} \{Th^{n+1}\} \quad p=1,2,3 / i=1,2 \quad (3.55)$$

Pour détailler le calcul des dérivées de l'équation (3.54), on note,  $E$  et  $E'$  les éléments situés de part et d'autre d'un côté  $X$ , répertoriée localement  $F_k^E$  et  $F_l^{E'}$ . Trois possibilités existent pour le côté  $X$ :

- Les deux éléments  $E$  et  $E'$  se trouvent dans  $Z_1$
- Les deux éléments  $E$  et  $E'$  se trouvent dans  $Z_2$
- Le côté  $X$  se trouve à l'interface entre deux zones (on suppose que  $E \in Z_1$  et  $E' \in Z_2$ ).

Le calcul des dérivées de l'équation (3.54) varie suivant ces trois possibilités.

Si le côté  $X$  vérifie la possibilité 1, alors:

$$\frac{\partial Rc_X^n}{\partial P_p^{Z_1}} = \frac{\partial \overline{Rc}_X^{E,n}}{\partial P_p^{Z_1}} + \frac{\partial \overline{Rc}_X^{E',n}}{\partial P_p^{Z_1}} = \frac{\partial \overline{Rc}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial P_p^{Z_1}} + \frac{\partial \overline{Rc}_{F_l^{E'}}^{E',n}}{\partial P_p^{Z_1}} \quad \text{pour } p=1,2,3 \quad (3.56)$$

$$\frac{\partial Rc_X^n}{\partial P_p^{Z_2}} = 0$$

Pour  $p=1$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \overline{RC}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial K_1} &= -\frac{|E|}{3} \left[ \sigma_1 \frac{\partial Thm_k^{E,n}}{\partial K_1} e^{-\tau^{E_k} \Delta t} + \frac{s_1}{\Delta t} \frac{\partial Th_k^{E,n}}{\partial K_1} \right] \\ \frac{\partial \overline{RC}_{F_i^{E'}}^{E',n}}{\partial K_1} &= -\frac{|E'|}{3} \left[ \sigma_1 e^{-\tau^{E_i} \Delta t} \frac{\partial Thm_l^{E',n}}{\partial K_1} + \frac{s_1}{\Delta t} \frac{\partial Th_l^{E',n}}{\partial K_1} \right]\end{aligned}\quad (3.57)$$

avec

$$\tau^{E_k} = \tau^{E_i} = \frac{\sigma_1}{s_{m,1}} \quad (3.58)$$

Pour  $p = 2$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \overline{RC}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial s_1} &= -\frac{|E|}{3} \left[ \sigma_1 \frac{\partial Thm_k^{E,n}}{\partial s_1} e^{-\tau^{E_k} \Delta t} + \frac{1}{\Delta t} Th_k^{E,n} + \frac{s_1}{\Delta t} \frac{\partial Th_k^{E,n}}{\partial s_1} \right] \\ \frac{\partial \overline{RC}_{F_i^{E'}}^{E',n}}{\partial s_1} &= -\frac{|E'|}{3} \left[ \sigma_1 \frac{\partial Thm_l^{E',n}}{\partial s_1} e^{-\tau^{E_i} \Delta t} + \frac{1}{\Delta t} Th_l^{E',n} + \frac{s_1}{\Delta t} \frac{\partial Th_l^{E',n}}{\partial s_1} \right]\end{aligned}\quad (3.59)$$

Pour  $p = 3$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \overline{RC}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial \sigma_1} &= -\frac{|E|}{3} \left[ \frac{\partial Thm_k^{E,n}}{\partial \sigma_1} \sigma_1 e^{-\tau^{E_k} \Delta t} + Thm_k^{E,n} e^{-\tau^{E_k} \Delta t} - \frac{\sigma_1 \Delta t}{s_{m,1}} Thm_k^{E,n} e^{-\tau^{E_k} \Delta t} + \frac{s_1}{\Delta t} \frac{\partial Th_k^{E,n}}{\partial \sigma_1} \right] \\ \frac{\partial \overline{RC}_{F_i^{E'}}^{E',n}}{\partial \sigma_1} &= -\frac{|E'|}{3} \left[ \frac{\partial Thm_l^{E',n}}{\partial \sigma_1} \sigma_1 e^{-\tau^{E_i} \Delta t} + Thm_l^{E',n} e^{-\tau^{E_i} \Delta t} - \frac{\sigma_1 \Delta t}{s_{m,1}} Thm_l^{E',n} e^{-\tau^{E_i} \Delta t} + \frac{s_1}{\Delta t} \frac{\partial Th_l^{E',n}}{\partial \sigma_1} \right]\end{aligned}\quad (3.60)$$

Pour la matrice  $\partial[Mc]/\partial P_p^{Z_i}$  :

❖ Les coefficients diagonaux:

$$\begin{aligned}\frac{\partial mc_{XX}}{\partial P_p^{Z_1}} &= \frac{\overline{mc}_{XX}^E}{\partial P_p^{Z_1}} + \frac{\overline{mc}_{XX}^{E'}}{\partial P_p^{Z_1}} = \frac{\overline{mc}_{kk}^E}{\partial P_p^{Z_1}} + \frac{\overline{mc}_{ll}^{E'}}{\partial P_p^{Z_1}} \quad p=1,2,3 \\ \frac{\partial mc_{XX}}{\partial P_p^{Z_2}} &= 0\end{aligned}\quad (3.61)$$

Pour  $p = 1$

$$\begin{aligned}\frac{\overline{\partial mc}_{kk}^E}{\partial K_1} &= \frac{NB_{kk}^E}{K_1} \\ \frac{\overline{\partial mc}_{ll}^{E'}}{\partial K_1} &= \frac{NB_{ll}^{E'}}{K_1}\end{aligned}\quad (3.62)$$

Pour  $p = 2$

$$\begin{aligned}\frac{\overline{\partial mc}_{kk}^E}{\partial s_1} &= -\frac{|E|}{3\Delta t} \\ \frac{\overline{\partial mc}_{ll}^{E'}}{\partial s_1} &= -\frac{|E'|}{3\Delta t}\end{aligned}\quad (3.63)$$

Pour  $p = 3$

$$\begin{aligned}\frac{\overline{\partial mc}_{kk}^E}{\partial \sigma_1} &= -\frac{|E|}{3} \left[ 1 - \frac{\sigma_1 \Delta t}{s_{m,1}} \right] e^{-\tau^{E_k} \Delta t} \\ \frac{\overline{\partial mc}_{ll}^{E'}}{\partial \sigma_1} &= -\frac{|E'|}{3} \left[ 1 - \frac{\sigma_1 \Delta t}{s_{m,1}} \right] e^{-\tau^{E'_l} \Delta t}\end{aligned}\quad (3.64)$$

❖ Pour les coefficients hors-diagonaux:

Si le coté  $Y$  n'appartient pas au même élément que le coté  $X$ , alors:

$$\begin{aligned}\frac{\partial mc_{XY}}{\partial P_p^{Z_1}} &= 0 \\ \frac{\partial mc_{XX}}{\partial P_p^{Z_2}} &= 0\end{aligned}\quad p=1,2,3\quad (3.65)$$

Si l'élément  $E$  contient les cotés  $X$  et  $Y$ , répertoriés localement avec les indices respectifs  $k$  et  $l$ , alors:

$$\begin{aligned}\frac{\partial mc_{XY}}{\partial P_p^{Z_1}} &= \frac{\overline{\partial mc}_{XY}^E}{\partial P_p^{Z_1}} = \frac{\overline{\partial mc}_{ij}^E}{\partial P_p^{Z_1}} = \begin{cases} \frac{NB_{kl}^E}{K_1} & \text{pour } p=1 \\ 0 & \text{pour } p=2,3 \end{cases} \\ \frac{\partial mc_{XY}}{\partial P_p^{Z_2}} &= 0\end{aligned}\quad (3.66)$$

Si la le coté  $X$  vérifie la possibilité 2

Il faut remplacer l'indice des zones 1 par 2 et vis versa.

$$\frac{\partial Rc_X^n}{\partial P_p^{Z_1}} = 0 \quad \text{pour } p=1,2,3 \quad (3.67)$$

$$\frac{\partial Rc_X^n}{\partial P_p^{Z_2}} = \frac{\partial \overline{Rc}_X^{E,n}}{\partial P_p^{Z_2}} + \frac{\partial \overline{Rc}_X^{E',n}}{\partial P_p^{Z_2}} = \frac{\partial \overline{Rc}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial P_p^{Z_2}} + \frac{\partial \overline{Rc}_{F_l^{E'}}^{E',n}}{\partial P_p^{Z_2}}$$

Pour  $p = 1$

$$\frac{\partial \overline{Rc}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial K_2} = -\frac{|E|}{3} \left[ \sigma_2 \frac{\partial Thm_k^{E,n}}{\partial K_2} e^{-\tau^{E_k} \Delta t} + \frac{s_2}{\Delta t} \frac{\partial Th_k^{E,n}}{\partial K_2} \right] \quad (3.68)$$

$$\frac{\partial \overline{Rc}_{F_l^{E'}}^{E',n}}{\partial K_2} = -\frac{|E'|}{3} \left[ \sigma_2 \frac{\partial Thm_l^{E',n}}{\partial K_2} e^{-\tau^{E_l} \Delta t} + \frac{s_2}{\Delta t} \frac{\partial Th_l^{E',n}}{\partial K_2} \right]$$

avec

$$\tau^{E_k} = \tau^{E_l} = \frac{\sigma_2}{s_{m,2}} \quad (3.69)$$

Pour  $p = 2$

$$\frac{\partial \overline{Rc}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial s_2} = -\frac{|E|}{3} \left[ \sigma_2 \frac{\partial Thm_k^{E,n}}{\partial s_2} e^{-\tau^{E_k} \Delta t} + \frac{1}{\Delta t} Th_k^{E,n} + \frac{s_2}{\Delta t} \frac{\partial Th_k^{E,n}}{\partial s_2} \right] \quad (3.70)$$

$$\frac{\partial \overline{Rc}_{F_l^{E'}}^{E',n}}{\partial s_2} = -\frac{|E'|}{3} \left[ \sigma_2 \frac{\partial Thm_l^{E',n}}{\partial s_2} e^{-\tau^{E_l} \Delta t} + \frac{1}{\Delta t} Th_l^{E',n} + \frac{s_2}{\Delta t} \frac{\partial Th_l^{E',n}}{\partial s_2} \right]$$

Pour  $p = 3$

$$\frac{\partial \overline{Rc}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial \sigma_2} = -\frac{|E|}{3} \left[ \frac{\partial Thm_k^{E,n}}{\partial \sigma_2} \sigma_2 e^{-\tau^{E_k} \Delta t} + Thm_k^{E,n} e^{-\tau^{E_k} \Delta t} - \frac{\sigma_2 \Delta t}{s_{m,2}} Thm_k^{E,n} e^{-\tau^{E_k} \Delta t} + \frac{s_2}{\Delta t} \frac{\partial Th_k^{E,n}}{\partial \sigma_2} \right] \quad (3.71)$$

$$\frac{\partial \overline{Rc}_{F_l^{E'}}^{E',n}}{\partial \sigma_2} = -\frac{|E'|}{3} \left[ \frac{\partial Thm_l^{E',n}}{\partial \sigma_2} \sigma_2 e^{-\tau^{E_l} \Delta t} + Thm_l^{E',n} e^{-\tau^{E_l} \Delta t} - \frac{\sigma_2 \Delta t}{s_{m,2}} Thm_l^{E',n} e^{-\tau^{E_l} \Delta t} + \frac{s_2}{\Delta t} \frac{\partial Th_l^{E',n}}{\partial \sigma_2} \right]$$

Pour la matrice  $\partial[Mc]/\partial P_p^{Z_i}$  :

❖ Les coefficients diagonaux:

$$\frac{\partial mc_{XX}}{\partial P_p^{Z_1}} = 0 \quad p=1,2,3 \quad (3.72)$$

$$\frac{\partial mc_{XX}}{\partial P_p^{Z_2}} = \frac{\overline{mc}_{XX}^E}{\partial P_p^{Z_2}} + \frac{\overline{mc}_{XX}^{E'}}{\partial P_p^{Z_2}} = \frac{\overline{mc}_{kk}^E}{\partial P_p^{Z_2}} + \frac{\overline{mc}_{ll}^{E'}}{\partial P_p^{Z_2}}$$

Pour  $p = 1$

$$\frac{\overline{mc}_{kk}^E}{\partial K_2} = \frac{NB_{kk}^E}{K_2} \quad (3.73)$$

$$\frac{\overline{mc}_{ll}^{E'}}{\partial K_2} = \frac{NB_{ll}^E}{K_2}$$

Pour  $p = 2$

$$\frac{\overline{mc}_{kk}^E}{\partial s_2} = -\frac{|E|}{3\Delta t} \quad (3.74)$$

$$\frac{\overline{mc}_{ll}^{E'}}{\partial s_2} = -\frac{|E'|}{3\Delta t}$$

Pour  $p = 3$

$$\frac{\overline{mc}_{kk}^E}{\partial \sigma_2} = -\frac{|E|}{3} \left[ 1 - \frac{\sigma_2 \Delta t}{s_{m,2}} \right] e^{-\tau^{E_k} \Delta t} \quad (3.75)$$

$$\frac{\overline{mc}_{ll}^{E'}}{\partial \sigma_2} = -\frac{|E'|}{3} \left[ 1 - \frac{\sigma_1 \Delta t}{s_{m,2}} \right] e^{-\tau^{E_l} \Delta t}$$

❖ Pour les coefficients hors-diagonaux:

Si le coté  $e Y$  n'appartient pas au même élément que le coté  $X$ , alors:

$$\frac{\partial mc_{XY}}{\partial P_p^{Z_1}} = 0 \quad p=1,2,3 \quad (3.76)$$

$$\frac{\partial mc_{XX}}{\partial P_p^{Z_2}} = 0$$

Si l'élément  $E$  contient les cotés  $X$  et  $Y$ , répertoriés localement avec les indices respectifs  $k$  et  $l$ , alors:

$$\frac{\partial mc_{XY}}{\partial P_p^{Z_1}} = 0$$

$$\frac{\partial mc_{XY}}{\partial P_p^{Z_2}} = \frac{\overline{mc}_{XY}^E}{\partial P_p^{Z_2}} = \frac{\overline{mc}_{ij}^E}{\partial P_p^{Z_2}} = \begin{cases} \frac{NB_{kl}^E}{K_2} & \text{pour } p=1 \\ 0 & \text{pour } p=2,3 \end{cases} \quad (3.77)$$

Si le coté X vérifie la possibilité 3

Donc le calcul devient:

$$\frac{\partial Rc_X^n}{\partial P_p^{Z_1}} = \frac{\partial \overline{Rc}_X^{E,n}}{\partial P_p^{Z_1}} + \frac{\partial \overline{Rc}_X^{E',n}}{\partial P_p^{Z_1}} = \frac{\partial \overline{Rc}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial P_p^{Z_1}} + \frac{\partial \overline{Rc}_{F_l^{E'}}^{E',n}}{\partial P_p^{Z_1}} \quad p = 1, 2, 3 \quad (3.78)$$

$$\frac{\partial Rc_X^n}{\partial P_p^{Z_2}} = \frac{\partial \overline{Rc}_X^{E,n}}{\partial P_p^{Z_2}} + \frac{\partial \overline{Rc}_X^{E',n}}{\partial P_p^{Z_2}} = \frac{\partial \overline{Rc}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial P_p^{Z_2}} + \frac{\partial \overline{Rc}_{F_l^{E'}}^{E',n}}{\partial P_p^{Z_2}}$$

Pour  $p = 1$

$$\frac{\partial \overline{Rc}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial K_1} = -\frac{|E|}{3} \left[ \sigma_1 e^{-\tau^{E_k} \Delta t} \frac{\partial Thm_k^{E,n}}{\partial K_1} + \frac{s_1}{\Delta t} \frac{\partial Th_k^{E,n}}{\partial K_1} \right] \quad (3.79)$$

$$\frac{\partial \overline{Rc}_{F_l^{E'}}^{E',n}}{\partial K_1} = -\frac{|E'|}{3} \left[ \sigma_2 e^{-\tau^{E_l} \Delta t} \frac{\partial Thm_l^{E',n}}{\partial K_1} + \frac{s_2}{\Delta t} \frac{\partial Th_l^{E',n}}{\partial K_1} \right]$$

$$\frac{\partial \overline{Rc}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial K_2} = -\frac{|E|}{3} \left[ \sigma_1 e^{-\tau^{E_k} \Delta t} \frac{\partial Thm_k^{E,n}}{\partial K_2} + \frac{s_1}{\Delta t} \frac{\partial Th_k^{E,n}}{\partial K_2} \right] \quad (3.80)$$

$$\frac{\partial \overline{Rc}_{F_l^{E'}}^{E',n}}{\partial K_2} = -\frac{|E'|}{3} \left[ \sigma_2 e^{-\tau^{E_l} \Delta t} \frac{\partial Thm_l^{E',n}}{\partial K_2} + \frac{s_2}{\Delta t} \frac{\partial Th_l^{E',n}}{\partial K_2} \right]$$

avec

$$\tau^{E_k} = \tau^{E_l} = \frac{|E| \sigma_1 + |E'| \sigma_2}{|E| s_{m,1} + |E'| s_{m,2}} \quad (3.81)$$

Pour  $p = 2$

$$\frac{\partial \overline{Rc}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial s_1} = -\frac{|E|}{3} \left[ \sigma_1 \frac{\partial Thm_k^{E,n}}{\partial s_1} e^{-\tau^{E_k} \Delta t} + \frac{1}{\Delta t} Th_k^{E,n} + \frac{s_1}{\Delta t} \frac{\partial Th_k^{E,n}}{\partial s_1} \right] \quad (3.82)$$

$$\frac{\partial \overline{Rc}_{F_l^{E'}}^{E',n}}{\partial s_1} = -\frac{|E'|}{3} \left[ \sigma_2 \frac{\partial Thm_l^{E',n}}{\partial s_1} e^{-\tau^{E_l} \Delta t} + \frac{s_2}{\Delta t} \frac{\partial Th_l^{E',n}}{\partial s_1} \right]$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \overline{Rc}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial s_2} &= -\frac{|E|}{3} \left[ \sigma_1 e^{-\tau^{E_k} \Delta t} \frac{\partial Thm_k^{E,n}}{\partial s_2} + \frac{s_1}{\Delta t} \frac{\partial Th_k^{E,n}}{\partial s_2} \right] \\ \frac{\partial \overline{Rc}_{F_l^{E'}}^{E',n}}{\partial s_2} &= -\frac{|E'|}{3} \left[ \sigma_2 e^{-\tau^{E_l} \Delta t} \frac{\partial Thm_l^{E',n}}{\partial s_2} + \frac{1}{\Delta t} Th_l^{E',n} + \frac{s_2}{\Delta t} \frac{\partial Th_l^{E',n}}{\partial s_2} \right]\end{aligned}\quad (3.83)$$

Pour  $p = 3$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \overline{Rc}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial \sigma_1} &= \\ & -\frac{|E|}{3} \left[ Thm_k^{E,n} e^{-\tau^{E_k} \Delta t} - \frac{|E| \Delta t \sigma_1 Thm_k^{E,n} e^{-\tau^{E_k} \Delta t}}{|E|s_{m,1} + |E'|s_{m,2}} + \sigma_1 \frac{\partial Thm_k^{E,n}}{\partial \sigma_1} e^{-\tau^{E_k} \Delta t} + \frac{s_1}{\Delta t} \frac{\partial Th_k^{E,n}}{\partial \sigma_1} \right]\end{aligned}\quad (3.84)$$

$$\frac{\partial \overline{Rc}_{F_l^{E'}}^{E',n}}{\partial \sigma_1} = -\frac{|E'|}{3} \left[ -\frac{|E| \Delta t \sigma_2 Thm_l^{E',n} e^{-\tau^{E_l} \Delta t}}{|E|s_{m,1} + |E'|s_{m,2}} + \sigma_2 \frac{\partial Thm_l^{E',n}}{\partial \sigma_1} e^{-\tau^{E_l} \Delta t} + \frac{s_2}{\Delta t} \frac{\partial Th_l^{E',n}}{\partial \sigma_1} \right]$$

$$\frac{\partial \overline{Rc}_{F_k^E}^{E,n}}{\partial \sigma_2} = -\frac{|E|}{3} \left[ -\frac{|E'| \Delta t \sigma_1 Thm_k^{E,n} e^{-\tau^{E_k} \Delta t}}{|E|s_{m,1} + |E'|s_{m,2}} + \sigma_1 \frac{\partial Thm_k^{E,n}}{\partial \sigma_2} e^{-\tau^{E_k} \Delta t} + \frac{s_1}{\Delta t} \frac{\partial Th_k^{E,n}}{\partial \sigma_2} \right]$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \overline{Rc}_{F_l^{E'}}^{E',n}}{\partial \sigma_2} &= \\ & -\frac{|E'|}{3} \left[ e^{-\tau^{E_l} \Delta t} Thm_l^{E',n} - \frac{|E'| \Delta t \sigma_2 e^{-\tau^{E_l} \Delta t} Thm_l^{E',n}}{|E|s_{m,1} + |E'|s_{m,2}} + \sigma_2 e^{-\tau^{E_l} \Delta t} \frac{\partial Thm_l^{E',n}}{\partial \sigma_2} + \frac{s_2}{\Delta t} \frac{\partial Th_l^{E',n}}{\partial \sigma_2} \right]\end{aligned}\quad (3.85)$$

Pour la matrice  $\partial[Mc]/\partial P_p^{Z_i}$  :

❖ Pour les coefficients diagonaux:

$$\begin{aligned}\frac{\partial mc_{XX}}{\partial P_p^{Z_1}} &= \frac{\overline{mc}_{XX}^E}{\partial P_p^{Z_1}} + \frac{\overline{mc}_{XX}^{E'}}{\partial P_p^{Z_1}} = \frac{\overline{mc}_{kk}^E}{\partial P_p^{Z_1}} + \frac{\overline{mc}_{ll}^{E'}}{\partial P_p^{Z_1}} \\ \frac{\partial mc_{XX}}{\partial P_p^{Z_2}} &= \frac{\overline{mc}_{XX}^E}{\partial P_p^{Z_2}} + \frac{\overline{mc}_{XX}^{E'}}{\partial P_p^{Z_2}} = \frac{\overline{mc}_{kk}^E}{\partial P_p^{Z_2}} + \frac{\overline{mc}_{ll}^{E'}}{\partial P_p^{Z_2}}\end{aligned}\quad p = 1, 2, 3 \quad (3.86)$$

Pour  $p = 1$

$$\begin{aligned}
 \frac{\overline{\partial mc}_{kk}^E}{\partial K_1} &= \frac{NB_{kk}^E}{K_1} \\
 \frac{\overline{\partial mc}_{ll}^{E'}}{\partial K_1} &= 0 \\
 \frac{\overline{\partial mc}_{kk}^E}{\partial K_2} &= 0 \\
 \frac{\overline{\partial mc}_{ll}^{E'}}{\partial K_2} &= \frac{NB_{ll}^E}{K_2}
 \end{aligned} \tag{3.87}$$

Pour  $p = 2$

$$\begin{aligned}
 \frac{\overline{\partial mc}_{kk}^E}{\partial s_1} &= -\frac{|E|}{3\Delta t} \\
 \frac{\overline{\partial mc}_{ll}^{E'}}{\partial s_1} &= 0 \\
 \frac{\overline{\partial mc}_{kk}^E}{\partial s_2} &= 0 \\
 \frac{\overline{\partial mc}_{ll}^{E'}}{\partial s_2} &= -\frac{|E'|}{3\Delta t}
 \end{aligned} \tag{3.88}$$

Pour  $p = 3$

$$\begin{aligned}
 \frac{\overline{\partial mc}_{kk}^E}{\partial \sigma_1} &= -\frac{|E|}{3} \left[ 1 - \frac{|E| \sigma_1 \Delta t}{|E| s_{m,1} + |E'| s_{m,2}} \right] e^{-\tau^{E_k} \Delta t} \\
 \frac{\overline{\partial mc}_{ll}^{E'}}{\partial \sigma_1} &= \frac{|E| |E'| \sigma_2 \Delta t e^{-\tau^{E'_i} \Delta t}}{3(|E| s_{m,1} + |E'| s_{m,2})} \\
 \frac{\overline{\partial mc}_{kk}^E}{\partial \sigma_2} &= \frac{|E| |E'| \sigma_1 \Delta t e^{-\tau^{E_k} \Delta t}}{3(|E| s_{m,1} + |E'| s_{m,2})} \\
 \frac{\overline{\partial mc}_{ll}^{E'}}{\partial \sigma_2} &= -\frac{|E'|}{3} \left[ 1 - \frac{|E'| \sigma_2 \Delta t}{|E| s_{m,1} + |E'| s_{m,2}} \right] e^{-\tau^{E'_i} \Delta t}
 \end{aligned} \tag{3.89}$$

❖ Pour les coefficients hors-diagonaux:

Si le coté  $Y$  n'appartient pas au même élément que le coté  $X$ , alors:

$$\frac{\partial mc_{XY}}{\partial P_p^{Z_i}} = 0 \quad p=1,2,3 \text{ et } i=1,2 \tag{3.90}$$

Si l'élément  $E$  contient les cotés  $X$  et  $Y$ , répertoriées localement avec les indices respectifs  $k$  et  $l$ , alors:

$$\frac{\partial mc_{XY}}{\partial P_p^{Z_i}} = \frac{\overline{\partial mc_{XY}}}{\partial P_p^{Z_i}} = \frac{\overline{\partial mc_{ij}}}{\partial P_p^{Z_i}} = \begin{cases} \frac{NB_{kl}^E}{K_1} & \text{pour } p=1 \\ 0 & \text{pour } p=2,3 \end{cases} \quad (3.91)$$

Il reste à calculer les dérivées des  $Thm$  par rapport aux paramètres (équation (2.49)). En dérivant cette équation par rapport aux paramètres, on peut écrire:

$$\frac{\partial Thm_i^{E,n+1}}{\partial P_p^{Z_i}} = \frac{\partial}{\partial P_p^{Z_i}} \left[ \left( Thm_i^{E,n} - Th_i^{E,n+1} \right) e^{-\tau^{E_i} \Delta t} \right] + \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial P_p^{Z_i}} \quad p=1,2,3 / j=1,2 \quad (3.92)$$

Si le coté (i) de l'élément (E) vérifie la première possibilité donc  $\tau^{E_i} = \frac{\sigma_1}{s_{m,1}}$

Pour  $p = 1$  et  $j=1,2$ :

$$\frac{\partial Thm_i^{E,n+1}}{\partial K_j} = \left( \frac{\partial Thm_i^{E,n}}{\partial K_j} - \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial K_j} \right) e^{-\tau^{E_i} \Delta t} + \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial K_j} \quad (3.93)$$

Pour  $p = 2$  et  $i=1,2$ :

$$\frac{\partial Thm_i^{E,n+1}}{\partial s_j} = \left( \frac{\partial Thm_i^{E,n}}{\partial s_j} - \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial s_j} \right) e^{-\tau^{E_i} \Delta t} + \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial s_j} \quad (3.94)$$

Pour  $p = 3$

$$\begin{aligned} \frac{\partial Thm_i^{E,n+1}}{\partial \sigma_1} &= \left( \frac{\partial Thm_i^{E,n}}{\partial \sigma_1} - \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial \sigma_1} \right) e^{-\tau^{E_i} \Delta t} - \frac{\Delta t}{s_{m,1}} \left( Thm_i^{E,n} - Th_i^{E,n+1} \right) e^{-\tau^{E_i} \Delta t} + \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial \sigma_1} \\ \frac{\partial Thm_i^{E,n+1}}{\partial \sigma_2} &= \left( \frac{\partial Thm_i^{E,n}}{\partial \sigma_2} - \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial \sigma_2} \right) e^{-\tau^{E_i} \Delta t} + \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial \sigma_2} \end{aligned} \quad (3.95)$$

Si le coté (i) de l'élément (E) vérifie la deuxième possibilité donc  $\tau^{E_i} = \frac{\sigma_2}{s_{m,2}}$ ,  $p=1$  et  $p=2$  ne

changent pas. Il faut juste changer  $p=3$ :

$$\begin{aligned}\frac{\partial Thm_i^{E,n+1}}{\partial \sigma_1} &= \left( \frac{\partial Thm_i^{E,n}}{\partial \sigma_1} - \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial \sigma_1} \right) e^{-\tau^{E_i} \Delta t} + \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial \sigma_1} \\ \frac{\partial Thm_i^{E,n+1}}{\partial \sigma_2} &= \left( \frac{\partial Thm_i^{E,n}}{\partial \sigma_2} - \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial \sigma_2} \right) e^{-\tau^{E_i} \Delta t} - \frac{\Delta t}{s_{m,2}} \left( Thm_i^{E,n} - Th_i^{E,n+1} \right) e^{-\tau^{E_i} \Delta t} + \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial \sigma_2}\end{aligned}\quad (3.96)$$

Si le coté (i) de l'élément (E) vérifie la troisième possibilité donc  $\tau^{E_i} = \frac{|E|\sigma_1 + |E'|\sigma_2}{|E|s_{m,1} + |E'|s_{m,2}}$ ,  $p=1$

et  $p=2$  ne changent pas. Il faut juste changer  $p=3$ :

$$\begin{aligned}\frac{\partial Thm_i^{E,n+1}}{\partial \sigma_1} &= \left( \frac{\partial Thm_i^{E,n}}{\partial \sigma_1} - \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial \sigma_1} \right) e^{-\tau^{E_i} \Delta t} \\ &\quad - \frac{|E|\Delta t e^{-\tau^{E_i} \Delta t}}{|E|s_{m,1} + |E'|s_{m,2}} \left( Thm_i^{E,n} - Th_i^{E,n+1} \right) + \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial \sigma_1} \\ \frac{\partial Thm_i^{E,n+1}}{\partial \sigma_2} &= \left( \frac{\partial Thm_i^{E,n}}{\partial \sigma_2} - \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial \sigma_2} \right) e^{-\tau^{E_i} \Delta t} \\ &\quad - \frac{|E'|\Delta t e^{-\tau^{E_i} \Delta t}}{|E|s_{m,1} + |E'|s_{m,2}} \left( Thm_i^{E,n} - Th_i^{E,n+1} \right) + \frac{\partial Th_i^{E,n+1}}{\partial \sigma_2}\end{aligned}\quad (3.97)$$

### 5.5 La matrice Jacobienne

La matrice Jacobienne nécessaire pour la méthode de Marquart-Levenberg est définie par les dérivées des variables d'état par rapport aux paramètres. On suppose qu'on a un domaine hétérogène avec  $Nz$  zones et que le problème est simulé avec  $N$  pas de temps. Et soit  $Nf$  le nombre de cotés dans le maillage. Avec ces hypothèses, la matrice Jacobienne sera formée par  $2 \times Nf \times N$  lignes et  $3 \times Nz$  colonnes. Elle est définie par la matrice à deux blocs suivante:

$$\mathcal{J} \left( K_1, s_1, \sigma_1, \dots, K_p, s_p, \sigma_p, \dots, K_{Nz}, s_{Nz}, \sigma_{Nz} \right) = \begin{bmatrix} \left[ \mathcal{J}^f \right] \\ \left[ \mathcal{J}^m \right] \end{bmatrix}\quad (3.98)$$

La première matrice  $\left[ \mathcal{J}^f \right]$  représente les dérivées des charges dans les fractures par rapport aux paramètres. Elle est formée par  $Nf \times N$  lignes et  $3 \times Nz$  colonnes. La forme générale de cette matrice est donnée par :

$$\mathcal{J}^f = \begin{bmatrix} \frac{\partial Th_1^1}{\partial K_1} & \frac{\partial Th_1^1}{\partial s_1} & \frac{\partial Th_1^1}{\partial \sigma_1} & \cdot & \cdot & \cdot & \frac{\partial Th_1^1}{\partial K_{Nz}} & \frac{\partial Th_1^1}{\partial s_{Nz}} & \frac{\partial Th_1^1}{\partial \sigma_{Nz}} \\ \frac{\partial Th_2^1}{\partial K_1} & \frac{\partial Th_2^1}{\partial s_1} & \frac{\partial Th_2^1}{\partial \sigma_1} & \cdot & \cdot & \cdot & \frac{\partial Th_2^1}{\partial K_{Nz}} & \frac{\partial Th_2^1}{\partial s_{Nz}} & \frac{\partial Th_2^1}{\partial \sigma_{Nz}} \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \frac{\partial Th_{Nf}^1}{\partial K_1} & \frac{\partial Th_{Nf}^1}{\partial s_1} & \frac{\partial Th_{Nf}^1}{\partial \sigma_1} & \cdot & \cdot & \cdot & \frac{\partial Th_{Nf}^1}{\partial K_{Nz}} & \frac{\partial Th_{Nf}^1}{\partial s_{Nz}} & \frac{\partial Th_{Nf}^1}{\partial \sigma_{Nz}} \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \frac{\partial Th_1^N}{\partial K_1} & \frac{\partial Th_1^N}{\partial s_1} & \frac{\partial Th_1^N}{\partial \sigma_1} & \cdot & \cdot & \cdot & \frac{\partial Th_1^N}{\partial K_{Nz}} & \frac{\partial Th_1^N}{\partial s_{Nz}} & \frac{\partial Th_1^N}{\partial \sigma_{Nz}} \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \frac{\partial Th_{Nf}^N}{\partial K_1} & \frac{\partial Th_{Nf}^N}{\partial s_1} & \frac{\partial Th_{Nf}^N}{\partial \sigma_1} & \cdot & \cdot & \cdot & \frac{\partial Th_{Nf}^N}{\partial K_{Nz}} & \frac{\partial Th_{Nf}^N}{\partial s_{Nz}} & \frac{\partial Th_{Nf}^N}{\partial \sigma_{Nz}} \end{bmatrix} \quad (3.99)$$

La deuxième matrice  $[\mathcal{J}^m]$  représente les dérivées des charges dans les matrices poreuses par rapport aux paramètres. Elle a la même structure que la matrice  $[\mathcal{J}^f]$  et elle peut être obtenue en remplaçant les  $Th$  par  $Thm$  dans l'équation (3.99).

## 6. L'algorithme du code INV\_EDM

Dans cette partie on présente l'algorithme utilisé dans le modèle INV\_EDM pour l'estimation des paramètres d'écoulement en milieu fracturé. L'algorithme nécessite les étapes suivantes:

- a- Lecture des paramètres d'entrés: Discrétisation spatiale, discrétisation temporelle, un jeu des paramètres initial  $(K_i^{init}, s_i^{init}, s_i^{init}, \sigma_i^{init}, i = 1, Nz)$ , les traces des charges initiales  $\{Th^0\}$  et  $\{Thm^0\}$  et ses dérivées par rapport aux paramètres  $\partial\{Th^0\}/\partial P_{p=1..3}^{Z_{i=1..nz}}$  et  $\partial\{Thm^0\}/\partial P_{p=1..3}^{Z_{i=1..nz}}$  ( $Nz$  étant le nombre de zones dans le domaine).

- b- Avec le jeu des paramètres  $(K_i^{init}, s_i^{init}, s_i^{init}, \sigma_i^{init})$  on calcul la matrice  $M_c$  et ses dérivées par rapport aux paramètres  $\partial M_c / \partial P_{p=1..3}^{Z_{i=1..nz}}$  (la matrice  $M_c$  et ses dérivées ne dépendent pas du temps, donc ce calcul est fait à l'extérieur de la boucle du temps).
- c- Décomposition de la matrice  $M_c$  en  $M_c = LU$  avec le solveur direct UMFPACK (la décomposition LU est faite à l'extérieur de la boucle du temps car la matrice  $M_c$  est indépendante du temps).
- d- **Pour  $n=0, N-1$**  (Boucle sur les pas de temps)
- e- Utilisation de la décomposition  $LU$  pour résoudre le problème direct afin de calculer  $Th^{n+1}$  et  $Thm^{n+1}$
- f- **Pour  $i=1, Nz$**
- g- **Pour  $p=1, 3$**
- h- Calcul les dérivées  $\partial Th^{n+1} / \partial P_p^{Z_i}$  et  $\partial Thm^{n+1} / \partial P_p^{Z_i}$  en résolvant le système (3.55). On note ici que ce système a la même matrice que le système directe ( $M_c$ ). Donc pour la résolution, on utilise la décomposition LU déjà calculée dans l'étape (c).
- i- **Fin de p**
- j- **Fin de i**
- k- **Fin de n**
- l- Calcul du gradient de la fonction 'objectif' en utilisant l'équation (3.35).
- m- Calcul de la matrice Jacobienne via les équations (3.98) et (3.99).
- n- Utilisation l'algorithme de Marquardt-Levenberg pour la minimisation avec le calcul la direction en résolvant l'équation (3.31) et du nouveau jeu de paramètres en utilisant l'équation (3.30)
- o- Si le gradient de la fonction 'objectif' et la fonction elle-même sont supérieures à une tolérance (imposée par l'utilisateur), on revient à l'étape (b) mais avec le nouveau jeu des paramètres. Sinon, l'algorithme converge et le nouveau jeu des paramètres représente la solution du problème

L'algorithme utilisé dans le modèle INV\_EDM est présenté dans la figure (3.6)

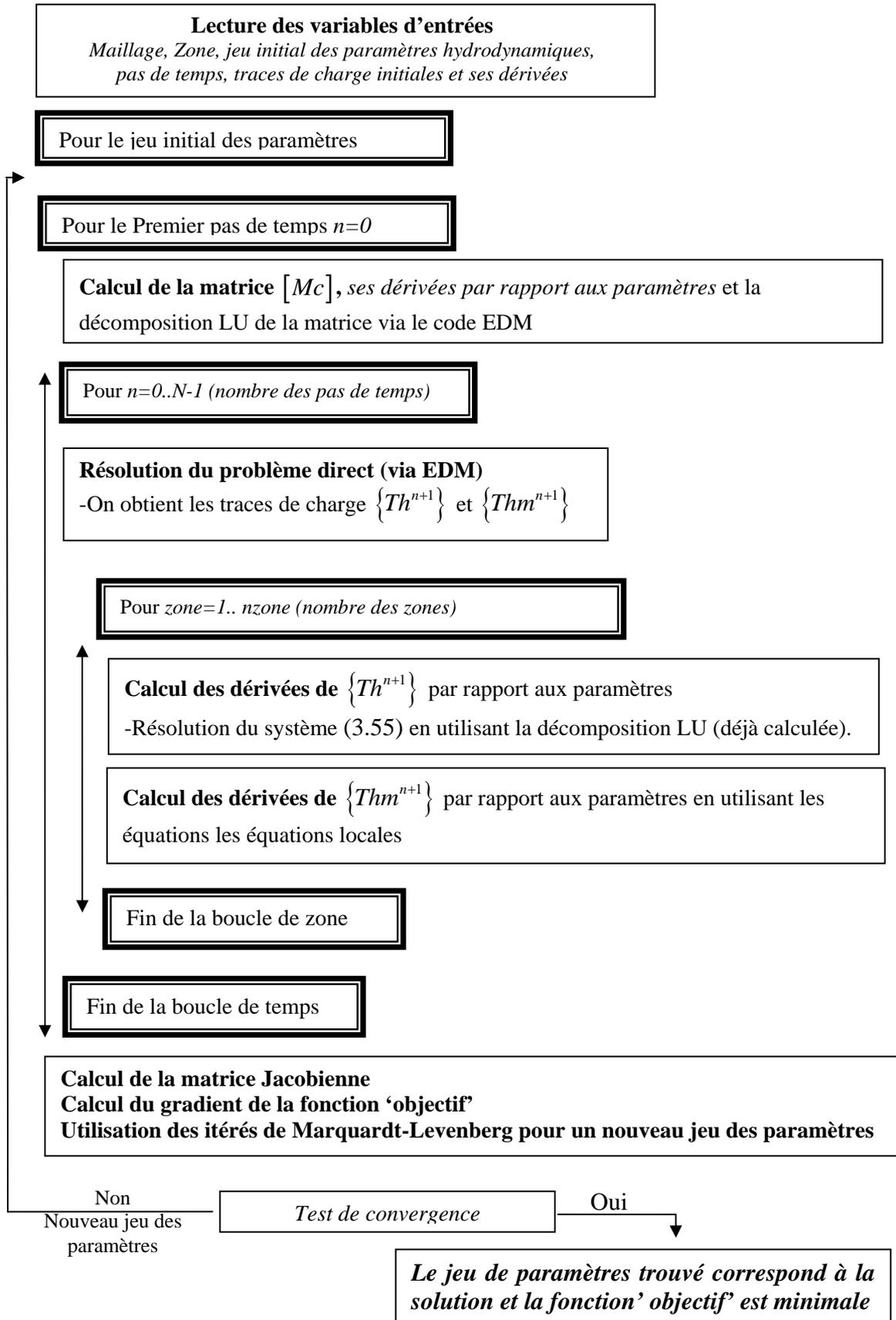


Figure 3.6 : Algorithme du code INV\_EDM.

## 7. Expériences numériques

Une expérience numérique a été réalisée pour étudier l'efficacité du modèle numérique INV\_EDM. C'est la convergence du modèle en fonction des paramètres initiaux. L'effet du nombre de points de mesure et l'effet des erreurs sur les valeurs mesurées seront étudiées dans le quatrième chapitre.

### 7.1 Convergence en fonction des paramètres initiaux

Pour étudier la convergence du modèle INV\_EDM, nous allons tracer les cartes de convergence en fonction des paramètres initiaux. Pour ce faire, on considère le premier cas test du chapitre précédent (voir chapitre 2, section 7.1.1). On suppose que les valeurs des paramètres sont inconnues et qu'on dispose des valeurs mesurées sur les charges dans les fractures et dans les matrices poreuses. Les valeurs mesurées sont obtenues en simulant le problème avec le modèle EDM (problème direct) et en utilisant les vrais paramètres solution du problème inverse. Pour la discrétisation temporelle, on utilise  $\Delta t = 100s$ . Sachant que  $K$  varie entre  $K_{\min} = 10^{-10}$  et  $K_{\max} = 10^{-2}$ ,  $S$  varie entre  $S_{\min} = 10^{-8}$  et  $S_{\max} = 10^{-3}$  et  $\sigma$  varie entre  $\sigma_{\min} = 10^{-11}$  et  $\sigma_{\max} = 10^{-6}$ , les cartes de convergence en fonction de  $(K^{init}, S^{init})$ ,  $(K^{init}, \sigma^{init})$  et  $(S^{init}, \sigma^{init})$  sont représentées sur les figures (3.7, 3.8 et 3.9). Sur la figure 3.7 la carte est représentée avec un maillage de  $10^4$  nœuds ( $100 \times 100$ ). Chaque nœuds  $(i,j)$  correspond à une simulation du modèle INV\_EDM avec :

$$K^{init} = 10^{(-Pk_{\min} + i*dk)} \quad (3.100)$$

$$S^{init} = 10^{(-Ps_{\min} + j*ds)} \quad (3.101)$$

$dk = \frac{Pk_{\max} - Pk_{\min}}{100}$  le pas suivant (K) et  $ds = \frac{Ps_{\max} - Ps_{\min}}{100}$  le pas suivant (S).

$Pk_{\min} = -10$ ,  $Ps_{\min} = -8$ ,  $Pk_{\max} = -2$  et  $Ps_{\max} = -3$  sont les exposants de  $K_{\min}$ ,  $S_{\min}$ ,  $K_{\max}$ ,  $S_{\max}$  respectivement. Le couleur rouge représente la zone de convergence et le couleur bleu représente la zone de non convergence (fonction 'objectif' non nulle). La figure 3.7 montre que la zone de convergence couvre 95% de la carte. Le modèle INV\_EDM est peu sensible aux paramètres initiaux  $K^{init}$ ,  $S^{init}$  pour cet exemple. Les cartes des figures 3.8 et 3.9 sont calculées de la même façon mais en faisant varier  $(K^{init}, \sigma^{init})$  et  $(S^{init}, \sigma^{init})$ . Sur les figures

3.8 et 3.9, les zones de convergence représentent 60% du domaine. Ces figures montrent que le modèle INV\_EDM est plus sensible, dans ce cas au paramètre  $\sigma^{init}$  qu'aux  $K^{init}$ ,  $S^{init}$ .

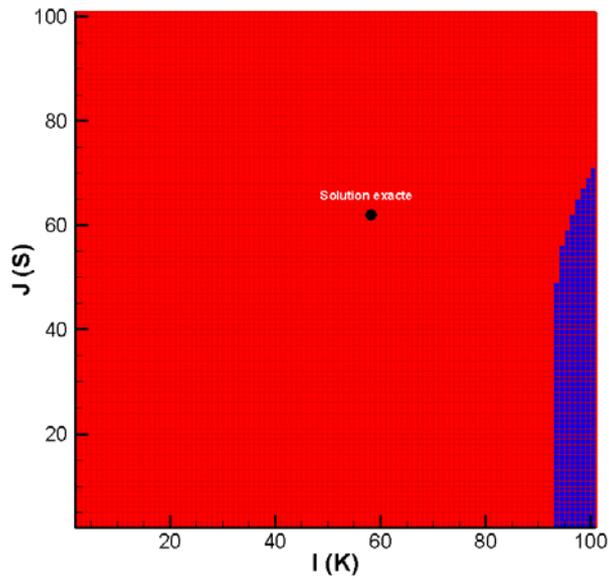


Figure 3.7 : Carte de convergence (K, S)

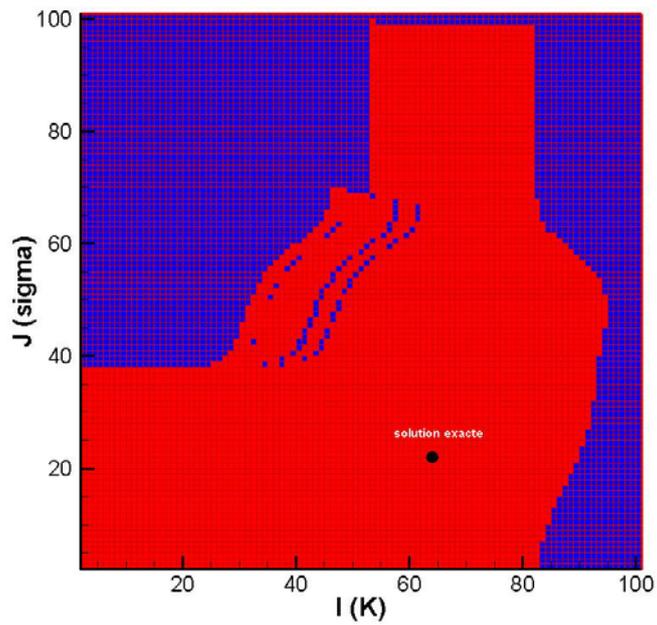


Figure 3.8 : Carte de convergence (K,  $\sigma$ )

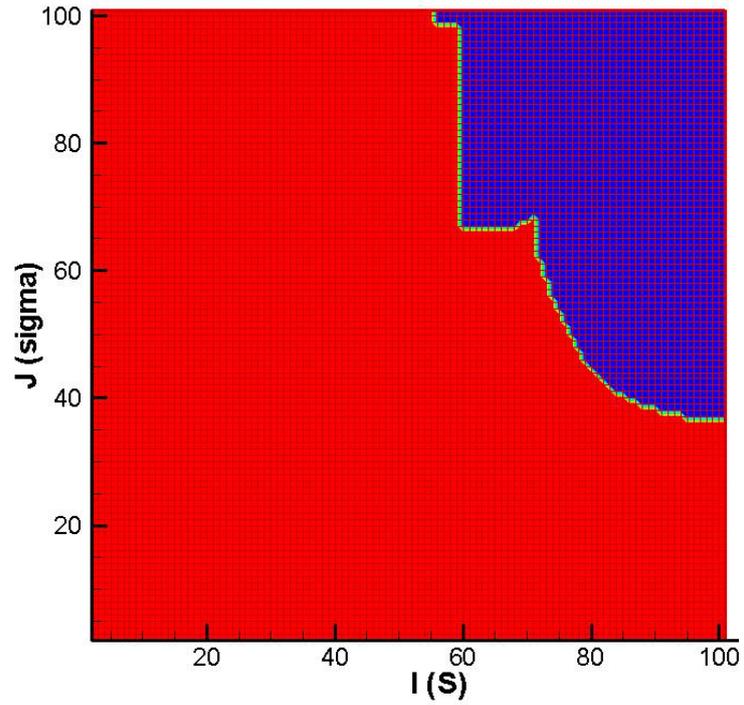


Figure 3.9 : Carte de convergence (K,S)

La figure 3.10 représente la carte de convergence du modèle INV\_EDM dans le cas où les trois paramètres sont inconnus. La carte est obtenue avec un maillage 3D (20×20×20). Cette figure montre que la zone de convergence couvre 70% de la carte.

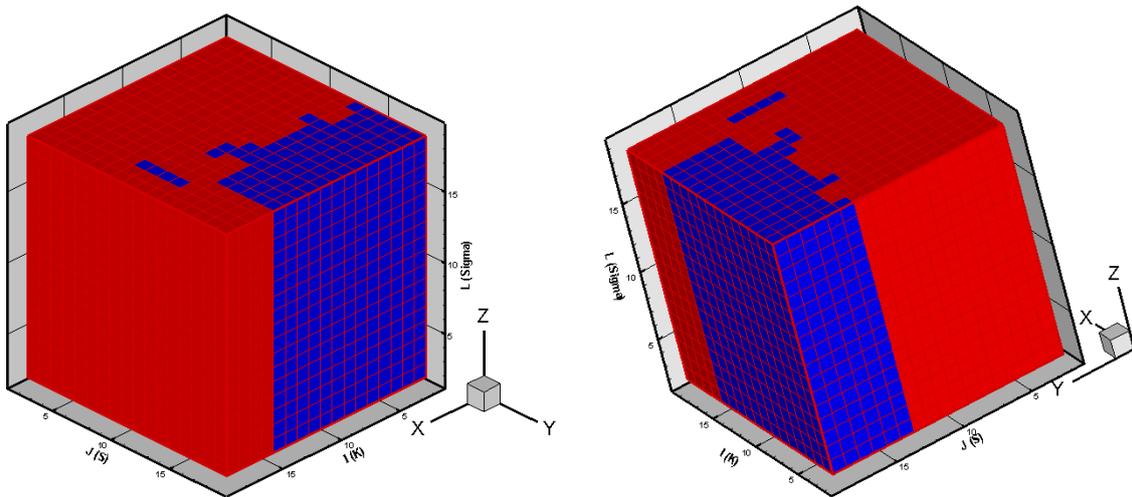


Figure 3.10 : Carte de convergence pour 3 paramètres (x,y,z) correspondant à (K, S,  $\sigma$ )

## 8. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons développé un nouveau modèle (INV\_EDM) pour l'estimation des paramètres d'écoulement en milieu fracturé. Dans ce nouveau modèle, nous avons utilisé des techniques numériques robustes afin d'obtenir une solution précise avec un temps de calcul optimal.

Dans le modèle INV\_EDM, le problème inverse est résolu avec une méthode indirecte non linéaire. Cette méthode consiste à minimiser une fonction 'objectif' donnée par l'écart quadratique entre des charges mesurées et calculées aux divers points d'observation. Pour les charges calculées, on a utilisé dans ce travail la méthode des éléments finis mixtes hybrides (EFMH) via le code EDM. La minimisation de la fonction 'objectif' est faite avec la méthode de Marquart-Levenberg qui est globalement convergente. Cette méthode nécessite le calcul des dérivées des charges par rapport aux paramètres, ce qui est fait dans le modèle INV\_EDM avec la méthode de sensibilité qui nécessite le calcul des dérivées de la matrice de masse du système direct ainsi que de son terme de second membre par rapport aux paramètres. Ces dérivées sont calculées analytiquement dans le code INV\_EDM ce qui permet de minimiser le temps de calcul. Le nombre de systèmes linéaires à résoudre est égal au nombre de paramètres à estimer (trois fois le nombre des zones), ce qui rend la méthode de sensibilité très coûteuse en terme de temps de calcul. Pour éviter ce problème, on a implémenté dans INV\_EDM le solveur direct UMFPACK. Sachant que pour le système direct et pour les systèmes résultants de la sensibilité les matrices sont identiques (la matrice de masse), le solveur UMFPACK permet de réduire le temps de calcul en calculant la décomposition LU une seule fois par jeu des paramètres. Enfin, une expérience numérique a été réalisée pour vérifier les résultats du code INV\_EDM.



# Chapitre 4

## Paramétrisation et indicateur de raffinement

- 1. Introduction**
- 2. Formulation du problème inverse**
  - 2.1 Information a priori
  - 2.2 Paramétrisation
- 3. Méthodes de Paramétrisation**
  - 3.1 Paramétrisation par interpolation
  - 3.2 Paramétrisation par la procédure multi – échelle
  - 3.3 Paramétrisation par zonation
- 4. Indicateurs de raffinement**
  - 4.1 Technique de résolution avec les indicateurs de raffinement
  - 4.2 Calcul des indicateurs de raffinement
- 5. Méthode des états adjoints**
  - 5.1 Calcul mathématique
- 6. Algorithmes**
  - 6.1 Maillage et types des indicateurs
  - 6.2 Algorithme *EDM\_PARAM*
- 7. Résultats Numérique**
- 8. Application sur un cas réel « Site Expérimental Hydrogéologique de Poitiers»**
  - 8.1 Présentation du site
  - 8.2 Simulation avec le modèle *EDM\_PARAM*
    - 8.2.1 *Discretisation spatiale et temporelle*
    - 8.2.2 *Estimation de paramètres*
  - 8.3 Simulation avec les données de l'année 2005
- 9. Discussion des résultats**
  - 9.1 Comparaison entre les résultats du modèle *EDM\_PRAM* et ceux d'Ackerer and Delay (2009)
    - 9.1.1 *Conductivité*
    - 9.1.2 *Coefficient d'emmagasinement*
- 10 Conclusion**

### 1. Introduction

Les méthodes numériques utilisées pour obtenir les valeurs calculées en résolvant l'équation d'état nécessitent la discrétisation de l'espace, ce qui engendre un grand nombre d'éléments. Pour un domaine hétérogène, chacun de ces éléments peut se voir affecter d'une valeur inconnue et différente pour chaque paramètre. Le problème inverse peut donc posséder un nombre fini d'inconnues (ou degrés de liberté) considérées comme les paramètres ajustables du système qui peut être égal au nombre de mailles. Sachant que le nombre d'observations concernant la variable d'état peut être plus faible que le nombre d'éléments, il est clair que le nombre d'inconnues est bien trop élevé et doit impérativement être réduit pour rendre le

problème inverse bien posé. Une procédure de paramétrisation est alors mise en œuvre pour réduire le nombre de ces inconnues. La paramétrisation est une technique utilisée pour simplifier la structure de l'espace de paramètres de telle sorte qu'elle puisse être représentée par un espace de dimension inférieure (Sun, 1994). Il s'agit par exemple du passage d'un paramètre par maille à un paramètre par zone pour une formulation déterministe du problème inverse.

Dans ce chapitre, nous allons, dans un premier temps, présenter les quelques méthodes de paramétrisation et, dans un second temps, développer un nouveau modèle numérique permettant la paramétrisation pour l'écoulement en double milieu. Le nouveau modèle développé dans ce travail est basé sur la méthode de zonation. Les positions des discontinuités (de l'hétérogénéité) sont localisées par des indicateurs de raffinements. Ces indicateurs nécessitent le calcul du gradient de la fonction objective par maille ce qui est assuré par la méthode des états adjoints.

## **2. Formulation du problème inverse**

Afin d'améliorer la formulation du problème inverse, différentes mesures peuvent être prises telles que la réduction du nombre de paramètres à estimer (paramétrisation) ou la prise en compte de mesures directes et locales des paramètres estimés (information a priori).

### **2.1 Information a priori**

L'information a priori correspond à une information directe sur la variable inconnue du problème inverse. Elle consiste en des valeurs «locales» des paramètres le plus souvent obtenues par interprétation d'essais de pompage et donc généralement disponibles en un nombre limité de points au sein du domaine. Ces informations peuvent être prises en compte à l'aide d'un critère qui mesure l'écart entre les paramètres optimisés et les estimations a priori de ces paramètres.

### **2.2 Paramétrisation**

La paramétrisation consiste à réduire le nombre de paramètres à identifier par l'approche inverse. Yeh et Yoon (1981), Sun et al. (1998), Carrera et Neuman (1986) se sont penchés sur l'importance de la réduction du nombre de paramètres.

La paramétrisation rend le problème plus stable, ce qui réduit les difficultés de convergence et rend le problème «mieux posé». Deux types d'erreurs sont associés au problème inverse: l'erreur de modélisation et l'erreur associée à l'incertitude des paramètres. Une augmentation

du nombre de paramètres va généralement réduire l'erreur du modèle, mais va augmenter l'incertitude des paramètres utilisés et inversement. Le niveau optimal de paramétrisation dépend donc de la quantité et de la qualité des observations. De manière générale, afin d'obtenir une solution valide, le nombre de paramètres ajustables doit être inférieur au nombre d'observations.

### **3. Méthodes de paramétrisation**

Différents types de paramétrisation sont proposés dans la littérature, tels que la zonation (Cooley, 1977), l'interpolation (Yeh et Yoon, 1981 ; Kitanidis et Vomvoris, 1983), la procédure multi – échelle (Siegel, 1997), la tessellation de Voronoï, ....

#### **3.1 Paramétrisation par interpolation**

La paramétrisation par interpolation consiste à diviser le domaine en un certain nombre d'éléments reliés entre eux par des nœuds. Chaque nœud est associé à une fonction de base locale. La fonction inconnue décrivant les paramètres est alors approchée par une combinaison linéaire des fonctions de base.

Une fois les valeurs nodales déterminées, la valeur du paramètre en chaque point du domaine sera calculée par interpolation. Le choix des fonctions de bases n'est pas unique. On se réfère ici aux travaux de DiStifano et Rath (1975); Yoon et Yeh (1976) ; Yeh et Yoon (1981).

#### **3.2 Paramétrisation par la procédure multi – échelle**

La procédure multiéchelle (Siegel, 1995) se base sur la paramétrisation par interpolation. Cette procédure consiste à discrétiser l'espace des paramètres par de grandes mailles de forme triangulaire ou bien rectangulaire. Le nombre de paramètre est égal au celui de sommets du maillage multiéchelle et non au nombre de mailles. Les paramètres du maillage de calcul sont calculés par interpolation linéaire sur chaque maille du maillage multiéchelle.

Le maillage des paramètres est affiné jusqu'à ce que la différence entre les charges calculées et mesurées soit inférieure à une limite fixée. Dans cette procédure, les inconnues sont les valeurs des paramètres aux nœuds du maillage multiéchelle. Pour chaque niveau d'affinement, on minimise la fonction 'objectif' jusqu'à ce que le gradient soit suffisamment petit. La figure (4.1) montre les différentes étapes de cette procédure.

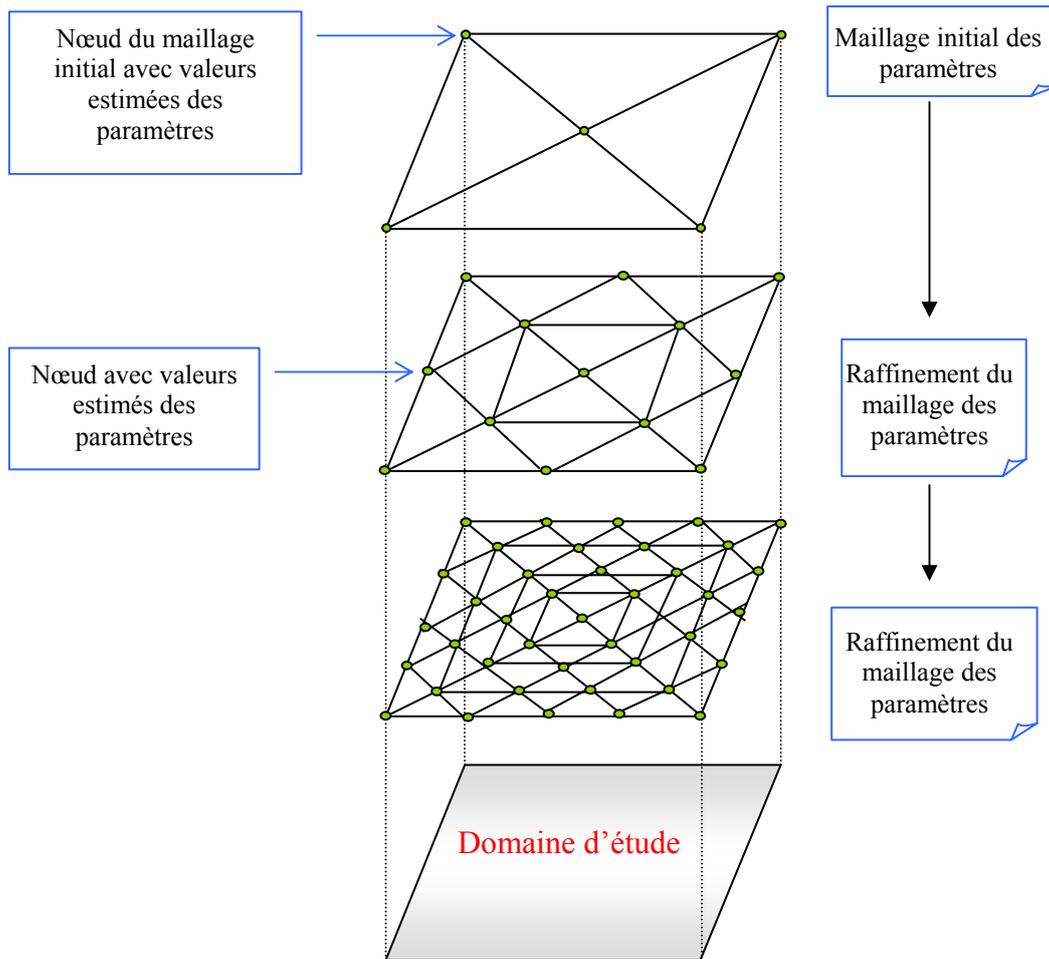


Figure 4.1 : Procédure multi – échelle.

### 3.3 Paramétrisation par zonation

La technique de zonation est la plus utilisée parmi les méthodes de paramétrisation en raison de son simplicité. Elle consiste à subdiviser le domaine étudié en plusieurs zones (figure 4.2) auxquelles est affectée une valeur inconnue et constante des paramètres à estimer (Sun, 1994). Le nombre d'inconnues (paramètres) est donc égal au nombre de zones multiplié par le nombre de paramètres par zone. Le choix de ces zones est étudié par Chow et Anderson (1991). Les erreurs introduites par cette méthode proviennent de l'uniformité de la valeur des paramètres dans chaque zone et de l'incertitude sur la géométrie de ces zones.

Parmi les auteurs qui ont utilisé la méthode de zonation, on peut citer : Yeh et Yoon (1976) ; Zheng et Wang (1996); Eppstein et Dougherty (1996); Sun et al. (1998) ; Tsai et al. (2003 a, 2003 b).

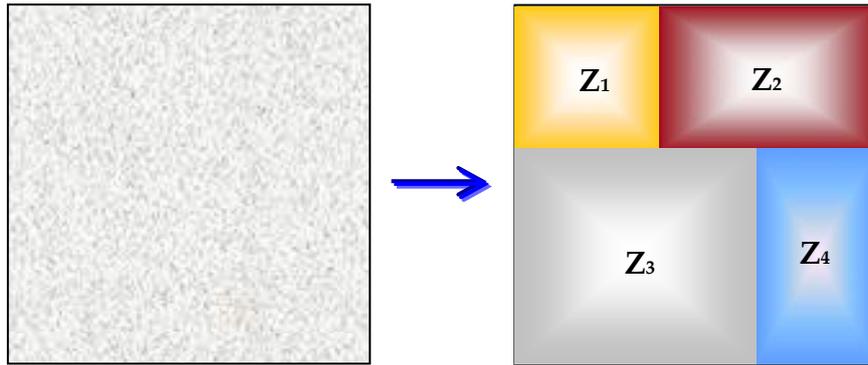


Figure 4.2 : Domaine divisé en plusieurs zones (technique zonation).

Dans ce travail, on s'intéresse à la méthode de zonation. Cette méthode sera adoptée dans la section suivante pour la paramétrisation de l'écoulement en double milieu.

#### 4. Indicateurs de raffinement

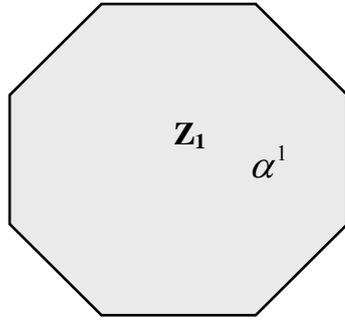
La paramétrisation par la méthode de zonation consiste à affecter une valeur inconnue et constante des paramètres à estimer. Les inconnues sont donc les valeurs des paramètres par zone et la répartition géométrique de ces zones.

La notion d'indicateurs de raffinement a été introduite par Chavent et Bissel (1998). Etant donnée une paramétrisation initiale, les indicateurs de raffinement nous permettront de localiser des discontinuités qui pourraient exister et qui n'ont pas encore été prises en considération et de construire une nouvelle partition de paramétrisation. Précisément, à chaque paramètre ajouté à la paramétrisation, correspond un indicateur de raffinement. La technique des indicateurs de raffinement va nous permettre de construire une telle partition avec un nombre de zones aussi petit que possible. Cette approche a été appliquée à un problème d'estimation de la conductivité hydraulique en régime permanent (Ben Ameer et al., 2002), en régime transitoire (Hayek and Ackerer, 2007) et à l'estimation des paramètres en milieux non saturés en eau (Hayek et al., 2008).

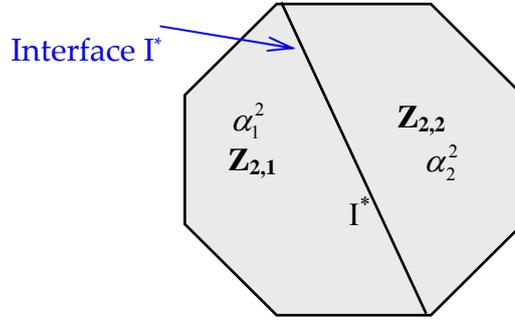
##### 4.1 Technique de résolution avec les indicateurs de raffinement

Pour la simplicité de la présentation de la technique de fonctionnement des indicateurs de raffinement, considérons le cas où une seule zone ( $Z_1$ ) couvre le domaine avec  $\alpha^1$  la valeur du paramètre. Nous avons alors seulement une valeur du paramètre  $\alpha$  à estimer, ce qui est fait par la minimisation de la fonction 'objectif' par rapport à cette variable. Cela correspond à

une paramétrisation d'une zone,  $P_1$  (figure 4.3). Le raffinement consiste à construire la paramétrisation 2 notée  $P_2$ , formée de deux zones  $Z_{2,1}$  et  $Z_{2,2}$  des paramètres  $\alpha_1^2$  et  $\alpha_2^2$  respectivement (figure 4.4).



(a)



(b)

Figure 4.3 : Paramétrisation  $P_1$  (1 zone)

Figure 4.4: Paramétrisation  $P_2$  (2 zone)

L'ajout de l'interface  $I^*$  au domaine divise  $Z_1$  en deux sous – zones ayant chacune des valeurs des paramètres différentes. Les valeurs de paramètres  $\alpha^1$  seront  $\alpha_1^2$  et  $\alpha_2^2$  pour les deux zones  $Z_{2,1}$  et  $Z_{2,2}$  respectivement.

Notons  $\alpha^1$  et  $J_1^*$ ,  $\alpha_2^*=(\alpha_1^{2*},\alpha_2^{2*})^T$  et  $J_2^*$  les valeurs optimales des paramètres et de la fonction 'objectif' respectivement en considérant les deux paramétrisations  $P_1$  et  $P_2$ .

On introduit une variable de discontinuité définie par :

$$\mu=\alpha_1^{2*}-\alpha_2^{2*} \tag{4.1}$$

Si cette variable est connue, alors la recherche du paramètre  $\alpha_2^*=(\alpha_1^{2*},\alpha_2^{2*})^T$  correspond à la minimisation de la fonction 'objectif'  $J_2$  (optimisation de la fonction 'objectif'  $J$  en considérant la paramétrisation  $P_2$ ) sous la contrainte  $\alpha_1^{2*}-\alpha_2^{2*}=\mu$ .

On peut remarquer que la minimisation de  $J_2$  sous la contrainte  $\alpha_1^{2*}-\alpha_2^{2*}=0$  donne les valeurs optimales  $\alpha^1$  et  $J_1^*$  obtenues avec la paramétrisation  $P_1$ . D'une façon générale, si on introduit  $np$  paramètres supplémentaires, la contrainte  $\alpha_1^{2*}-\alpha_2^{2*}=\mu$  se généralise en

$$A\alpha_2=\mu \tag{4.2}$$

Avec  $\mu$  est le vecteur de discontinuité,  $\alpha_2 = (\alpha_1^2, \alpha_2^2)^T$  et A la matrice rectangulaire de dimension  $np \times (np+1)$  suivante :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & . & . & . & . \\ 0 & 1 & -1 & 0 & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . & . \\ 0 & 0 & 0 & . & . & . & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Donc on peut écrire le problème de minimisation sous la forme suivante :

$$J(\alpha_2^*(\mu)) = \min_{A\alpha_2 = \mu} J(\alpha) \tag{4.3}$$

On considère une fonction  $\varphi(\mu) = J(\alpha_2^*(\mu))$  pour tout  $\mu \in R$ . La formule de Taylor à l'ordre de 1 appliquée à la fonction  $\varphi$  s'écrit :

$$\varphi(\mu) = \varphi(0) + \mu\varphi'(0) \tag{4.4}$$

Remarquant que  $\varphi(0) = J_1^*$  et notons  $\lambda^* = \varphi'(0) = \left. \frac{dJ(\alpha_2^*(\mu))}{d\mu} \right|_{\mu=0}$ . En remplaçant  $\mu$  par

$\alpha_1^{2*} - \alpha_2^{2*}$  nous obtenons :

$$J_2^* - J_1^* = (\alpha_1^{2*} - \alpha_2^{2*})\lambda^* \tag{4.5}$$

On remarque que  $J_2^* - J_1^* = (\alpha_1^{2*} - \alpha_2^{2*})\lambda^*$ , alors :

- Pour une valeur positive de  $\lambda^*$ , la valeur optimal de  $J_2^*$  est inférieure à la valeur optimale de  $J_1^*$  si et seulement si la discontinuité  $\mu$  est négative
- Pour une valeur négative de  $\lambda^*$ , la valeur optimal de  $J_2^*$  est inférieure à la valeur optimale de  $J_1^*$  si et seulement si la discontinuité  $\mu$  est positive

On déduit que  $\lambda^*$  est un indice de la minimisation puisqu'il nous donne l'écart entre la valeur optimal de la fonction 'objectif'  $J_1^*$  et la valeur optimale de  $J_2^*$  en introduisant une interface  $I^*$ .  $\lambda^*$  s'appelle l'indicateur de raffinement correspondant au paramètre ajouté. Alors que le choix de cette interface dépend de la valeur de l'indicateur de raffinement  $\lambda^*$ , et au lieu de

chercher la position de l'interface qui minimise  $J_2^*$ , nous cherchons la plus grande valeur de  $|\lambda^*|$  qui nous donne la bonne position de l'interface.

## 4.2 Calcul des indicateurs de raffinement

Rappelons que  $\alpha^{1*}$  et  $J_1^*$ ,  $\alpha_2^*=(\alpha_1^{2*},\alpha_2^{2*})^T$  et  $J_2^*$  les valeurs optimales des paramètres et de la fonction 'objectif' respectivement en considérant les deux paramétrisations  $P_1$  et  $P_2$ .

On suppose que le paramètre pour chaque zone est :

$$\begin{aligned}\alpha_{i,1}^{2*} &= \alpha_1^{2*} & \forall i \in Z_{21} \\ \alpha_{i,2}^{2*} &= \alpha_2^{2*} & \forall i \in Z_{22} \\ \alpha_{i,1}^{2*} - \alpha_{j,2}^{2*} &= \mu^* & \forall (i,j) \in Z_{21} \times Z_{22}\end{aligned}\quad (4.6)$$

Soit  $\delta\alpha_i^*$  la perturbation du paramètre  $\alpha_i^*$  définie par :

$$\delta\alpha_i^* = \begin{cases} \alpha_{i,1}^{2*} - \alpha_i^{1*} & \text{si } i \in Z_{21} \\ \alpha_{i,2}^{2*} - \alpha_i^{1*} & \text{si } i \in Z_{22} \end{cases}\quad (4.7)$$

La perturbation de la fonction 'objectif' qui correspond à la perturbation  $\delta\alpha_i^*$  est :

$$\delta J^* = J_2^* - J_1^* \quad (4.8)$$

Le développement d'ordre 1 donne :

$$\begin{aligned}J_2^* - J_1^* = \delta J^* &\approx \sum_{i=1}^{Nm} \frac{\partial J}{\partial \alpha_i} \delta\alpha_i^* \\ &\approx \sum_{i \in Z_{21}} \frac{\partial J}{\partial \alpha_i} \delta\alpha_i^* + \sum_{i \in Z_{22}} \frac{\partial J}{\partial \alpha_i} \delta\alpha_i^* \\ &\approx \sum_{i \in Z_{21}} \frac{\partial J}{\partial \alpha_i} (\alpha_{i,1}^{2*} - \alpha_i^{1*}) + \sum_{i \in Z_{22}} \frac{\partial J}{\partial \alpha_i} (\alpha_{i,2}^{2*} - \alpha_i^{1*})\end{aligned}\quad (4.9)$$

Après la minimisation en utilisant la paramétrisation  $P_1$ , le gradient de  $J_1^*$  est :

$$\frac{\partial J(\alpha^{1*})}{\partial \alpha} = \sum_{i=1}^{Nm} \frac{\partial J(\alpha^{1*})}{\partial \alpha_i} = 0 \quad (4.10)$$

Equation (4.10) donne

$$\sum_{i \in Z_{21}} \frac{\partial J(\alpha^{I^*})}{\partial \alpha_i} = \sum_{j \in Z_{22}} \frac{\partial J(\alpha^{I^*})}{\partial \alpha_j} \quad (4.11)$$

En remplaçant (4.6) dans (4.9) en utilisant (4.11), cela nous donne :

$$J_2^* - J_1^* \approx \sum_{i \in Z_{21}} \frac{\partial J}{\partial \alpha_i} (\alpha_i^{2^*} - \alpha^{I^*}) - \sum_{i \in Z_{21}} \frac{\partial J}{\partial \alpha_i} (\alpha_i^{2^*} - \alpha^{I^*}) = \mu^* \sum_{i \in Z_{21}} \frac{\partial J(\alpha^{I^*})}{\partial \alpha_i} \quad (4.12)$$

Ou

$$J_2^* - J_1^* \approx \sum_{i \in Z_{22}} \frac{\partial J}{\partial \alpha_i} (\alpha_i^{2^*} - \alpha^{I^*}) - \sum_{i \in Z_{22}} \frac{\partial J}{\partial \alpha_i} (\alpha_i^{2^*} - \alpha^{I^*}) = \mu^* \sum_{i \in Z_{22}} \frac{\partial J(\alpha^{I^*})}{\partial \alpha_i} \quad (4.13)$$

La grande différence de la fonction ‘objectif’  $\delta J^*$  est obtenue pour la grande valeur de

$\sum_{i \in Z_{21}} \frac{\partial J(\alpha^{I^*})}{\partial \alpha_i}$  en valeur absolue, quelque soit  $\mu^*$ . Cette valeur absolue est l’indicateur de

raffinement associé à la coupe qui transforme la paramétrisation P1 en P2.

L’indicateur est donc définie par :

$$I = \left| \sum_{i \in Z_{21}} \frac{\partial J(\alpha^{I^*})}{\partial \alpha_i} \right| = \left| \sum_{i \in Z_{22}} \frac{\partial J(\alpha^{I^*})}{\partial \alpha_i} \right| \quad (4.14)$$

Dans un milieu fracturé, les paramètres à identifier qui caractérisent chaque zone sont trois :

K, S et  $\sigma$ . Nous allons donc définir trois indicateurs de raffinement :

$$I_k = \left| \sum_{i \in Z_{21}} \frac{\partial J(k^{I^*})}{\partial k_i} \right|, I_s = \left| \sum_{i \in Z_{21}} \frac{\partial J(S^{I^*})}{\partial S_i} \right|, I_\sigma = \left| \sum_{i \in Z_{21}} \frac{\partial J(\sigma^{I^*})}{\partial \sigma_i} \right| \quad (4.15)$$

Le calcul des indicateurs de raffinement globaux se dérive de l’utilisation de ces trois définitions des indicateurs de chaque paramètre de la façon suivante :

On note  $I_{K,i}$ ,  $I_{S,i}$  et  $I_{\sigma,i}$  les indicateurs de raffinement correspondant aux paramètres K, S et

$\sigma$  respectivement pour une interface  $i$  donnée, et par  $\bar{I}_{K,i} = \frac{I_{K,i}}{\max_i I_{K,i}}$ ,  $\bar{I}_{S,i} = \frac{I_{S,i}}{\max_i I_{S,i}}$  et

$$\bar{I}_{\sigma,i} = \frac{I_{\sigma,i}}{\max_i I_{\sigma,i}}$$

les indicateurs normalisés correspondant à  $I_{K,i}$ ,  $I_{S,i}$  et  $I_{\sigma,i}$  respectivement. Comme ces indicateurs dépendent des unités du système, l'indicateur de raffinement global utilisé est calculé à partir des indicateurs normalisés et est donné par l'expression suivante :

$$I_{\text{glob}} = \sum_{k=1}^{N_p} \bar{I}_{k,i} = \sum_{k=1}^{N_p} \frac{I_{k,i}}{\max I_{k,i}} \quad (4.16)$$

## 5. Méthode des états adjoints

L'expression de l'indicateur de raffinement (4.14) montre la nécessité de calculer les gradients de la fonction 'objectif' par rapport à chaque paramètre sur toutes les mailles du domaine. Donc pour continuer le calcul des indicateurs, on utilise la méthode des états adjoints. Cette méthode calcule le gradient de la fonction 'objectif' par rapport aux paramètres d'une manière analytique (Chavent, 1991).

Dans la partie suivante, nous allons présenter l'approche algébrique du calcul des gradients de la fonction 'objectif' qui sera ensuite utilisée dans notre travail.

### 5.1 Calcul mathématique

Le système (2.35) obtenu dans le chapitre deux et l'équation (2.24) nous permet d'écrire les deux systèmes suivants :

$$[M] \cdot \{Th^{n+1}\} = \{R^n\} \quad (4.17)$$

et

$$[B] \cdot \{Th_m^{n+1}\} = \{R_m^n\} \quad (4.18)$$

avec

$$B = I_{nf} \text{ est la matrice identité et } R_m^n = (Th_m^n - Th_m^{n+1}) \exp\left(\frac{-\sigma}{S_m} \times \Delta t\right) + Th_m^{n+1}$$

On définit :

$$Y^{n+1} = M Th^{n+1} - R^n = 0 \quad (4.19)$$

et

$$Y_m^{n+1} = B Th_m^{n+1} - R_m^n = 0 \quad (4.20)$$

En multipliant  $Y^{n+1}$  et  $Y_m^{n+1}$  chacun par un vecteur quelconque  $\gamma^{n+1}$  et  $\gamma_m^{n+1}$  de  $R^{nf}$  respectivement et en sommant ces produits sur tous les pas de temps, on obtient alors les deux équations suivantes :

$$\sum_{n=0}^{N-1} \langle \gamma^{n+1}, Y^{n+1} \rangle = 0 \quad (4.21)$$

et

$$\sum_{n=0}^{N-1} \langle \gamma_m^{n+1}, Y_m^{n+1} \rangle = 0 \quad (4.22)$$

Avec  $\langle a, b \rangle_n = \sum_{i=1}^n a_i b_i$  est le produit scalaire de  $R^n$ . Les vecteurs  $\gamma^{n+1}$  et  $\gamma_m^{n+1}$  utilisés qui ont la même dimension que  $Th^{n+1}$  et de  $Thm^{n+1}$  sont les multiplicateurs de Lagrange qui caractérisent l'état adjoint du problème.

On considère ensuite la fonction 'objectif' (3.33) définie dans le chapitre III :

$$J = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=1}^{Nf} W_i^{n+1} (Th_i^{n+1} - Th_{mes,i}^{n+1})^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=1}^{Nf} W_{m,i}^{n+1} (Thm_i^{n+1} - Thm_{mes,i}^{n+1})^2$$

La somme des expressions (4.21), (4.22) et de la fonction 'objectif' conduit à la définition du Lagrangien :

$$L = J(\alpha) + \sum_{n=0}^{N-1} \langle \gamma^{n+1}, Y^{n+1} \rangle + \sum_{n=0}^{N-1} \langle \gamma_m^{n+1}, Y_m^{n+1} \rangle \quad (4.23)$$

ou bien

$$L = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=1}^{Nf} W_i^{n+1} (Th_i^{n+1} - Th_{mes,i}^{n+1})^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=1}^{Nf} W_{m,i}^{n+1} (Thm_i^{n+1} - Thm_{mes,i}^{n+1})^2 + \sum_{n=0}^{N-1} \langle \gamma^{n+1}, Y^{n+1} \rangle + \sum_{n=0}^{N-1} \langle \gamma_m^{n+1}, Y_m^{n+1} \rangle \quad (4.24)$$

avec  $\alpha$  qui représente les trois paramètres K, S et  $\sigma$ .

La différentielle de la fonction 'objectif' s'écrit sous la forme:

$$\delta J(\alpha) = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial L^{n+1}}{\partial \alpha} \delta \alpha + \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial L^{n+1}}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1} + \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial L^{n+1}}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1} \quad (4.25)$$

Pour faire apparaître les dérivées de  $J$  par rapport à  $\alpha$ , on doit annuler les termes en  $\delta Th$  et en  $\delta Th_m$ , on aura alors :

$$\sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial L^{n+1}}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1} = 0 \quad (4.26)$$

et

$$\sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial L^{n+1}}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1} = 0 \quad (4.27)$$

En supposant que

$$Q^* = \sum_{n=0}^{N-1} \langle \gamma^{n+1}, Y^{n+1} \rangle + \sum_{n=0}^{N-1} \langle \gamma_m^{n+1}, Y_m^{n+1} \rangle \quad (4.28)$$

L'équation (4.23) peut être donc écrite sous la forme

$$L = J(\alpha) + Q^* \quad (4.29)$$

par suite (4.26) et (4.27) donneront

$$\sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial L^{n+1}}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1} = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial J(\alpha)}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1} + \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial Q^*}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1} = 0 \quad (4.30)$$

et

$$\sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial L^{n+1}}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1} = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial J(\alpha)}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1} + \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial Q^*}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1} = 0 \quad (4.31)$$

L'équation (4.30) est formée de  $\sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial J(\alpha)}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1}$  et de  $\sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial Q^*}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1}$ .

Pour le premier terme, on peut écrire :

$$\sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial J(\alpha)}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1} = \sum_{n=0}^{N-1} \langle \Omega^{n+1} (Th^{n+1} - Th_{mes}^{n+1}), \delta Th^{n+1} \rangle \quad (4.32)$$

où  $\Omega^{n+1}$  est la matrice diagonale dont les éléments sont  $w_i^{n+1}$ .

Mais pour calculer  $\sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial Q^*}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1}$ , on remarque tout d'abord que les systèmes qui dépendent de  $Th^{n+1}$  sont  $Y^{n+1}, Y^{n+2}$  et  $Y_m^{n+1}$ , puisque :

$$\begin{aligned} Y^{n+1} &= M Th^{n+1} - R^n (Th^n) \\ Y^{n+2} &= M Th^{n+2} - R^{n+1} (Th^{n+1}) \\ Y_m^{n+1} &= B Thm^{n+1} - R_m^n (Th^{n+1}) \end{aligned} \quad (4.33)$$

donc

$$\sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial Q^*}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1} = \sum_{n=0}^{N-1} \left( \left\langle \gamma^{n+1}, \frac{\partial Y^{n+1}}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1} \right\rangle + \left\langle \gamma^{n+2}, \frac{\partial Y^{n+2}}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1} \right\rangle + \left\langle \gamma_m^{n+1}, \frac{\partial Y_m^{n+1}}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1} \right\rangle \right) \quad (4.34)$$

l'équation (4.30) donne :

$$\sum_{n=0}^{N-1} \left[ \left\langle \Omega^{n+1} (Th^{n+1} - Th_{mes}^{n+1}), \delta Th^{n+1} \right\rangle + \left\langle \gamma^{n+1}, \frac{\partial Y^{n+1}}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1} \right\rangle + \left\langle \gamma^{n+2}, \frac{\partial Y^{n+2}}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1} \right\rangle + \left\langle \gamma_m^{n+1}, \frac{\partial Y_m^{n+1}}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1} \right\rangle \right] = 0 \quad (4.35)$$

D'autre part, les dérivées des trois équations de (4.33) par rapport à  $Th^{n+1}$  sont données par

$$\begin{aligned} \frac{\partial Y^{n+1}}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1} &= M \cdot \delta Th^{n+1} \\ \frac{\partial Y^{n+2}}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1} &= - \frac{\partial R^{n+1}}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1} \\ \frac{\partial Y_m^{n+1}}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1} &= - \frac{\partial R_m^n}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1} \end{aligned} \quad (4.36)$$

et (4.35) sera

$$\sum_{n=0}^{N-1} \left[ \left\langle \Omega^{n+1} (Th^{n+1} - Th_{mes}^{n+1}), \delta Th^{n+1} \right\rangle + \left\langle \gamma^{n+1}, M \cdot \delta Th^{n+1} \right\rangle + \left\langle \gamma^{n+2}, - \frac{\partial R^{n+1}}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1} \right\rangle + \left\langle \gamma_m^{n+1}, - \frac{\partial R_m^n}{\partial Th^{n+1}} \delta Th^{n+1} \right\rangle \right] = 0 \quad (4.37)$$

Finalement, on a :

$$\sum_{n=0}^{N-1} \left\langle \left[ \Omega^{n+1} (Th^{n+1} - Th_{mes}^{n+1}) + M \cdot \gamma^{n+1} + \left[ - \frac{\partial R^{n+1}}{\partial Th^{n+1}} \right]^T \gamma^{n+2} + \left[ - \frac{\partial R_m^n}{\partial Th^{n+1}} \right]^T \gamma_m^{n+1} \right], \delta Th^{n+1} \right\rangle = 0 \quad (4.38)$$

De même, l'équation (4.31) est formée de  $\sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial J(\alpha)}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1}$  et de  $\sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial Q^*}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1}$ . Pour

le premier terme, on peut écrire :

$$\sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial J(\alpha)}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1} = \sum_{n=0}^{N-1} \left( \left\langle \Omega_m^{n+1} (Thm^{n+1} - Thm_{mes}^{n+1}), \delta Thm^{n+1} \right\rangle \right) \quad (4.39)$$

où  $\Omega_m^{n+1}$  est la matrice diagonale dont les éléments sont  $w_{m,i}^{n+1}$ .

Mais pour calculer  $\sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial Q^*}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1}$ , on doit remarquer tout d'abord que les systèmes qui dépendent de  $Thm^{n+1}$  sont  $Y^{n+2}$  et  $Y_m^{n+1}$  et  $Y_m^{n+2}$ , puisque :

$$\begin{aligned} Y^{n+2} &= M Th^{n+2} - R^{n+1}(Thm^{n+1}) \\ Y_m^{n+1} &= B Thm^{n+1} - R_m^n \\ Y_m^{n+2} &= B Thm^{n+2} - R_m^{n+1}(Thm^{n+1}) \end{aligned} \quad (4.40)$$

donc

$$\sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial Q^*}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1} = \sum_{n=0}^{N-1} \left( \left\langle \gamma^{n+2}, \frac{\partial Y^{n+2}}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1} \right\rangle + \left\langle \gamma_m^{n+1}, \frac{\partial Y_m^{n+1}}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1} \right\rangle + \left\langle \gamma_m^{n+2}, \frac{\partial Y_m^{n+2}}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1} \right\rangle \right) \quad (4.41)$$

L'équation (4.31) donne :

$$\sum_{n=0}^{N-1} \left[ \left\langle \Omega_m^{n+1}(Thm^{n+1} - Thm_{mes}^{n+1}), \delta Thm^{n+1} \right\rangle + \left\langle \gamma^{n+2}, \frac{\partial Y^{n+2}}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1} \right\rangle + \left\langle \gamma_m^{n+1}, \frac{\partial Y_m^{n+1}}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1} \right\rangle + \left\langle \gamma_m^{n+2}, \frac{\partial Y_m^{n+2}}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1} \right\rangle \right] = 0 \quad (4.42)$$

D'autre part, les dérivées des trois équations de (4.40) par rapport à  $Thm^{n+1}$  sont données par

$$\begin{aligned} \frac{\partial Y_m^{n+1}}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1} &= B \delta Thm^{n+1} \\ \frac{\partial Y^{n+2}}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1} &= -\frac{\partial R^{n+1}}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1} \\ \frac{\partial Y_m^{n+2}}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1} &= -\frac{\partial R_m^{n+1}}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1} \end{aligned} \quad (4.43)$$

et (4.42) sera

$$\sum_{n=0}^{N-1} \left[ \left\langle \Omega_m^{n+1}(Thm^{n+1} - Thm_{mes}^{n+1}), \delta Thm^{n+1} \right\rangle + \left\langle \gamma_m^{n+1}, B \delta Thm^{n+1} \right\rangle + \left\langle \gamma^{n+2}, -\frac{\partial R^{n+1}}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1} \right\rangle + \left\langle \gamma_m^{n+2}, -\frac{\partial R_m^{n+1}}{\partial Thm^{n+1}} \delta Thm^{n+1} \right\rangle \right] = 0 \quad (4.44)$$

Finalement, on obtient :

$$\sum_{n=0}^{N-1} \left\langle \begin{bmatrix} \Omega_m^{n+1} (Thm^{n+1} - Thm_{mes}^{n+1}) + B \cdot \gamma_m^{n+1} + \left[ \frac{\partial R_m^{n+1}}{\partial Thm^{n+1}} \right]^T \gamma_m^{n+2} \\ + \left[ \frac{\partial R_m^{n+1}}{\partial Thm^{n+1}} \right]^T \gamma_m^{n+2} \end{bmatrix}, \delta Thm^{n+1} \right\rangle = 0 \quad (4.45)$$

Les deux équations (4.38) et (4.45) conduisent à un système rétrograde :

$$\begin{cases} M \cdot \gamma^{n+1} = \left[ \frac{\partial R_m^{n+1}}{\partial Th^{n+1}} \right]^T \gamma^{n+2} + \left[ \frac{\partial R_m^n}{\partial Th^{n+1}} \right]^T \gamma_m^{n+1} - \Omega^{n+1} (Th^{n+1} - Th_{mes}^{n+1}) \\ B \cdot \gamma_m^{n+1} = \left[ \frac{\partial R_m^{n+1}}{\partial Thm^{n+1}} \right]^T \gamma_m^{n+2} + \left[ \frac{\partial R_m^{n+1}}{\partial Thm^{n+1}} \right]^T \gamma^{n+2} - \Omega_m^{n+1} (Thm^{n+1} - Thm_{mes}^{n+1}) \\ n = N-1, \dots, 0 \\ \gamma^{N+1} = 0 \\ \gamma_m^{N+1} = 0 \end{cases} \quad (4.46)$$

La résolution de ce système couplé permet d'obtenir les états adjoints à chaque pas de temps et de calculer les gradients de la manière suivante :

$$\frac{\partial J(\alpha)}{\partial \alpha} = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial L^{n+1}}{\partial \alpha} = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial Y^{n+1}}{\partial \alpha} \cdot \gamma^{n+1} + \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial Y_m^{n+1}}{\partial \alpha} \cdot \gamma_m^{n+1}$$

Cette méthode présente donc l'avantage de permettre de calculer tous les gradients de la fonction 'objectif' de manière simple (somme de produits scalaires) à partir de la résolution de deux systèmes seulement : le système obtenu par la discrétisation de l'équation d'état et celui du système adjoint.

## 6. Algorithmes

Avant de présenter l'algorithme qui détermine la répartition des zones dans un domaine, nous allons définir le maillage et les types des indicateurs.

### 6.1 Maillage et types des indicateurs

Le maillage des indicateurs se diffère de celui qui couvre le domaine. Ce dernier était triangulaire irrégulier (figure 4.5) tandis que le maillage utilisé pour calculer des indicateurs est choisi régulier et rectangulaire (figure 4.6).

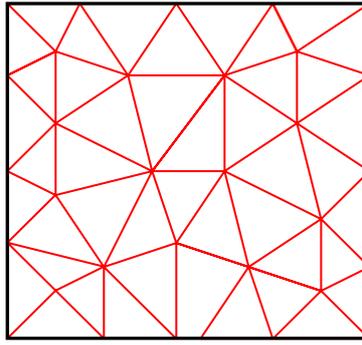


Figure 4.5 : Maillage couvrant le domaine.

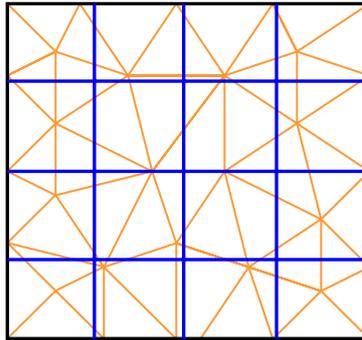


Figure 4.6 : Localisation des interfaces pour le calcul des indicateurs.

Le but d'introduire un nouveau maillage est d'éviter l'introduction d'indicateurs obliques ou bien sous forme des lignes brisées, ce qui rend la recherche des coupes plus facile.

En effet, pour passer d'une paramétrisation à une autre, il y a une infinité de possibilités pour réaliser une discontinuité de paramètres dans une zone. La figure (4.6) montre par exemple deux types d'indicateurs : des indicateurs horizontaux (Ih) et verticaux (Iv).

En introduisant une interface verticale ou bien horizontale  $I^*$  au domaine, on aura deux sous parties  $\Omega_1$  et  $\Omega_2$  (figure 4.7).

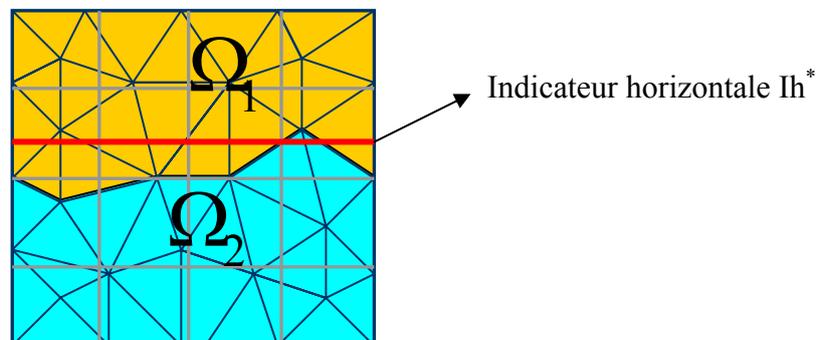


Figure 4.7 : Indicateur horizontal divise le domaine en deux sous parties

La division du domaine par l'indicateur  $Ih^*$  montre l'existence de mailles traversées par l'indicateur puisque le maillage du domaine et celui de l'indicateur ne sont pas identiques.

Pour attribuer une zone à ce type de maille, nous avons supposé que si le centre de gravité de la maille appartient à  $\Omega_1$  alors cette maille y appartient si non, elle appartient à  $\Omega_2$ .

En supposant que  $MA = \{ma_k, k = 1 \dots Nm\}$  l'ensemble des mailles du domaine,  $Nm$  est le

nombre des mailles,  $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 = \bigcup_{k=1}^{Nm} ma_k$ , l'indicateur de raffinement  $Ih^*$  est donné par :

$$Ih^* = \sum_{ma_k \in \Omega_1} \frac{\partial J}{\partial \alpha_k}(\alpha^*) \quad (4.47)$$

avec  $\alpha^*$  la solution correspondante après minimisation de la fonction 'objectif',  $\frac{\partial J}{\partial \alpha_k}(\alpha^*)$  la dérivée de la fonction 'objectif'  $J$  par rapport à la maille  $ma_k$  et  $\alpha_k$  la valeur du paramètre sur  $ma_k$ .

## 6.2 Algorithme EDM\_PARAM

Nous avons utilisés les indicateurs de raffinement dans les différentes études numériques selon l'algorithme appelé *EDM\_PARAM* suivant :

1. choix d'une paramétrisation initiale (nombre total des zones  $NZ$ , critère d'arrêt  $\varepsilon > 0$  et un vecteur initial des paramètres  $P$ ).
2. Estimation des valeurs des paramètres avec la paramétrisation courante en minimisant la fonction  $J$  (soit  $P^*$  la solution optimale).
3. Choix d'un maillage fixe pour les indicateurs horizontaux et verticaux.
4. **Pour** chaque zone  $Z_i$  du domaine **Faire**
  - a. Calculer tous les indicateurs de raffinement «  $I$  » correspondant à chaque interface.
  - b. Calculer  $I_{max}$ , la plus grande valeur absolue parmi tous les indicateurs calculés et prendre toutes les coupes correspondant aux indicateurs qui ont des valeurs plus grandes que 60% de  $I_{max}$ .
  - c. Estimer les valeurs des paramètres pour chaque paramétrisation en minimisant la fonction  $J$ .
  - d. Choisir l'interface qui correspond à la valeur minimale de la fonction 'objectif'.

**Fin Pour**

5. **Si** la fonction ‘objectif’ satisfait la condition d’optimalité alors la solution est trouvée, **si non**, pour chaque zone de la nouvelle paramétrisation : calculer tous les indicateurs de raffinement « I » correspondant à chaque coupe et prendre toutes les coupes correspondant aux indicateurs qui ont des valeurs plus grandes que 60% de  $I_{\max}$ .
6. Les coupes résultant de l’étape 5 contiennent  $NZ+1$  zones. Chaque coupe donne deux partitions de  $NZ$  zones chacune. A cette étape, minimiser la fonction ‘objectif’ pour chaque partition de  $NZ$  zones.
7. Choisir la coupe qui correspond à la valeur minimale de la fonction ‘objectif’.
8. **Si** la fonction ‘objectif’ satisfait la condition d’optimalité alors la solution est trouvée, **si non**, aller à l’étape (5).

Remarque:

À l’étape (4b) et (5) de l’algorithme, nous avons pris les partitions qui correspondent aux indicateurs ayant des valeurs plus grand que 60%  $I^{\max}$ . Rappelons que les indicateurs sont définis à partir d’un développement à l’ordre 1, la valeur maximale de l’indicateur n’est donc pas forcément la valeur optimale.

## 7. Résultats numériques

La performance de l’algorithme *EDM\_PARAM* est évaluée à l’aide de plusieurs expériences numériques. Ce travail a fait l’objet d’un article soumis au journal *Advances in Water Resources* (voir Annexe).

## 8. Application sur un cas réel : les essais de pompage sur le Site Expérimental Hydrogéologique de Poitiers

Cette partie est consacrée à l’utilisation du modèle *EDM\_PARAM* pour l’identification des paramètres du Site Expérimental Hydrogéologique de Poitiers (SEH).

### 8.1 Présentation du site

*Le Site Expérimental Hydrogéologique (SEH) de Poitiers* a été développé par le laboratoire Hydrasa (FRE 3114), dans le cadre du Réseau National de Sites Hydrogéologiques (SNO H+) et du programme "EAUX" de la région Poitou-Charentes (CPER 2002-2006). Situé 2 km à l’Est du Campus Sciences de l’Université de Poitiers, le SEH couvre une superficie de 12 hectares sur des terrains appartenant à l’Université (Site du Deffend : Observatoire Régional

du Patrimoine Végétal). D'un point de vue géologique, le SEH est implanté sur le versant nord du « Seuil du Poitou », vaste plateau carbonaté Mésozoïque marquant la transition entre les bassins sédimentaires Aquitain et Parisien (figure 4.8).

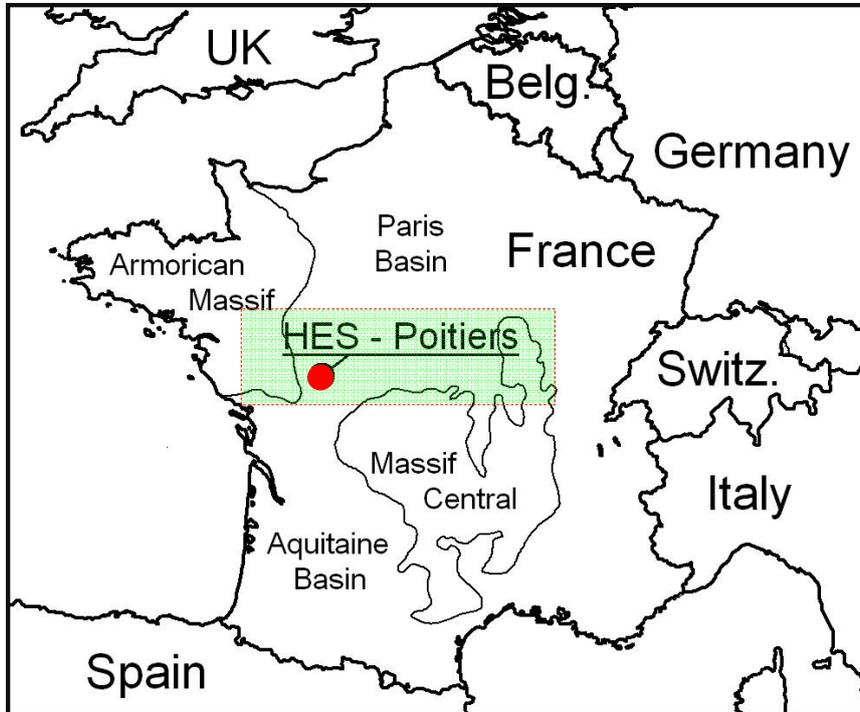


Figure 4.8 : Localisation du SEH

Les calcaires jurassiques, qui reposent sur un socle cristallin Hercynien, renferment deux aquifères superposés : (i) l'aquifère du Lias inférieur et moyen (de 5 à 10 m d'épaisseur), et (ii) l'aquifère du Dogger (100m d'épaisseur). Ces deux aquifères sont séparés par l'aquitard marneux du Toarcien (30m d'épaisseur). Les études menées sur le SEH se focalisent essentiellement sur l'aquifère du Dogger (figure 4.9).

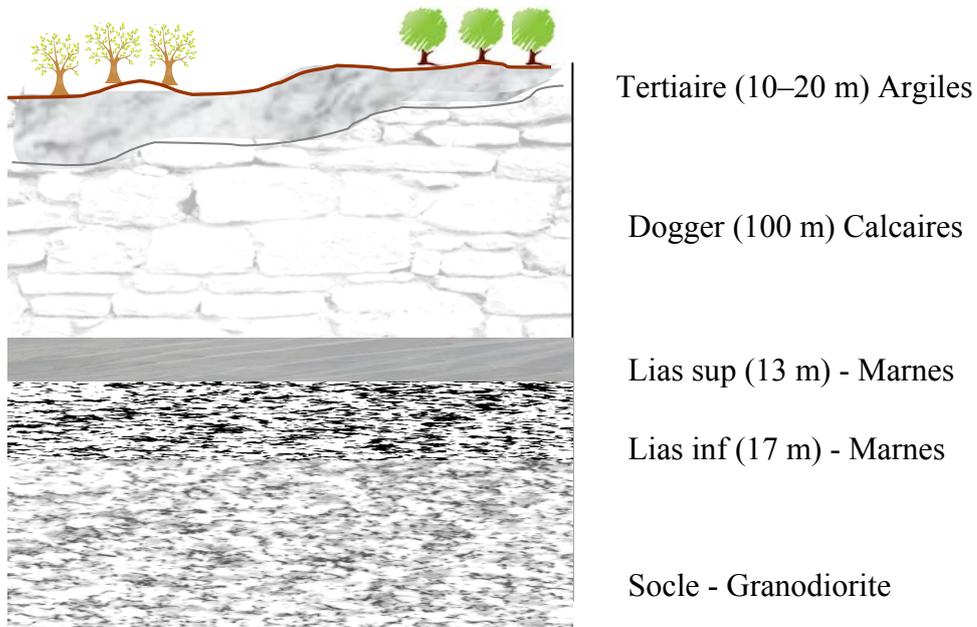


Figure 4.9 : Coupe géologique simplifiée.

Le dispositif expérimental comprend aujourd’hui 35 forages, dont deux forages carottés verticaux et deux forages carottés obliques. Ces forages ont été réalisés en deux phases séparées : 2002-2003 et 2004. Tous les forages traversent l’intégralité de l’aquifère du Dogger (profondeur des forages = 125 m). La plupart sont implantés selon un maillage régulier dans un carré de 210 × 210 m (figure 4.10).

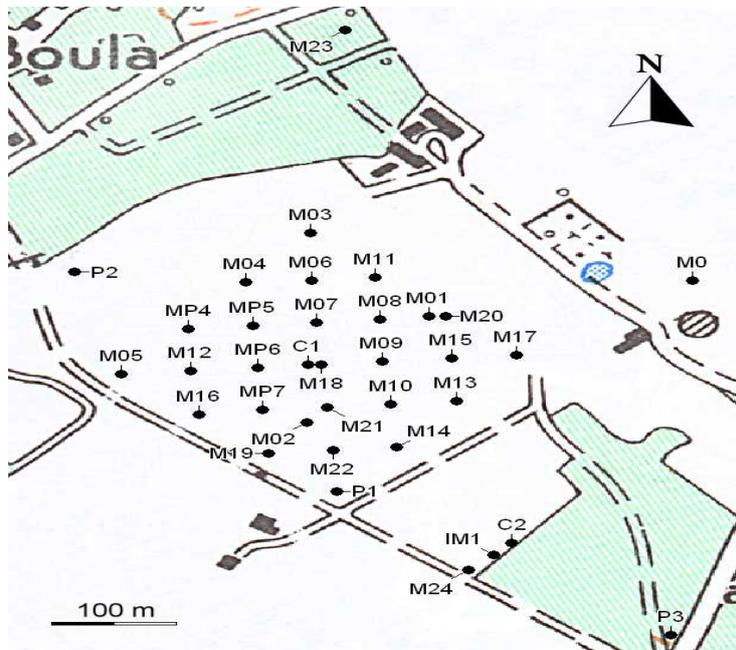


Figure 4.10 : Disposition des forages du SEH.

Les forages du SEH sont soit non tubés, soit équipés de tubages crépinés sur toute l'épaisseur de l'aquifère du Dogger. Le niveau piézométrique dans les forages correspond donc à une charge hydraulique moyenne sur l'épaisseur de l'aquifère. En conditions d'écoulement naturel, les niveaux piézométriques varient de 15 m à 25 m par rapport à la surface du sol. Lors de la foration, des calcaires argileux secs ont été systématiquement observés jusqu'à une profondeur d'environ 30 m, indiquant ainsi que l'aquifère du Dogger est captif sous cette formation très faiblement perméable. Deux forages supplémentaires ont été réalisés jusqu'au socle cristallin (forages C2 et IM1, environ 160 m de profondeur), afin de pouvoir enregistrer les charges hydrauliques dans l'aquifère du Lias inférieur et moyen lors des tests hydrauliques réalisés dans les autres forages. Aucune perturbation de charge n'a jamais été observée dans l'aquifère du Lias inférieur et moyen, démontrant ainsi que les deux aquifères sont bien isolés l'un de l'autre par les marnes toarciennes.

Depuis 2002, les investigations menées sur le SEH ont permis de recueillir une importante quantité de données concernant l'aquifère du Dogger. Ces données, aujourd'hui archivées dans la base de données H+ (de Dreuzy et al. 2006), concernent :

- la structure géologique du réservoir : stratigraphie/lithologie sur deux forages carottés (Bourbiaux et al. 2007), imagerie sismique 3D du réservoir (Mari and Porel 2008), diagraphies en rayonnement Gamma, imagerie acoustique, caméra haute résolution (Audouin 2007) ;
- les propriétés pétrophysiques des roches carbonatées : mesures de porosité et de perméabilité en laboratoire sur des échantillons de carottes (Chatevaire 2006, Bourbiaux et al. 2007) ;
- la structure des écoulements dans les forages : diagraphies température-conductivité, débitmétrie heat-pulse (Audouin et al. 2008) ;
- la dynamique de la nappe en conditions d'écoulement "naturel" (Bernard and Delay 2008) et/ou forcé : tests de pompages (Delay et al. 2004, Bernard 2005, Bernard et al. 2006, Delay et al. 2007, Kaczmaryk and Delay 2007a, Kaczmaryk and Delay 2007b) et chocs hydrauliques (Audouin 2007, Audouin and Bodin 2007, Audouin and Bodin 2008).

Ces différentes investigations ont permis d'atteindre un degré de caractérisation inégalé au plan national dans ce type de milieu.

## 8.2 Simulation du site avec le modèle EDM\_PARAM

### 8.2.1 Discrétisation spatiale et temporelle

Pour simuler le site SEH avec le modèle numérique *EDM\_PARAM*, on a considéré un domaine carré de côté  $L = 210m$ . Sur les frontières du domaine on impose des conditions de Dirichlet avec  $h = 100m$ . A l'intérieur du domaine, la charge est initialisée à  $100m$ . Un pompage de valeur  $Q = 67.4 m^3 h^{-1}$  se produit au point M06 (voir figure 4.10). La durée de la simulation est  $T = 70$  heures .

Le domaine est discrétisé avec un maillage triangulaire irrégulier (figure 4.11). Ce maillage est formé par 8650 éléments, il est raffiné au centre du domaine où l'effet du pompage est significatif. Loin du centre du domaine, le maillage devient plus grossier. Ce maillage permet d'économiser le temps de calcul tout en maintenant une bonne précision.

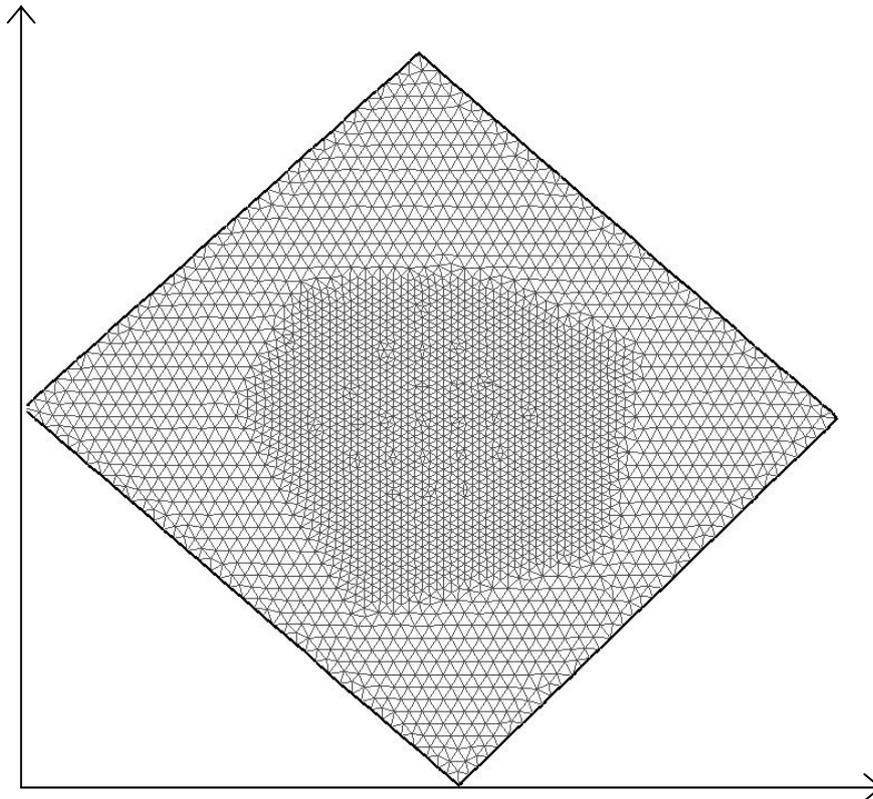


Figure 4.11: Maillage triangulaire irrégulier par (8650 mailles)

Pour étudier, la précision du calcul des charges avec ce maillage, on a réalisé une simulation (problème direct) avec un maillage fin dans tout le domaine (28000 éléments). Pour ce calcul, on suppose que le domaine est homogène avec  $k = 1.10^{-5} ms^{-1}$ ,  $s = 1.10^{-6} m^{-1}$ ,  $s_m = 3.10^{-5} m^{-1}$  et  $\sigma = 5.10^{-10} ms^{-1}$ . Les variations de la charge en fonction du temps sur le puits M06 sont représentées sur la figure (4.12). Cette figure montre que les deux maillages conduisent aux mêmes résultats. Avec le premier maillage, le temps de calcul est 3 à 4 fois plus petit.

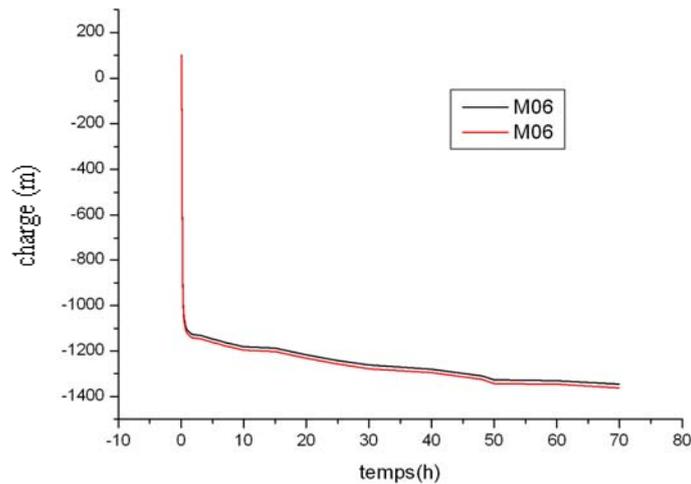


Figure 4.12: Variations de la charge au point M06 avec les deux maillages.

Pour la discrétisation temporelle, on a utilisé un schéma de pas de temps variable. Pour étudier l'effet du choix du pas de temps sur les résultats, on a réalisé deux simulations en utilisant un pas de temps fixe de (0.1h) et des pas de temps variables. Pour ces simulations, on considère un domaine homogène avec  $k = 1.10^{-5} ms^{-1}$ ,  $s = 1.10^{-6} m^{-1}$ ,  $s_m = 3.10^{-5} m^{-1}$  et  $\sigma = 5.10^{-10} ms^{-1}$ . Les variations de la charge en fonction du temps sur le point M06 sont représentées sur la figure (4.13). Cette figure montre que l'erreur due à la discrétisation temporelle est négligeable. En effet, le schéma numérique utilisé pour la discrétisation temporelle (premier ordre) introduit une erreur numérique proportionnelle au pas de temps. Cette erreur apparaît sous la forme d'une diffusion numérique. Cependant dans notre cas, cette erreur est négligeable à cause de la propriété diffusive du problème.

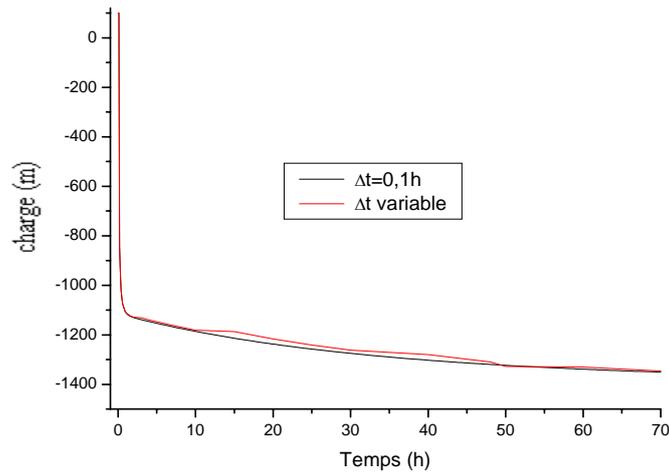


Figure 4.13 : Variations de la charge au point M06 (pas de temps constante et variable).

### 8.2.2 Estimation des paramètres

La répartition des zones dans le site ainsi que les valeurs des paramètres sont inconnues. Afin de les trouver, nous commençons par le cas homogène et ensuite on incrémente le nombre de zones jusqu'à qu'une des paramétrisations donne une fonction 'objectif' inférieure à un certain critère d'arrêt. Ce critère peut être calculé avec l'équation suivante :

$$Tol = Np_{mes} \times NT_{mes} \times \varepsilon^2 \quad (4.48)$$

Avec  $Np_{mes}$  le nombre des points de mesures ( C01, M01, M02, M03, M04, M05, M06, M07, M08, M09, M10, M11, MP5, MP6, MP7, P01 et P02, voir figure 4.10),  $NT_{mes}$  le nombre de temps de mesures et  $\varepsilon$  une valeur qui représente une estimation d'une erreur intégrant les erreurs de mesure et les erreurs de modélisation (nature du modèle, conditions aux limites, ...). Cette valeur a été fixée a priori à  $\varepsilon = 0.5$ . Comme  $Np_{mes} = 17$  et  $NT_{mes} = 33$ , on a  $Tol = 140$ .

#### Domaine homogène (Une seule zone)

On suppose que le site est homogène et on cherche à calculer les valeurs des paramètres  $k$ ,  $s$  et  $\sigma$ . Pour le paramètre  $s_m$  qui est corrélé avec  $\sigma$  on impose une valeur de  $3.10^{-5}$ . Pour les paramètres initiaux, on a utilisé  $k^{init} = 1.10^{-5}$ ,  $s^{init} = 1.10^{-6}$  et  $\sigma^{init} = 5.10^{-10}$ . La variation de la fonction 'objectif' en fonction de nombre d'itérations est représentée sur la figure (4.14). Cette figure montre qu'après 18 itérations, la fonction 'objectif' commence à osciller autour de  $772.56 > Tol$ . Comme attendu, la paramétrisation du domaine en une seule zone ne permet pas de reproduire les observations.

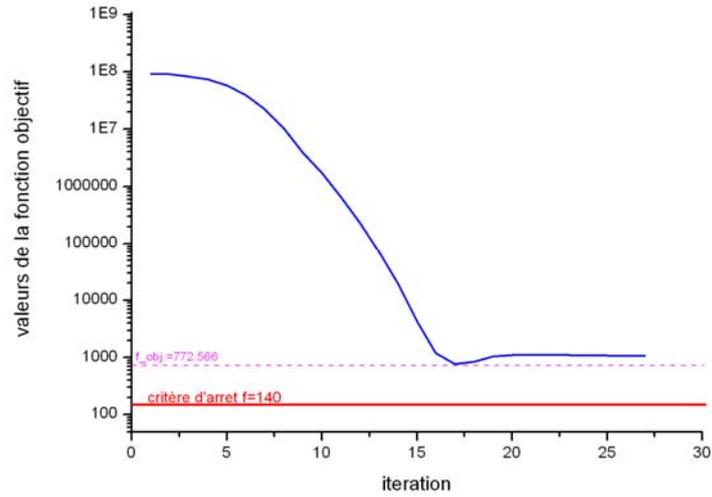


Figure 4.14 : Evolution de la fonction ‘objectif’ (domaine homogène)

Domaine d’hétérogénéité (Deux zones)

Dans cette partie, on suppose que le site est formé par deux zones et on cherche la répartition géométrique de ces zones ainsi que les valeurs des paramètres en utilisant le modèle *EDM\_PARAM*. Pour ce faire, on considère la distribution des discontinuités suivante (figure 4.15) :

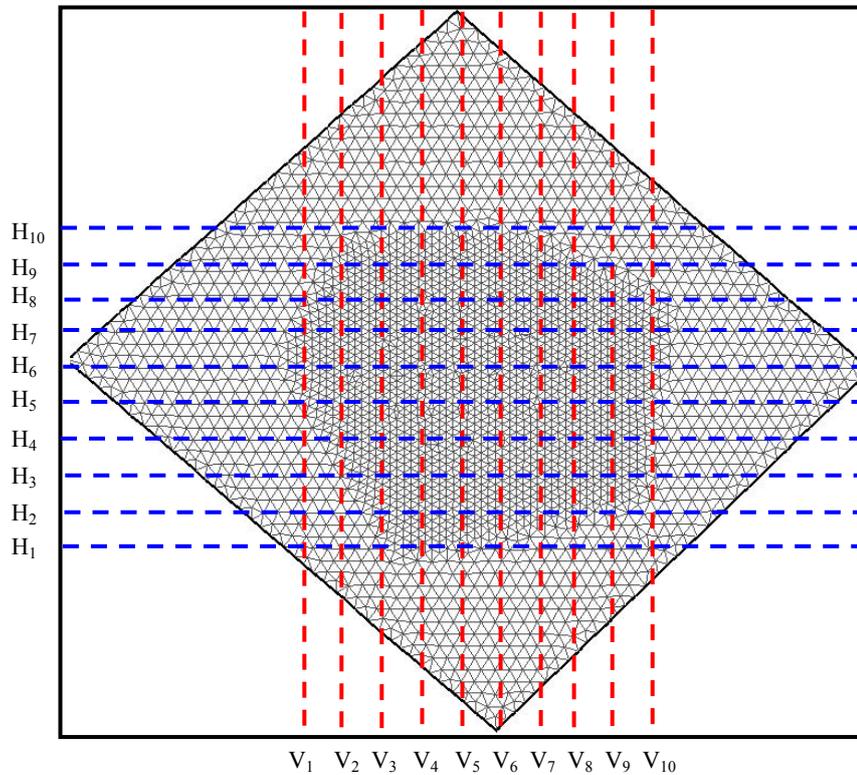


Figure 4.15 : La distribution des discontinuités.

Les indicateurs sont concentrés dans le centre du domaine où l'effet du pompage est significatif et où on possède des points de mesure.

Pour la première itération, l'algorithme du modèle *EDM\_PARAM* consiste à supposer que le domaine est homogène. Les paramètres initiaux sont  $k^{init} = 1.10^{-5}$ ,  $s^{init} = 1.10^{-6}$  et  $\sigma^{init} = 5.10^{-10}$ .  $s_m$  est supposé connu ( $3.10^{-5}$ ). La première minimisation donne les valeurs des paramètres  $k = 3.113 \times 10^{-3} \text{ ms}^{-1}$ ,  $s = 3.732 \times 10^{-4} \text{ m}^{-1}$ ,  $\sigma = 5.213 \times 10^{-11} \text{ ms}^{-1}$  et la fonction 'objectif'  $fobj = 1060.80$ . Nous calculons ensuite les différents indicateurs de raffinement. Les valeurs de ces indicateurs sont représentées dans la figure (4.16). Les discontinuités (V5, V6, V7, V8, V9, V10, H6, H7, H8, H9, H10) ont des indicateurs plus grands que  $0.6\lambda^{1,max}$ .

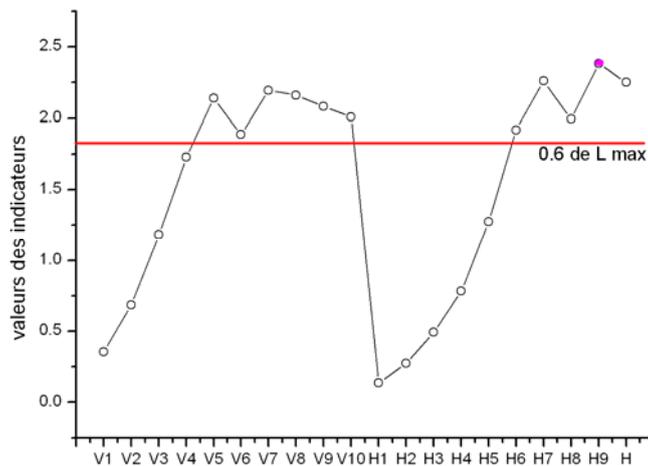


Figure 4.16 : Valeurs des indicateurs à la première itération.

A la deuxième itération, l'optimisation est faite pour indicateur retenu. La discontinuité qui correspond à la fonction 'objectif' minimale est H10 (figure 4.16). La paramétrisation obtenue avec cette coupe est formée de deux zones (figure 4.17). Puisque le critère d'arrêt n'a pas encore obtenue, alors on continue à l'itération suivante en calculant tous les indicateurs de raffinement pour chaque zone de la nouvelle paramétrisation (figure 4.18).

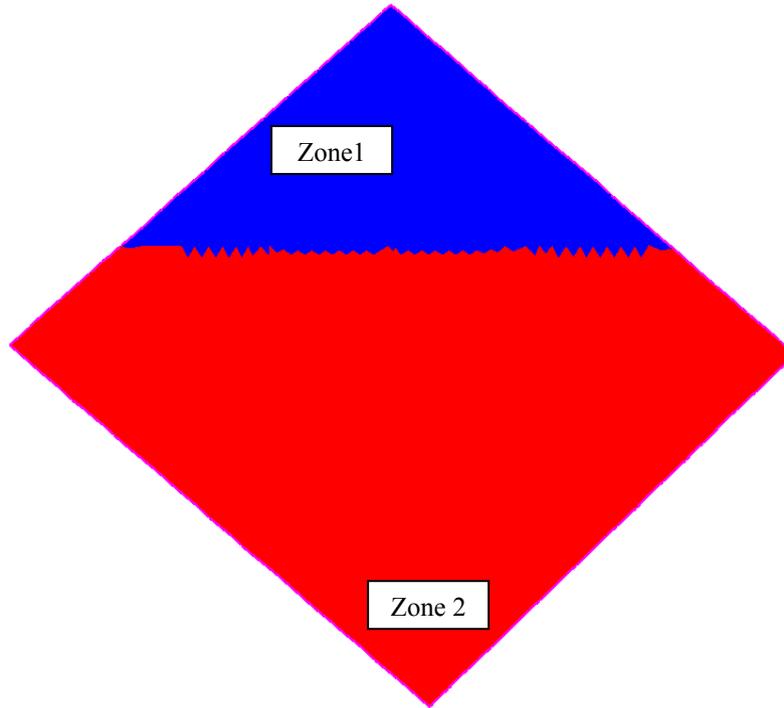


Figure 4.17 : Paramétrisation en deux zones (deuxième itération).

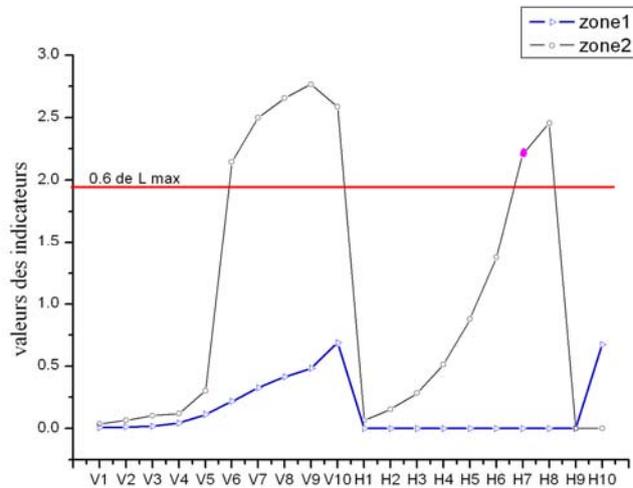


Figure 4.18 : Valeurs des indicateurs à la deuxième itération (2 zones).

Cinq indicateurs verticaux et deux horizontaux de la deuxième zone sont choisis (V6, V7, V8, V9, V10, H7, H8) à la troisième itération (figure 4.18). La paramétrisation qui correspond à l'indicateur H7 donne la plus petite fonction 'objectif' ( $J = 427.043$ ). La paramétrisation obtenue avec cette coupe est aussi formée de deux zones (figure 4.19).

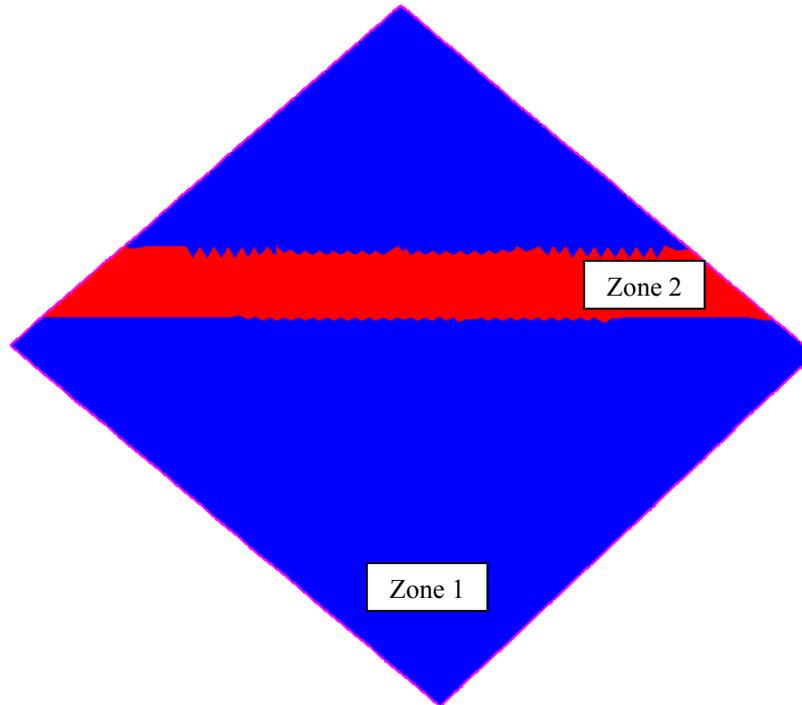


Figure 4.19 : Paramétrisation en deux zones (troisième itération).

Les indicateurs de raffinement sont calculés et les valeurs de ces indicateurs sont représentées sur la figure (4.20).

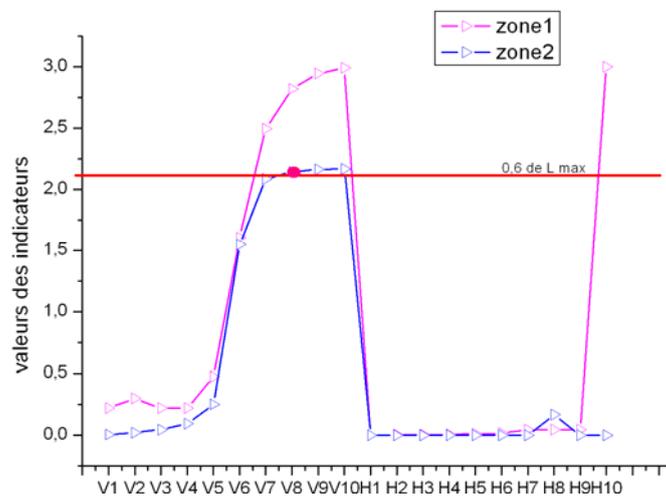


Figure 4.20 : Valeurs des indicateurs à la troisième itération (2 zones).

Ensuite, pour la quatrième itération, les discontinuités (V7, V8, V9, V10 et H10) de la première zone et (V8, V9, V10) de la deuxième ont des indicateurs plus grands que  $0.6\lambda^{1,\max}$  (figure 4.20). La paramétrisation qui correspond à l'indicateur V8 de la zone 2 donne la plus petite fonction 'objectif' ( $J = 427.043$ ).alors que la paramétrisation obtenue avec cette coupe est aussi formée de deux zones (figure 4.21).

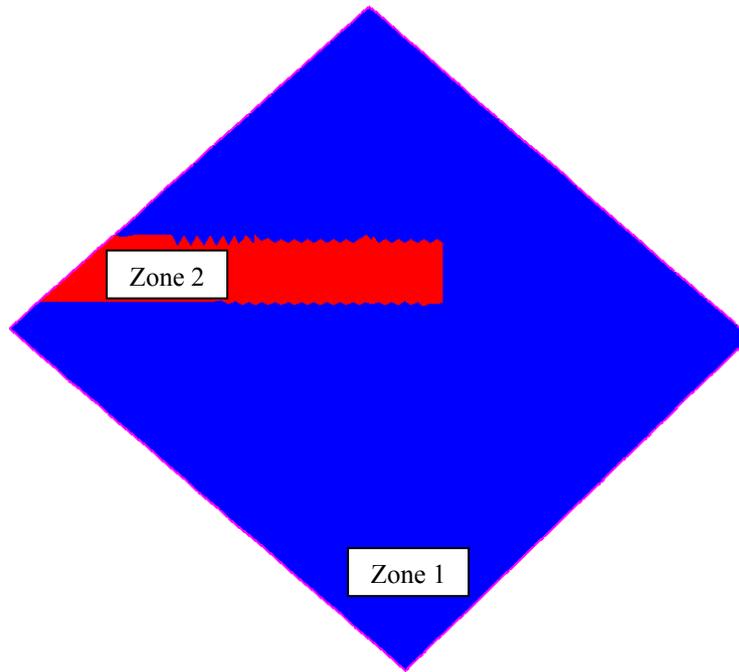


Figure 4.21 : Paramétrisation en deux zones (quatrième itération).

Les indicateurs de raffinement de l'itération quatre sont calculés et les valeurs de ces indicateurs sont représentées sur la figure (4.22).

Pour la cinquième itération, les discontinuités (V9, V10 et H10) de la première zone ont des indicateurs plus grands que  $0.6\lambda^{1,\max}$  (figure 4.22).

La paramétrisation qui correspond à l'indicateur H10 de la première zone donne la plus petite fonction 'objectif' ( $J = 487.05$ ). La répartition des zones est donnée sur la figure (4.23).

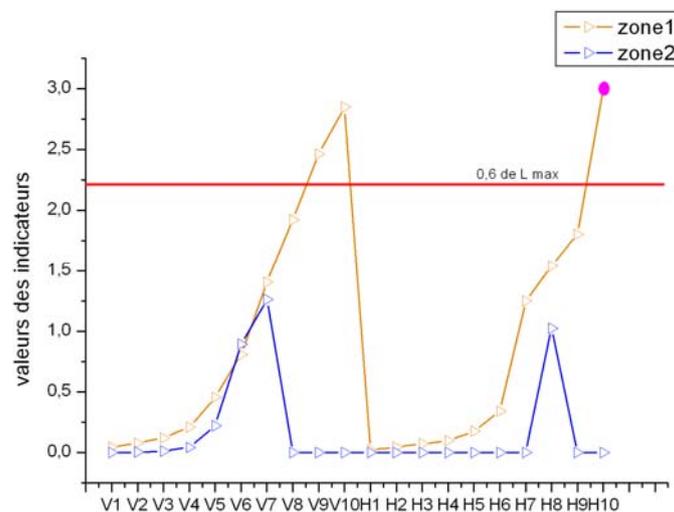


Figure 4.22 : Valeurs des indicateurs à la quatrième itération (2 zones).

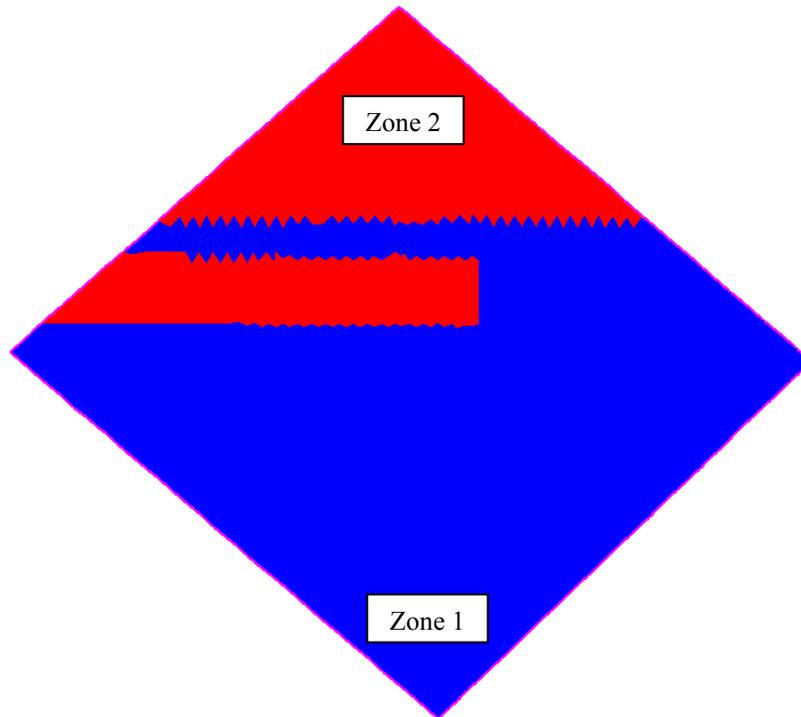


Figure 4.23 : Paramétrisation en deux zones (cinquième itération).

Après cette itération, l'algorithme retrouve la paramétrisation de la figure 4.21. On retient donc les deux dernières paramétrisations et on suppose que la paramétrisation finale sera celle qui correspond à la plus petite fonction 'objectif'. La fonction 'objectif' de la paramétrisation de la figure 4.21 est plus petite que celle de la figure 4.23. Par contre, cette fonction est plus grande que  $Tol$ , il faut donc plus que deux zones pour reproduire la dynamique du site SEH.

La figure (4.24) confirme la conclusion précédente. Elle présente la variation des charges sur différents points du site (M03, M05, M06, MP5 et MP6). Les deux courbes (charges calculées et mesurées) restent assez différentes, notamment aux temps longs qui caractérisent la distribution de la conductivité hydraulique.

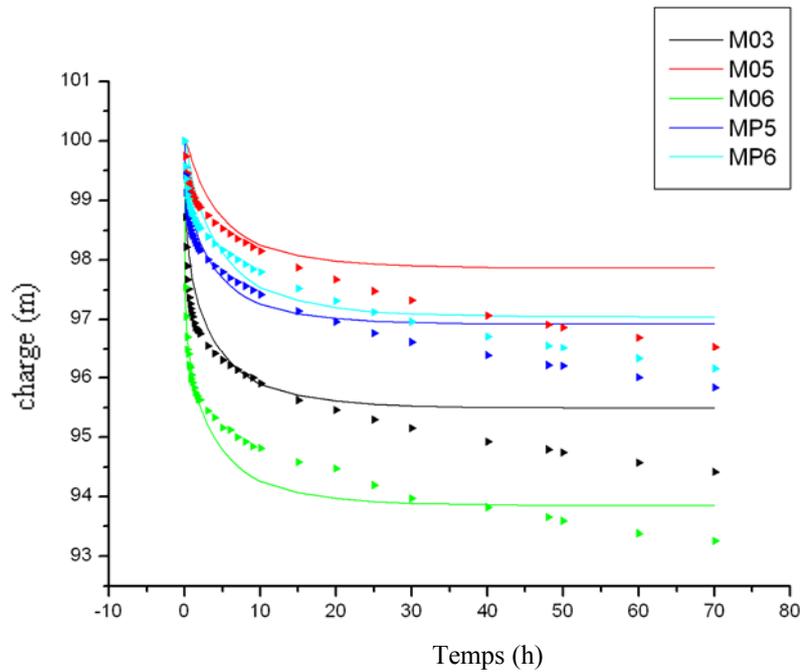


Figure 4.24 : Comparaison entre les charges calculées et mesurées

#### Domaine d'hétérogénéité (Trois zones)

La paramétrisation du site est maintenant de 3 zones dont nous allons déterminer la répartition géométrique et les paramètres.

A la première itération, on commence avec un domaine homogène et on fait la minimisation de la fonction 'objectif' en utilisant les paramètres initiaux. Après la première minimisation, les valeurs des paramètres sont :  $K_f = 3.113 \times 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $S_f = 3.732 \times 10^{-4} \text{ m}^{-1}$ ,  $\sigma = 5.213 \times 10^{-11} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  et la valeur de la fonction 'objectif' est 1060.80.

On calcule ensuite les différents indicateurs de raffinement. Les valeurs de ces indicateurs sont représentées sur la figure (4.25). Les discontinuités (V4, V5, V6, V7, V8, V9, V10, H6, H7, H8, H9, H10) ont des indicateurs plus grands que  $0.6\lambda^{1,\max}$ .

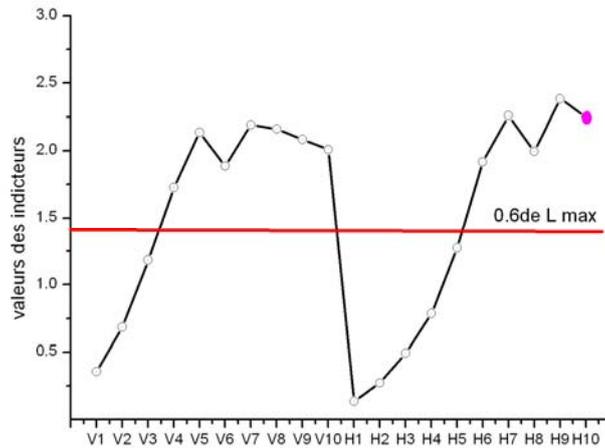


Figure 4.25 : Valeurs des indicateurs (domaine homogène)

A la deuxième itération, l'optimisation est faite pour chaque coupe et la discontinuité qui correspond à la fonction 'objectif' minimale est H10 (figure 4.25). La paramétrisation obtenue avec cette coupe est formée de deux zones (figure 4.26).

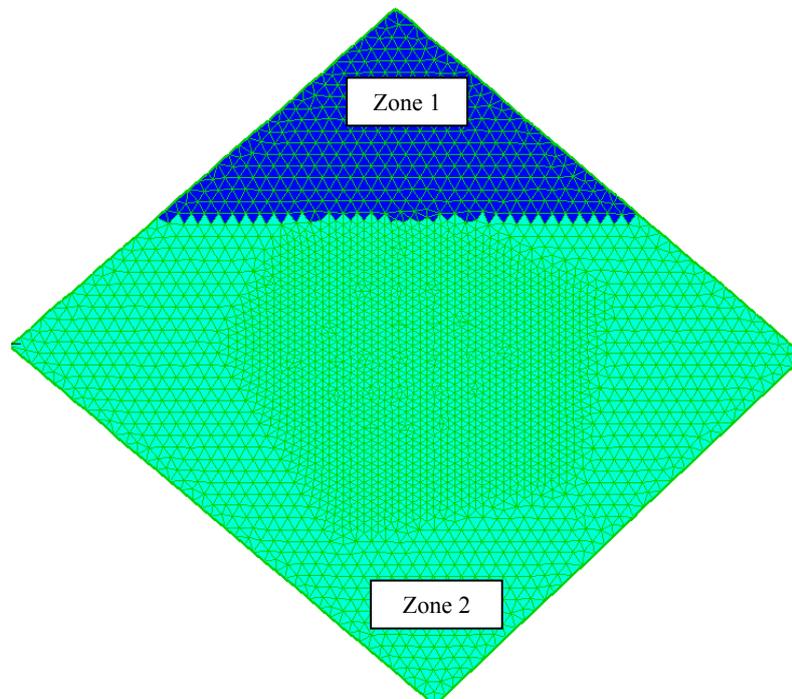


Figure 4.26 : Paramétrisation deux zones

Les valeurs des paramètres ainsi que la valeur de la fonction 'objectif' correspondante sont données dans le tableau (4.1). C'est dans cette itération qu'on calcule les indicateurs de raffinement basé sur la solution obtenue à la première itération. Les valeurs des indicateurs dans chaque zone sont données par la figure (4.27).

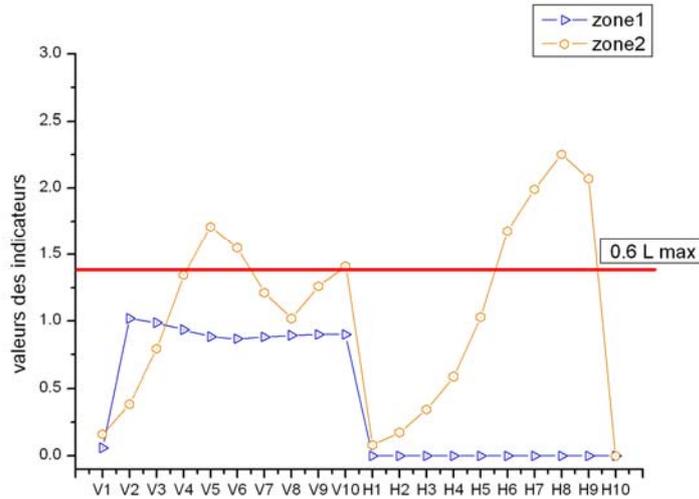


Figure 4.27 : Valeurs des indicateurs à la deuxième itération (2 zones)

Sept indicateurs ont des valeurs plus grandes que  $0.6\lambda^{2,max}$  à la troisième itération, et ils sont tous dans la deuxième zone (V5, V6, V10, H7, H8, H9, H10). La paramétrisation qui correspond à H6 donne la valeur minimale de la fonction ‘objectif’ ( $J = 474.329$ ), (Tableau 4.1 pour les paramètres correspondants). La paramétrisation obtenue avec cette coupe est formée de trois zones (figure 4.28).

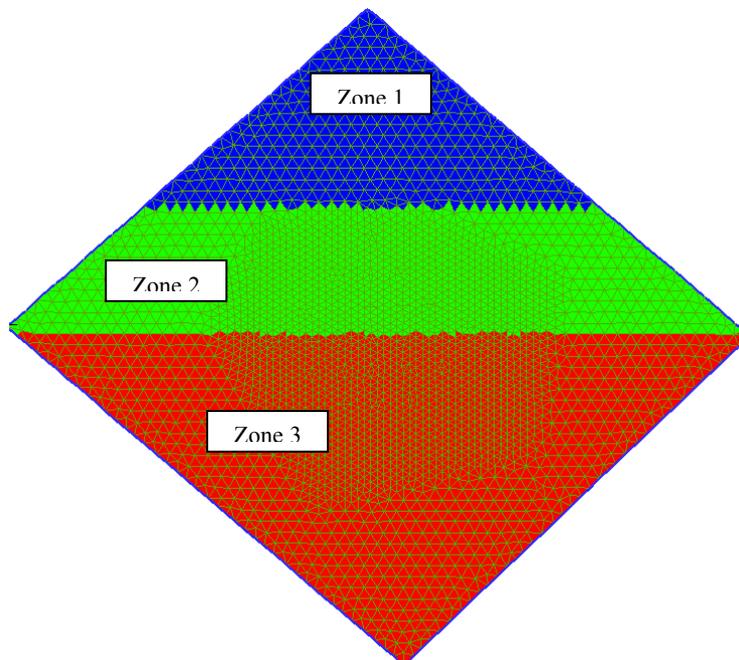


Figure 4.28 : Paramétrisation en trois zones (troisième itération)

<b>deuxième itération</b>			
Paramètre	zone 1	zone 2	
$K$	$2.326 \times 10^{-8}$	$3.064 \times 10^{-3}$	
$S$	$9.1 \times 10^{-7}$	$4.0106 \times 10^{-4}$	
$\sigma$	$6.55 \times 10^{-10}$	$10^{-10}$	
$J$	474.329		
<b>troisième itération</b>			
Paramètre	zone 1	zone 2	zone 3
$K$	$10^{-7}$	$4.875 \times 10^{-3}$	$2.345 \times 10^{-4}$
$S$	$10^{-8}$	$7.43 \times 10^{-5}$	$10^{-3}$
$\sigma$	$10^{-6}$	$10^{-12}$	$2.162 \times 10^{-9}$
$J$	403.51		
<b>quatrième itération</b>			
Paramètre	zone 1	zone 2	zone 3
$K$	$4.423 \times 10^{-6}$	$4.073 \times 10^{-3}$	$1.03210^{-3}$
$S$	$10^{-8}$	$2.65 \times 10^{-5}$	$10^{-4}$
$\sigma$	$10^{-11}$	$1.354 \times 10^{-8}$	$2.32 \times 10^{-8}$
$J$	138.91		

Tableau 4.1 : Résultats obtenues pour les trois itérations.

Puisque le critère d'arrêt n'a pas encore obtenu, on calcule tous les indicateurs de raffinement pour chaque zone de la paramétrisation.

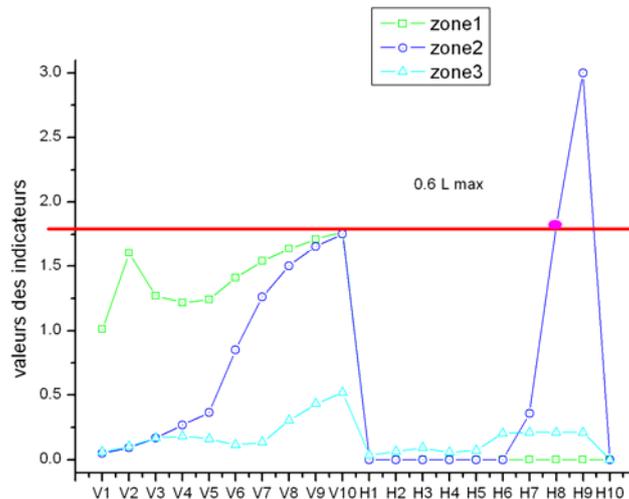


Figure 4.29 : Valeurs des indicateurs à la troisième itération (3 zones)

Seulement deux indicateurs horizontaux sont choisis (H8, H9, voir figure 4.29) à la quatrième itération. La paramétrisation qui correspond à l'indicateur H8 donne la valeur la plus petite de la fonction 'objectif' (Tableau 4.1). La répartition des zones est donnée sur la figure (4.30).

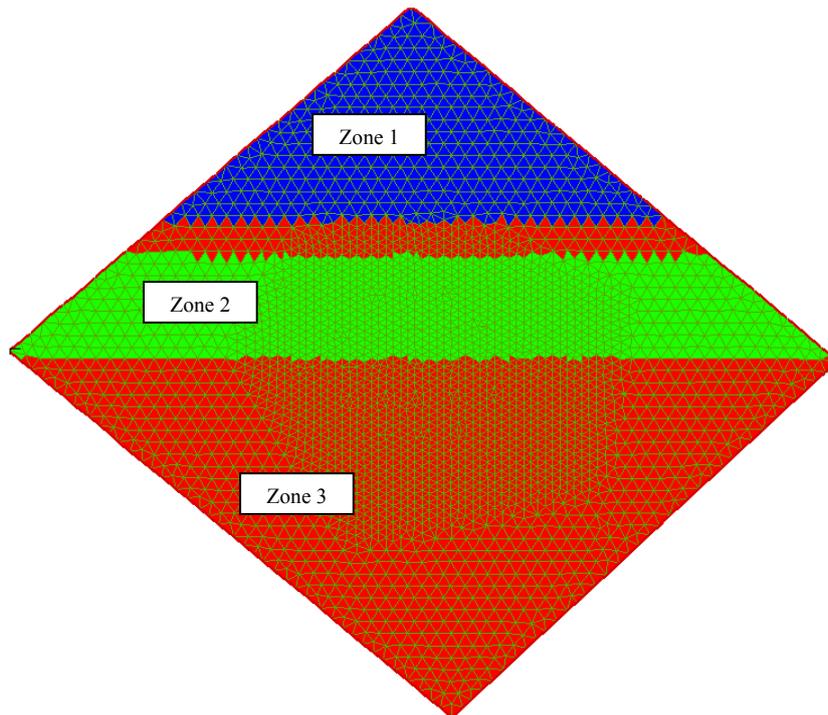


Figure 4.30 : Répartition finale des zones

La valeur de cette fonction est inférieure à  $Tol$  (Tableau 4.1), donc la procédure de minimisation s'arrête avec la paramétrisation obtenue. La répartition des zones est bien définie et les paramètres de chacune de ces zones sont estimés. La figure (4.31) représente les charges mesurées et calculées sur les points M3, M5, M6, MP5 et MP6 du domaine. Cette figure montre la validité de la paramétrisation obtenue ainsi que les valeurs des paramètres.

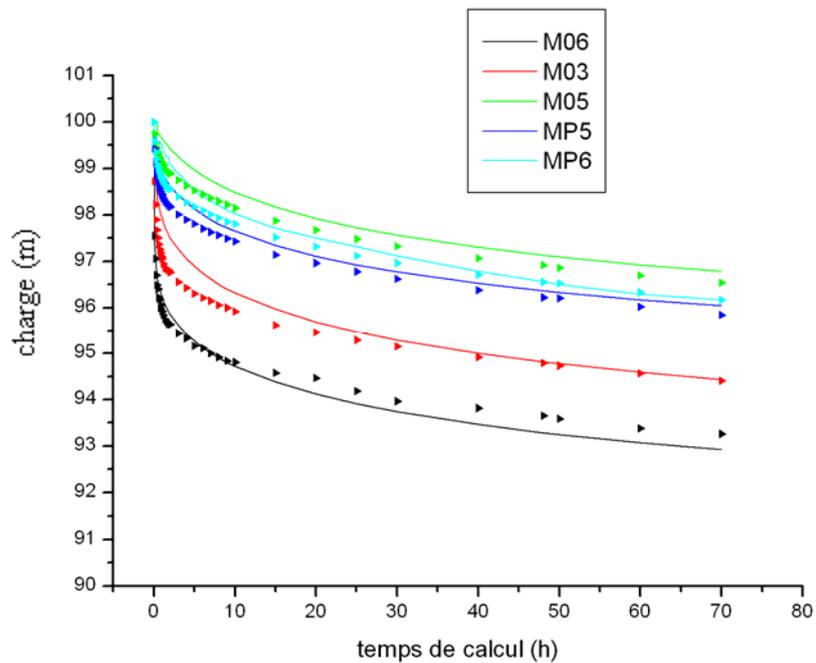


Figure 4.31 : Comparaison entre les charges calculées et mesurées.

### 8.3 Simulation avec les données de l'année 2005

La première simulation a été faite avec les données de l'année 2004. Les observations faites pendant les essais de 2005 montrent un comportement très différent de l'aquifère, démontrant une modification des propriétés hydrodynamiques. Pour ces raisons, les observations de 2005 sont utilisées de manière indépendante et une nouvelle identification des paramètres a été menée.

On considère donc le même problème mais pour l'essai de puits réalisés au point M16 (voir figure 4.10). Pour l'estimation des paramètres, nous allons supposer que le domaine est formé par 3 zones et nous allons utiliser le même maillage de discontinuité que précédemment (figure 4.15). La simulation de ce problème avec le modèle *EDM\_PARAM* donne les itérations suivantes:

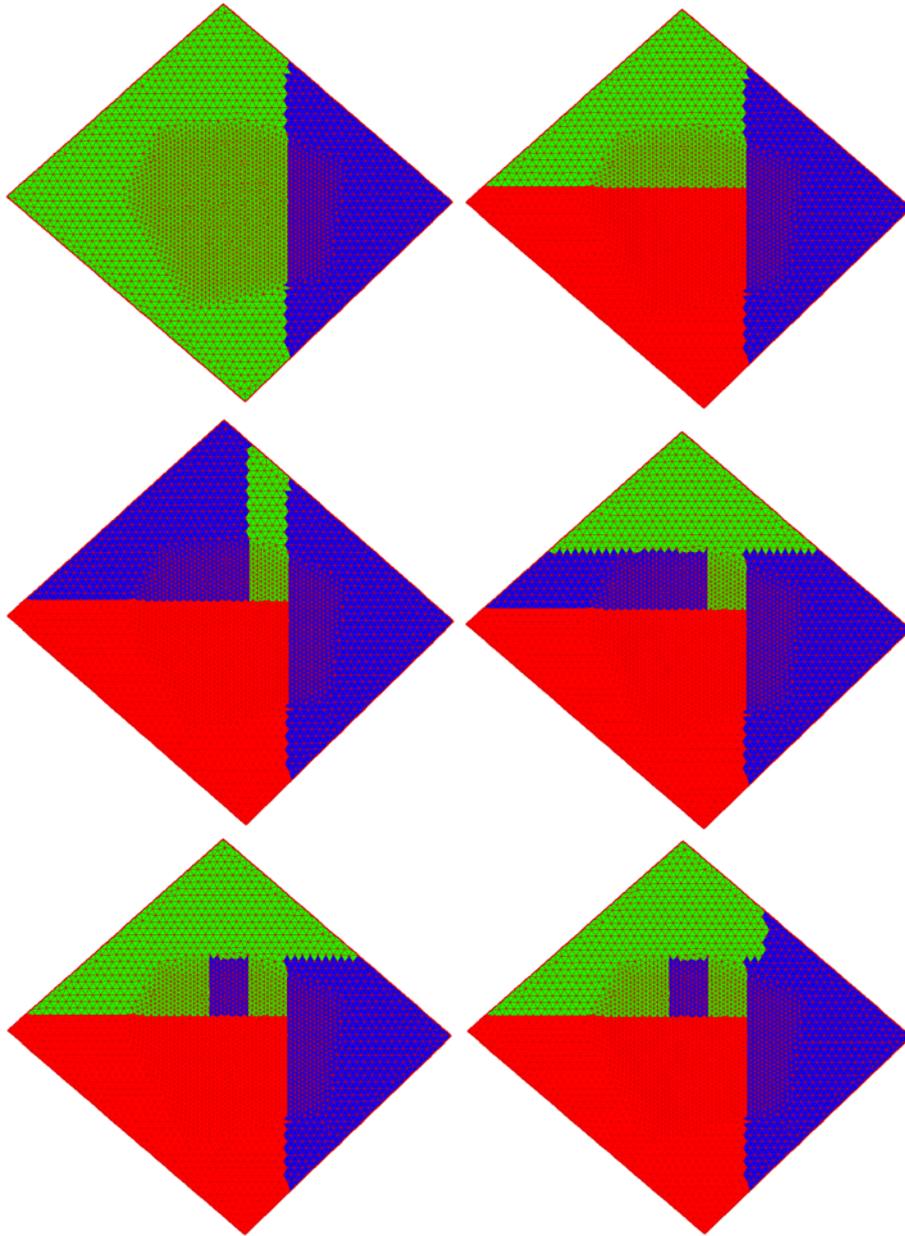


Figure 4.32: Les itérations pour la deuxième simulation de 2005.

Pour cette simulation, critère est de  $Tol = 222$ . Pour la dernière itération (figure 4.32), la valeur de la fonction 'objectif' est 198.23. Les valeurs des paramètres sont données dans le tableau (4.2). Les charges mesurées et calculées sur les points (C01, M05, M08 et M16) sont représentées sur la figure 4.33. Cette figure montre que les courbes de rabattement mesurées et les courbes calculées ont les mêmes allures. Pour  $t > 30h$ , la figure 4.33 montre une bonne correspondance entre les valeurs mesurées et les valeurs calculées.

Paramètre	$k$	$s$	$S_m$	$\sigma$
Zone 1 (Bleue)	$4.06 \times 10^{-5}$	$1.01 \times 10^{-8}$	$3.10^{-5}$	$5.01 \times 10^{-10}$
Zone 2 (verte)	$1.18 \times 10^{-6}$	$1.12 \times 10^{-6}$	$3.10^{-5}$	$8.12 \times 10^{-10}$
Zone 3 (rouge)	$2.28 \times 10^{-3}$	$5.59 \times 10^{-3}$	$3.10^{-5}$	$9.49 \times 10^{-10}$

Tableau 4.2 : Les paramètres hydrodynamiques pour la dernière itération.

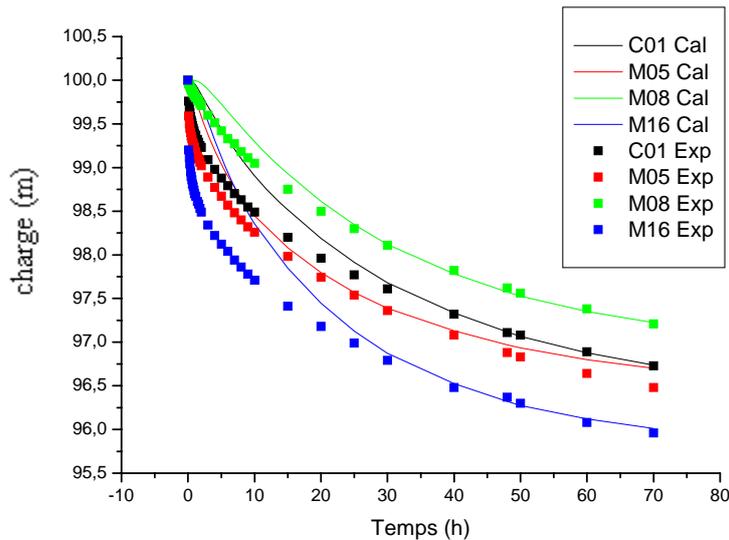


Figure 4.33 : Les charges mesurées et calculées

## 9. Discussion des résultats

Le problème d'identification des paramètres du site de Poitiers « SEH » a été étudié par plusieurs auteurs (Delay et al, 2007, Kaczmaryk and Delay 2007<sup>a,b</sup>, Kaczmaryk, 2008, Ackerer and Delay 2009 et autres). Dans les travaux de Delay et al, (2007), Kaczmaryk and Delay (2007<sup>a,b</sup>) et Kaczmaryk (2008) les auteurs ont adopté le modèle DP dans une seule dimension (écoulement radial). Deux formulations de ce modèle ont été utilisées : homogène et fractal. Dans les deux cas un seul puits est considéré avec plusieurs points de mesure. L'identification des paramètres est faite pour chaque point de mesure indépendamment des autres points (c.-à-d. les paramètres sont identifiés pour chaque courbe de rabattement sur chaque point de mesure). Dans le cas du modèle DP homogène, les paramètres ( $K$ ,  $S$ ,  $S_m$  et  $\sigma$ ), sont supposés constants. Ainsi en développant un modèle d'inversion automatique basé sur l'algorithme de Gauss-Newton et sur la méthode de sensibilité, les auteurs ont pu estimer les 4 paramètres pour chaque point de mesure. Les résultats obtenus par les auteurs sont présentés sur la figure (4.34). Cette figure montre les variations des valeurs des paramètres en fonction

de la distance entre le puits et le point d'observation. Sur cette figure  $K_f$  et  $S_{sf}$  sont la conductivité et le coefficient de stockage dans les fractures,  $S_{sm}$  le coefficient de stockage dans la matrice et  $\alpha$  le coefficient d'échange entre les fractures et les matrices poreuses. La figure (3.34) montre que la conductivité dans les fractures est constante quelque soit la distance entre le puits et le point d'observation. Cependant les coefficients de stockage dans les fractures et les matrices décroissent en suivant une loi d'exponentielle ou de puissance négative et de même pour le coefficient d'échange entre les fractures et les matrices poreuses. Cependant, il est clair que si le modèle utilisé est fiable, les valeurs des paramètres ne doivent pas changer en fonction de la position du point de mesure. En se basant sur ces résultats les auteurs recommandent l'utilisation d'une autre formulation (modèle DP fractal). Dans ce modèle les paramètres varient en fonction de  $r$  (la distance au puits) en suivant les lois suivantes :

$$K = K_0 r^{-a} \quad (4.49)$$

$$S = S_0 r^{-b} \quad (4.50)$$

$$S_m = S_{m0} r^{-b} \quad (4.51)$$

$$\sigma = \sigma_0 r^{-d} \quad (4.52)$$

Le modèle d'inversion automatique développé par les auteurs permet d'identifier les valeurs des paramètres ( $K_0$ ,  $S_0$ ,  $S_{m0}$  et  $\sigma_0$ ) ainsi que les exposants ( $a$ ,  $b$ ,  $c$  et  $d$ ). Les résultats obtenus sont représentés sur la figure (4.35). Cette figure montre que même en utilisant le modèle DP fractal, les valeurs des paramètres varient en fonction de la position du point de mesure. Cependant les intervalles de variation des paramètres dans ce cas sont plus petits que ceux du modèle homogène (voir figure 3.34). Ce qui montre l'efficacité du modèle fractal dans ce cas.

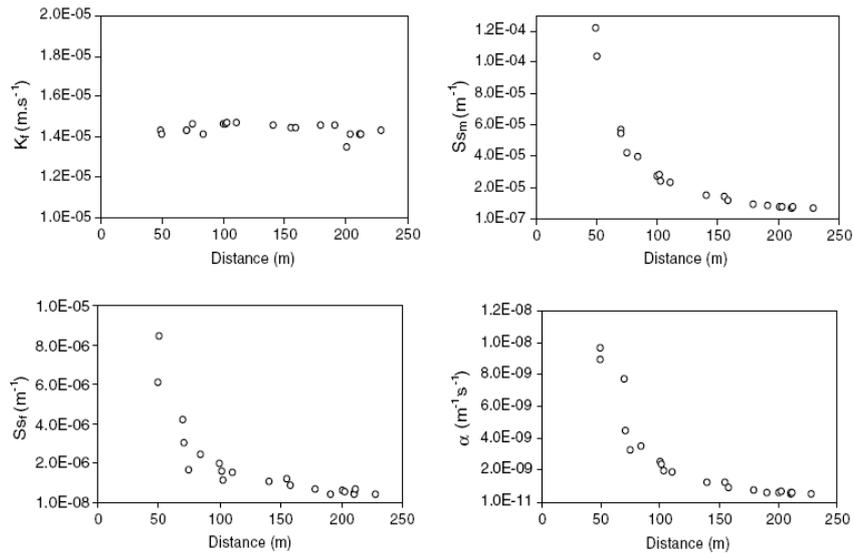


Figure 4.34 : Les résultats obtenus par *Delay et al.2007* dans les cas du modèle DP homogène.

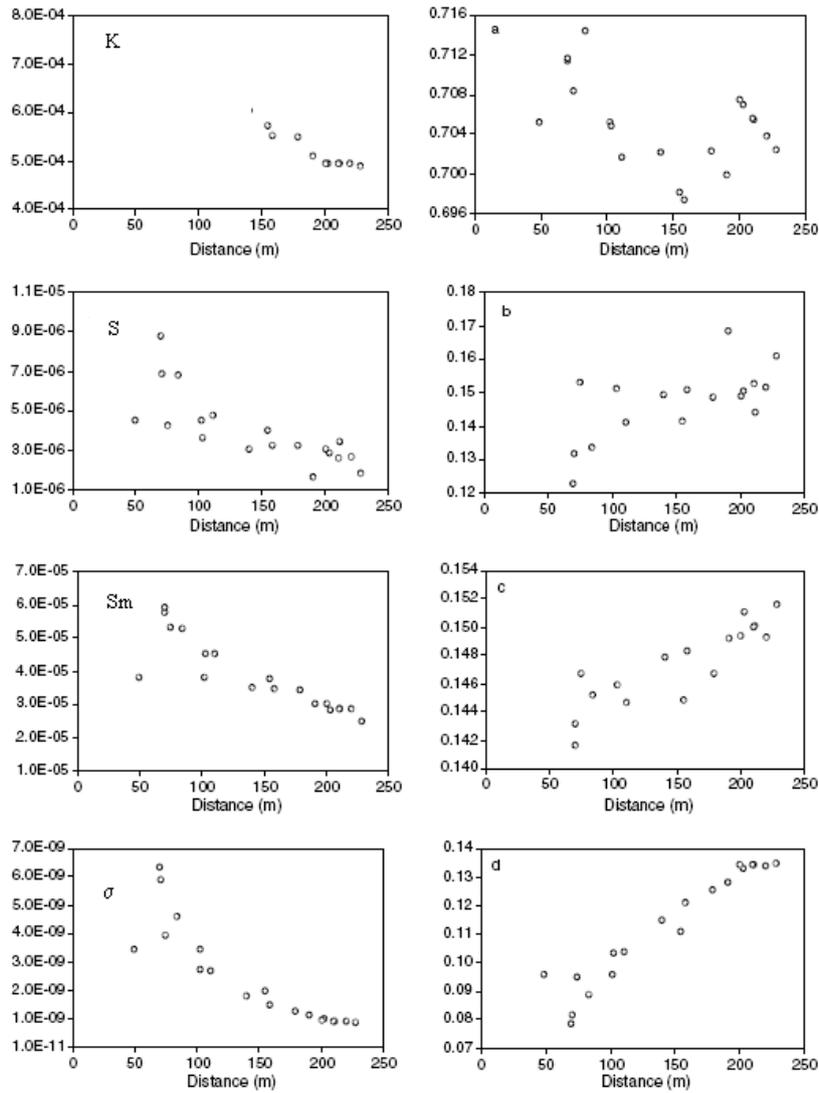


Figure 4.35 : Les résultats obtenus par *Delay et al.2007* dans les cas du modèle fractal.

Dans les travaux de Delay et al., (2007), Kaczmaryk and Delay (2007<sup>a,b</sup>) et Kaczmaryk (2008) les auteurs utilisant le même modèle que celui utilisé dans notre travail (modèle DP). Cependant, il est difficile de comparer leurs résultats avec les nôtres car dans leurs études les domaines sont supposés homogènes et ils sont limités à une seule dimension alors que dans notre étude les domaines sont considérés hétérogènes et en deux dimensions.

Dans l'étude d'Ackerer and Delay (2009), le domaine est vu comme un milieu poreux saturé simple (absence des effets des fractures). Le modèle d'écoulement en milieu saturé (2D) est adopté par les auteurs. Pour l'identification des paramètres, les auteurs utilisent une technique automatique appelée paramétrisation multi-échelle triangulaire où les paramètres sont définis comme des valeurs locales sur les nœuds d'une grille de paramètres.

Deux essais de pompage ont été simulés dans cette étude : l'essai de pompage en M6 (voir figure 4.10) pour les données de l'année 2004 et l'essai de pompage M16 (voir figure 4.10) pour les données de l'année 2005. Ces simulations ont permis de donner les répartitions spatiales de la conductivité et du coefficient d'emménagement (figures 4.36 & 4.37). En effet le schéma multi-échelle utilisé dans cette étude permet de trouver plusieurs répartitions pour le même scénario. Deux répartitions sont représentées sur la figure (4.36) pour chaque essai (pompage en M6 et M16). De même la conséquence de l'adéquation des simulations avec les données disponibles à différents endroits du domaine sont représentées sur la figure (4.38).

Les résultats des simulations montrent que la conductivité hydraulique varie entre  $10^{-8}$  et  $10^{-4}$   $\text{ms}^{-1}$ . Les cartes résultantes des données de 2004 montrent des zones de forte conductivité séparées par des zones de conductivité de valeurs plus faible, tandis que la carte de données de 2005 donne une zone de forte conductivité sauf dans la partie Sud – Est du site (voir figure 4.36). En plus, les résultats montrent que la répartition des zones de conductivité ne se diffère pas beaucoup si l'essai de pompage est fait sur un autre puits, par contre, les valeurs des conductivités peuvent changer en respectant l'intervalle des valeurs ( $10^{-8}$  -  $10^{-4}$   $\text{ms}^{-1}$ ).

Pour le coefficient de l'emménagement, les simulations donnent des valeurs entre  $10^{-7}$  et  $5 \times 10^{-6}$   $\text{m}^{-1}$  dans la partie nord-ouest du domaine (la région où les valeurs de la conductivité sont élevées) tandis que la partie sud-est est affecté d'une valeur uniforme de  $5 \times 10^{-5}$   $\text{m}^{-1}$ . Il a été noté pendant les simulations de tous les essais que la procédure n'a pas été très sensible au coefficient d'emménagement S. ce coefficient a fait une diminution de  $10^{-5}$  à  $10^{-6}$  -  $10^{-7}$

seulement dans la partie nord – ouest du domaine où se trouve les plus hautes valeurs de la conductivité.

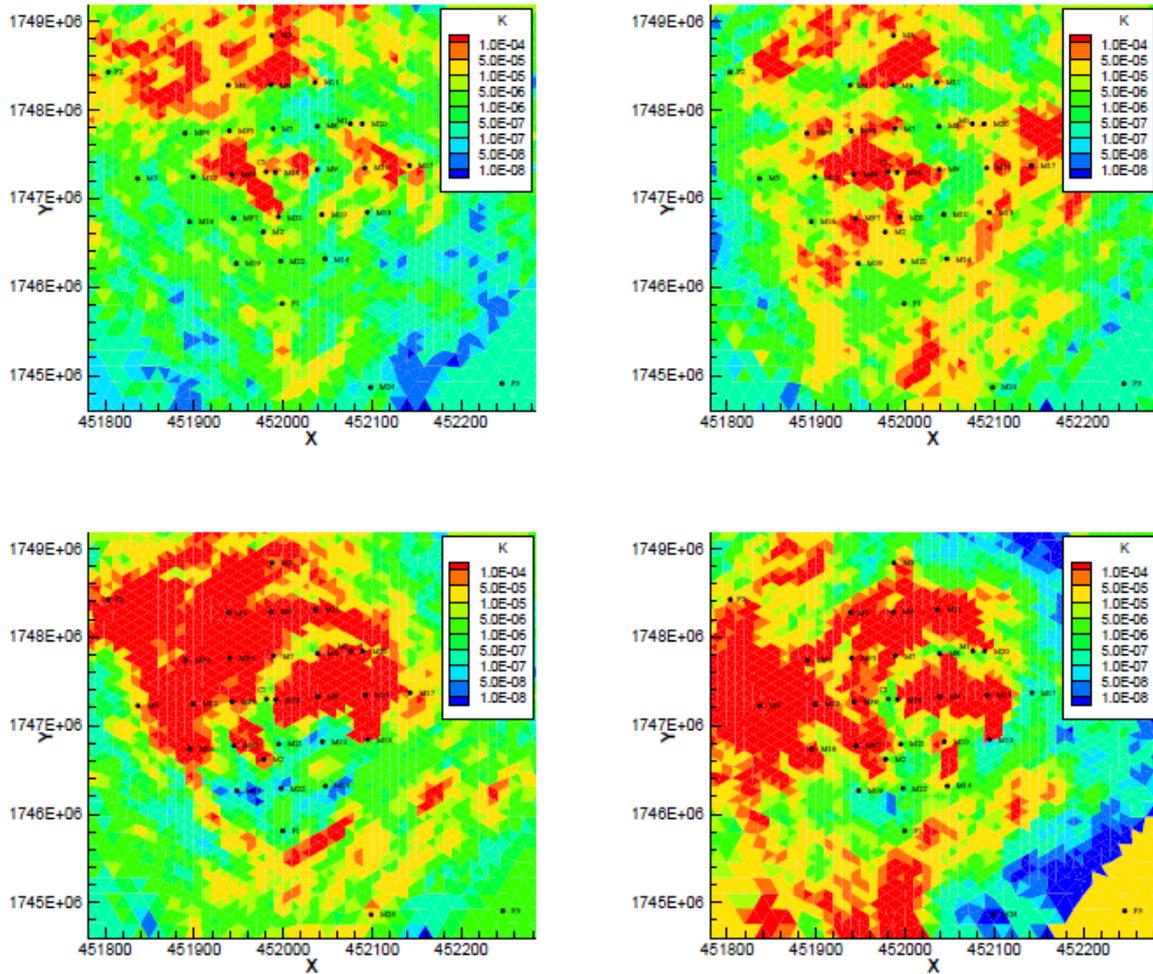


Figure 4.36: Répartition des zones de conductivité  
en haut : Puits M6 (données 2004), en bas : Puits M16 (données 2005)

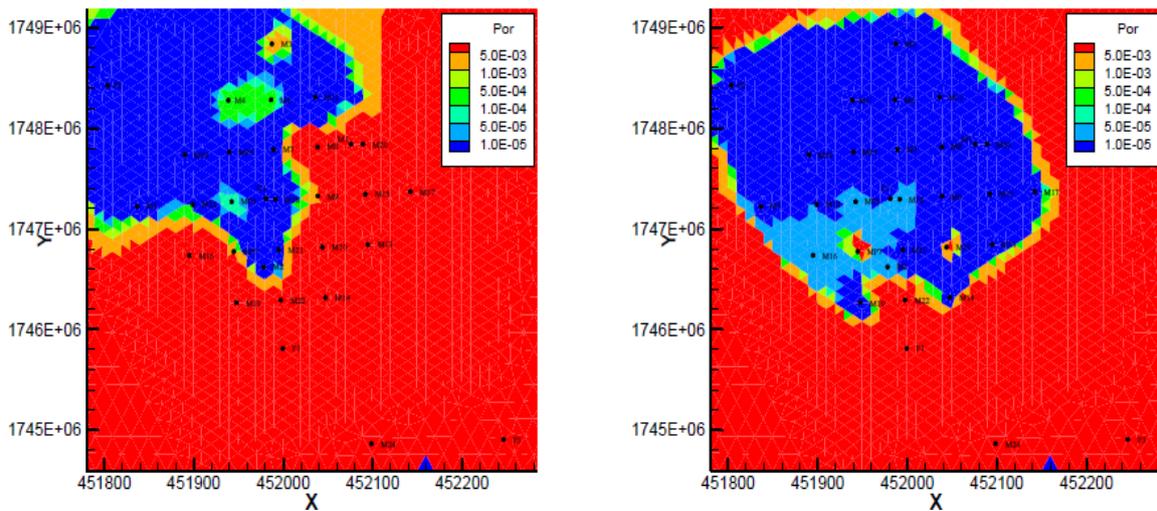


Figure 4.37 : Répartition des zones d'emmagasinement  
en haut : Puits M6 (données 2004), en bas : Puits M16 (données 2005)

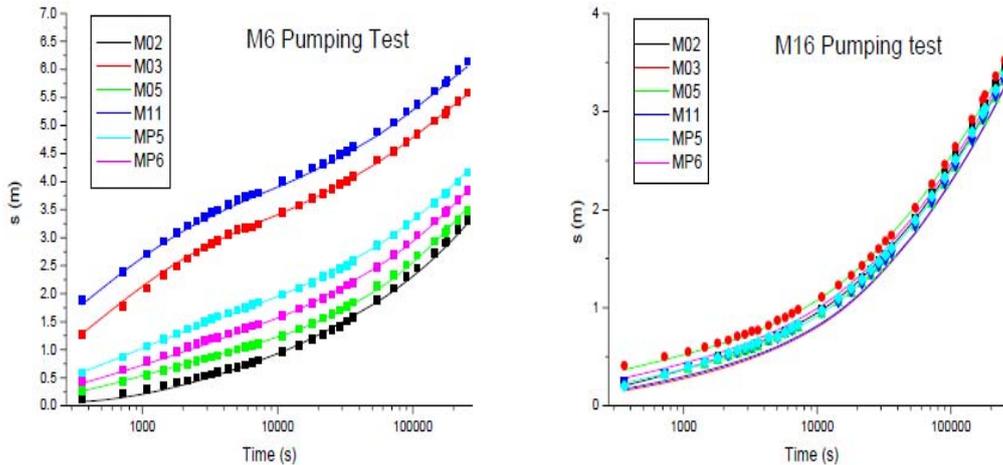


Figure 4.38: Pressions calculées et mesurées  
gauche : Puits M6 (données 2004), droite : Puits M16 (données 2005)

## 9.1 Comparaison entre les résultats du modèle EDM\_PARAM et ceux d'Ackerer and Delay (2009)

### 9.1.1 Conductivité :

Pour comparer nos résultats (EDM\_PARAM) avec ceux du schéma multi-échelle (Ackerer and Delay, 2009), on a représenté sur la figure 4.39 la restriction de la répartition des zones obtenue par EDM\_PARAM sur la partie du domaine la plus significative (où le maillage est fin) dans le cas du pompage en M6. Sur cette figure on remarque qu'on a une zone de conductivité  $K = 1.023 \times 10^{-3}$  (rouge) traversé par une zone de conductivité plus forte  $4.073 \times 10^{-3}$  (voir tableau 4.1). Les valeurs des paramètres trouvés sont différentes de celles trouvées dans l'étude d'Ackerer and Delay (2009). Ceci peut être attribué à la différence entre les deux modèles adoptés dans les deux études. Cependant la répartition des zones n'est pas très loin de la répartition suggérée par Ackerer and Delay (2009) où des zones des conductivités différentes travers l'une l'autre.

Pour l'essai du pompage en M16 (avec les données de 2005), la répartition des zones est représentée sur la figure 4.40. Cette figure montre une répartition complètement différente que celle obtenue par Ackerer and Delay (2009). En effet avec l'étude d'Ackerer et de Delay la partie Nord-Ouest du domaine est caractérisée par forte conductivité (la conductivité la plus forte dans le domaine  $K \approx 10^{-4}$ ). Avec le modèle EDM\_PARAM cette même partie du domaine appartient à la zone verte caractérisé par une conductivité faible ( $K \approx 1.18 \times 10^{-6}$  voir

tableau 4.2). Ainsi on peut remarquer une différence en raisonnant sur la partie Sud-est (forte conductivité avec EDM\_PARAM et faible conductivité avec l'étude d'Ackerer et Delay).

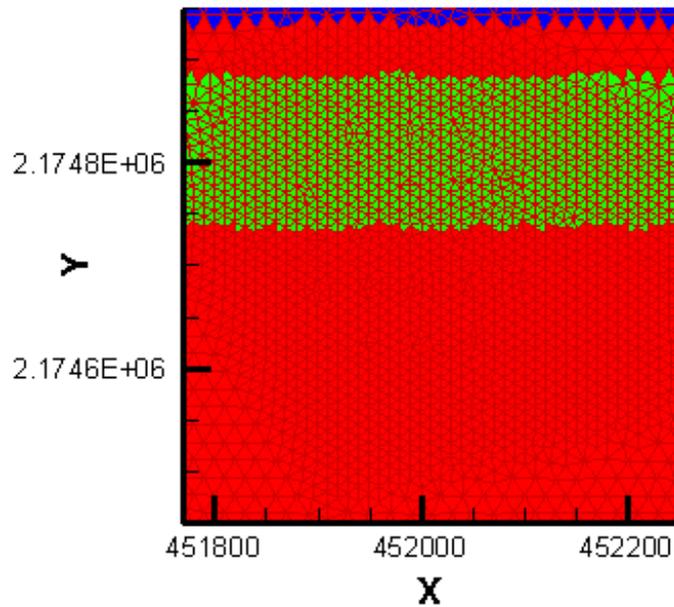


Figure 4.39 : Répartition des zones obtenue par EDM\_PARAM (essai M6)

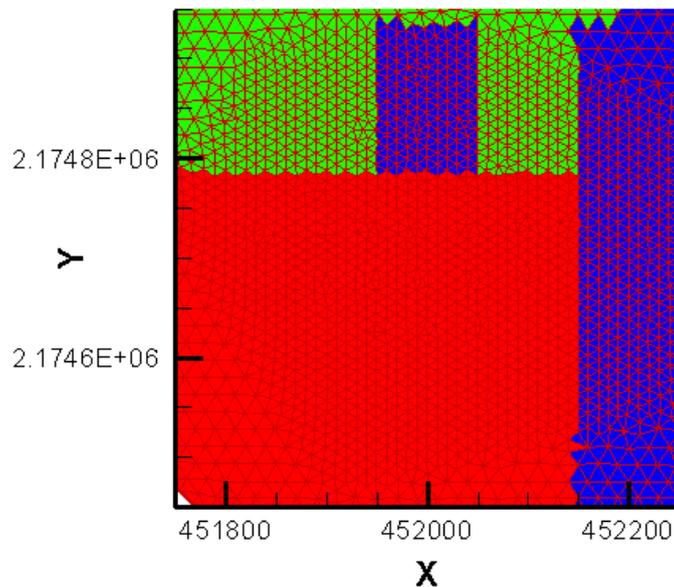


Figure 4.40 : Répartition des zones obtenue par EDM\_PARAM (essai M16)

### 9.1.2 Coefficient d'emménagement:

Pour l'essai de pompage en M6, les résultats obtenus par EDM\_PARAM et par Ackerer and Delay (2009) présentent certaine similitude. En effet, avec EDM\_PARAM la zone Nord-ouest du domaine est caractérisée par un coefficient d'emménagement dans les fractures  $s = 2.6 \times 10^{-5}$  (voir figure 4.39 et tableau 4.1), dans la même partie du domaine Ackerer and

Delay (2009) ont trouvé  $s \approx 10^{-5}$ . Ainsi dans la partie Sud-ouest, EDM\_PARAM donne  $s = 10^{-4}$  et l'étude d'Ackerer and Delay (2009) donne  $s = 3 \times 10^{-5}$ .

Pour le deuxième essai (pompage en M16), EDM\_PARAM et le schéma multi-échelle donnent les mêmes valeurs pour le coefficient d'emménagement dans la partie sud-ouest ( $5.59 \times 10^{-3}$  et  $5 \times 10^{-3}$  respectivement), dans la partie nord l'écart entre les deux résultats devient plus important ( $1.12 \times 10^{-6}$  et  $1 \times 10^{-5}$  respectivement).

Enfin, on peut conclure que malgré la correspondance entre certains résultats du modèle EDM\_PARAM et celui d'Ackerer and Delay (2009), la comparaison de ces résultats ne permet pas d'identifier clairement les paramètres sur le site SEH. En effet la divergence entre les résultats montre qu'un travail supplémentaire doit être réalisé avant d'arriver à identifier correctement les paramètres de ce site. Ce travail doit couvrir la modélisation et l'expérimentation. Alors que les modèles doivent être comparés concrètement (en utilisant par exemple le schéma multi-échelle avec le modèle DP ou bien la méthode de zonation avec le modèle d'écoulement en milieu saturé), la partie expérimentale peut à son tour améliorer les résultats en offrant des données du terrain supplémentaires.

## 10. Conclusion

Dans ce travail on a développé un modèle numérique pour la paramétrisation pour l'écoulement en double milieu (EDM\_PARAM). Le modèle est basé sur la méthode de zonation. La méthode de zonation permet de réduire le nombre des paramètres à estimer en décomposant le domaine en différentes zones caractérisées chacune par des paramètres constants. La recherche de la géométrie des zones se fait en utilisant l'algorithme des indicateurs de raffinement. Le calcul des indicateurs de raffinement nécessite la connaissance du gradient de la fonction objectif par élément de calcul (ou bien par maille), ce qui est fait dans le modèle EDM\_PARAM en utilisant la méthode d'état adjoint. Pour chaque paramétrisation possible le modèle EDM\_PARAM utilise le code EDM\_INV (voir chapitre précédent) pour la minimisation de la fonction objectif.

Dans ce chapitre le modèle EDM\_PARAM est testé en utilisant des expériences numériques et un cas réel (le site SEH du Poitiers). Les expériences numériques montrent que:

- Le modèle est capable de trouver la paramétrisation exacte même pour un petit nombre des points de mesure et même si les valeurs mesurées sont fortement bruitées.
- Quand le nombre des points de mesure est très faible, le modèle risque de ne pas converger si ces points de mesure sont répartis aléatoirement dans le domaine.

- Si les points de mesure sont bien positionnés (dans les zones où la variation de la pression est importante), l'algorithme converge vers la bonne paramétrisation.

Finalement, la simulation du site «SEH» du Poitiers avec le modèle EDM\_PARAM montre l'efficacité et la robustesse de ce modèle.



## Conclusion générale

L'objectif du travail présenté dans cette mémoire est le développement d'un modèle numérique robuste et efficace pour l'estimation des paramètres pour l'écoulement en milieu fracturé. Le modèle comporte les parties suivantes:

### 1- Problème direct :

Le modèle double porosité est adopté dans ce travail pour la simulation de l'écoulement en milieu fracturé. Ce modèle est basé sur la loi de Darcy et la conservation de la masse. Pour la discrétisation de ces équations, la méthode des éléments finis mixtes hybrides (EFMH) et plus précisément la formulation condensée de cette méthode a été utilisée. Cette dernière permet de résoudre le problème des oscillations non physiques. Ainsi, pour la résolution du système linéaire résultant, on a utilisé un solveur direct efficace (UMFPACK) basé sur les méthodes uni-frontales/multi-frontales. Ce solveur permet d'optimiser le temps de calcul dans le cas d'une matrice constante.

### 2- Problème inverse

Le problème inverse peut être présenté comme un problème de minimisation d'une fonction objectif qui est l'écart quadratique entre des valeurs mesurées et des valeurs calculées des charges. Pour la minimisation de la fonction objectif, on a utilisé dans ce travail l'algorithme de Marquardt – Levenberg (ML). Cet algorithme nécessite le calcul des gradients de la fonction objectif qui ont été estimés par la méthode de sensibilité.

### 3- Paramétrisation

La paramétrisation est une technique utilisée pour simplifier la structure de l'espace des paramètres de telle sorte qu'elle puisse être représentée par un espace de dimension inférieure. Parmi les différentes méthodes de paramétrisation (interpolation, multi – échelle, zonation), ce qui nous a intéressé est la paramétrisation par zonation à cause de sa simplicité. La zonation est basée sur le calcul d'indicateurs de raffinement qui permettent d'identifier les frontières entre les zones. Ces indicateurs nécessitent le calcul de gradients par maille, ce qui est très coûteux avec la méthode de sensibilité. Donc pour ce faire, nous avons utilisé la méthode d'état adjoint. En effet, cette méthode calcule le gradient de la fonction objectif par

rapport aux paramètres d'une manière analytique. Ce calcul sera réalisé à un coût proportionnel à celui d'une seule équation linéarisée indépendante du nombre de paramètres.

Le modèle numérique développé dans ce travail a été validé avec des expériences numériques ainsi qu'avec un cas test réel : le Site Expérimental Hydrogéologique « SEH » de Poitiers.

Les résultats montrent :

- Dans le cas idéal (mesures « suffisantes » réparties sur un large éventail de valeurs), le modèle est capable d'identifier la bonne paramétrisation (géométrie des zones) et les paramètres hydrauliques pour chaque zone.
- En diminuant le nombre des points de mesure, le modèle reste capable d'identifier les paramètres ainsi que la répartition géométrique des zones d'hétérogénéité même si les points de mesures sont localisés aléatoirement.
- Ainsi, si les points de mesure sont bien placés (dans les zones où le gradient de charge est le plus important), le modèle est capable d'identifier la paramétrisation même dans le cas d'un faible nombre des points de mesures.
- Le comportement du modèle est également testé dans le cas de données bruitées (erreurs sur les données mesurées). Les résultats montrent que seules les valeurs des paramètres sont modifiées dans ce cas.
- Enfin, le cas de données manquantes dans une des zones (pas de points de mesures dans la zone) est étudié. Dans ce cas, la paramétrisation optimale est affectée localement, la limite de la zone qui ne contient pas de point de mesure est mal identifiée.
- Pour le cas test du site hydrogéologique de Poitiers, le modèle a trouvé une paramétrisation finale d'ordre trois et a été capable d'estimer les paramètres avec un nombre fini de mesures. Nous avons fait une comparaison entre les charges calculées et les charges mesurées et nous avons montré que l'algorithme utilisé donne une solution acceptable.

# Annexe

# **A complete inverse approach for identifying hydraulic parameters in 2D dual-porosity media**

Hassane Fahs\*, Mohamed Hayek\*\*<sup>1</sup>, Marwan Fahs\*, Philippe Ackerer\*

\*Laboratoire d'Hydrologie et de Géochimie de Strasbourg, Université de Strasbourg/EOST, CNRS  
1 rue de Blessig, 67000 Strasbourg, France

\*\*Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement, UMR CEA-CNRS-UVSQ, Centre d'Etudes de Saclay, Orme des Merisiers, F-91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France

**Abstract.** This study describes a complete inverse approach for efficiently identifying the shapes of zones and the parameters values in a 2D dual-porosity model. Refinement indicators are used to parameterize the unknown distributed parameters. For each given level of refinement, an optimization method, the so-called Levenberg-Marquardt method, is developed to solve the problem. Sensitivities of state variables to the unknown parameters are calculated by the sensitivity equations. The adjoint state method is developed in order to calculate the gradients needed for the computations of refinement indicators. Direct problem is solved using the Mixed Finite Elements method. The validity and applicability of the proposed methodology are demonstrated by numerical experiments.

**Keywords:** Dual-porosity media; Inverse problem; Refinement indicator; Parameterization

## **1 Introduction**

Porous media are often found in nature with many interconnected fracture planes throughout their extent in a fairly regular geometric pattern. These fractures, though small, have a large effect on the development and management of water resources since groundwater can flow much more readily in the fractures than in the porous rock (the matrix). The characteristics of groundwater flow in fissured or naturally fractured porous media have been studied for several decades (Barenblatt et al., 1960; Warren and Root, 1963; Odeh, 1965; Kazemi et al., 1969; Dverstorp and Andersson, 1989; Dershowitz and Einstein, 1988; Cacas et al., 1990;

---

<sup>1</sup> Corresponding author. [mohamed.hayek@gmail.com](mailto:mohamed.hayek@gmail.com) (M. Hayek)

Herbert and Lanyon, 1992; Long et al., 1982; Wilson et al., 1983; Oda, 1985; Khaleel, 1989; Zhang et al., 1996; Svensson, 2001) among others.

One of the conceptual models used to study the flow in fractured formations is the dual-porosity model first introduced by Barenblatt et al. (1960). Briefly, a fractured reservoir is a region of space which is partitioned by the thin fractures into disjoint, simply connected matrix blocks. The idea of the dual-porosity model is to consider at each point of space not one but two porosities, one associated with the matrix, and the other associated with the fracture system. The dual-porosity model assumes a macroscopic Darcy flow over the reservoir for the fracture system flow, even though it is literally constrained to the physical fractures. This is reasonable assumption for reservoirs with thin, interconnected fractures and low fluid velocities. Consequently, at each point of space we have properties (porosity, hydraulic head...) for both the matrix and the fracture. In such approach an exchange of water between fractures and blocks has been taken into account. Mathematically, saturated water flow in the fracture pore system is described using two separate flow equations which are coupled by means of water transfer term.

The dual-porosity concept has been commonly used to describe the preferential movement of water and solutes at the macroscopic scale (Boudreau, 1997; Schwartz et al., 2000) and variably-saturated fractured rock formations and structured soils (Gerke and van Genuchten, 1993a,b, 1996; Ray et al., 1997; Larsson and Jarvis, 1999; Lichtner, 2000; Šimunek et al., 2003). Scientists have used this conceptual model to predict leaching of pollutants into soils

and groundwater (Hantush et al., 2000, 2002; Hantush and Govindaraju, 2003) and solute transport through clay soils (Jarvis et al., 1991 a,b).

The dual-porosity model introduces different parameters such hydraulic conductivity, specific storage capacity, and exchange rate coefficient between the fractures and the matrix. Most of these parameters cannot be measured directly due to prohibitive costs or because the relevant scale of measure is unknown or incompatible with the addressed problem. Therefore, to make the model useful, one must obviously be able to fit data (measurements) by adjusting its parameters. There have been few studies concerning the estimation of hydraulic parameters of the fractured rockmass in dual-porosity model. Kätterer et al. (2001) estimated successfully dual-porosity model parameters of undisturbed columns from breakthrough curves of conservative tracers. Larsbo and Jarvis (2005) evaluated data requirements for parameter identification of dual-porosity model. More recently, Delay et al. (2007) have been interested in addressing the hydraulic properties of a one-dimensional fractured reservoir by means of interference tests.

A serious problem encountered in the estimation of hydraulic parameters stems from over-parameterization. Indeed, since experimental measurements are expensive, the set of data is usually insufficient to estimate parameter values in each cell of the computational mesh. The resolution of this problem is done by parameterization. The most popular one consists in defining sub-domains (zones) in which the parameters are assumed to be constant. Although boundaries of these zones have significant impacts on predicting flow in the domain, in most cases we do not have enough direct information to infer the size, shape, locations, and the

number of zones. Even in cases for which there is a clear correlation between identifiable geologic indicators and hydraulic parameters, often data control is still insufficient to infer the size, shape, and location of zones. More problematic is the situation in which hydraulic parameters do not correlate well with lithology. The zonation problem is extremely ill-posed in these cases. Sun and Yeh (1985) were the first to propose a method to identify simultaneously both the parameter zonation and its parameter values for the hydraulic conductivity field in saturated porous media. Using some model structure identification criteria, Carrera and Neuman (1986) were able to choose the best parameter zonation pattern among a number of given alternatives. Eppstein and Dougherty (1996) used a modified version of the extended Kalman filter, a data-driven procedure that dynamically determines and refines zonations. Tsai et al. (2003) used Voronoi zonation to parameterize the unknown distributed parameter and solved the inverse problem by a sequential global-local optimization procedure. Other authors (Burger, 2001; Lu and Robinson, 2006, Lien et al., 2007) used the level set method in order to find the geometry of zones and the parameters set for every zone. The zonation method was developed by Chavent and Bissel (1998) and Ben Ameer et al. (2002), who introduced a method for adaptive multiscale parameterization in which the resolution is increased only in some regions of the reservoir of each stage in the sequence. This method is based on refinement indicators. Refinement indicators do not need significant additional calculations to define an adaptive progressing parameterization but require specified algorithms to define the shape of the zones. An example of a possible algorithm for 2D elliptic problems is given by Hayek and Ackerer (2007).

Common for all of the above-mentioned multiscale techniques is that they are used to identify a one-dimensional parameter (i.e. one type of parameters) such as hydraulic conductivity, transmissivity, diffusion coefficient... Recently, Hayek et al. (2008) developed an adaptive multiscale parameterization algorithm based on refinement indicators in the case of multi-dimensional hydraulic parameters in 1D unsaturated porous media. However, parameterization techniques in dual-porosity media have received little attention in the literature.

The objective of this work is to develop an adaptive multiscale parameterization algorithm using refinement indicators in the case of multi-dimensional distributed hydraulic parameters in 2D dual-porosity model. Two main problems are addressed:

- Find the best possible parameterization: i.e. the number and the geometry of zones in the domain.
- Find the optimal parameters set for the corresponding parameterization.

The rest of the paper is organized as follows: in section 2 we present the direct problem describing the flow in dual-porosity model and the numerical method used to solve this problem. The inverse problem and its formulation are described in section 3. The parameterization method and the computation of refinement indicators are detailed in section 4. The development of the adjoint-state method is presented in section 5. Section 6 describes the adaptive parameterization algorithm. To test the robustness of the method, numerical experiments are presented and discussed in section 7 followed by a conclusion in section 8.

## 2 The direct problem

### 2.1 Mathematical model

In the following expressions, indexes  $f$  and  $m$  refer to the fracture and matrix continua, respectively. Basically, the couple of equations at the Darcy scale describing flow in a dual medium are written as:

$$S_f \frac{\partial h_f}{\partial t} = -\nabla \cdot q_f + \alpha (h_m - h_f) + f_f \quad (1)$$

$$S_m \frac{\partial h_m}{\partial t} = \alpha (h_f - h_m) \quad (2)$$

with  $h$  [L] the hydraulic head,  $S$  [L<sup>-1</sup>] the specific storage capacity,  $\alpha$  [L<sup>-1</sup>T<sup>-1</sup>] the exchange rate coefficient between fractures and the matrix,  $f$  [T<sup>-1</sup>] a sink-source term per unit volume and  $q$  is the macroscopic fluid flux density given by the Darcy's Law:

$$q_f = -K_f \cdot \nabla h_f \quad (3)$$

with  $K$  [LT<sup>-1</sup>] is the hydraulic conductivity (which is a tensor in multidimensional flow).

System (1)-(2) assumes that flow in the matrix is negligible (term in  $K_m$  dropped) and that sink/source terms are located in the fracture continuum.

### 2.2 Discretization

In this work, the direct problem is solved using the Mixed Finite Elements method (MFE). This method is locally conservative and leads to accurate and consistent evaluation of the ve-

locity field (Durlafsky, 1994). To remove unphysical oscillations with the MFE method, we adopt in this work the mass lumping formulation introduced by Younes et al., (2006). The scheme presented here, is developed for unstructured triangular meshes which are suitable for practical problems with complex geometry and local mesh refinement.

With MFE, the velocity inside each triangle  $E$  is approximated with linear vectorial basis functions

$$\mathbf{q} = \sum_{j=1}^3 Q_j^E \mathbf{w}_j^E \quad (4)$$

where  $Q_j^E$  are the flux across edge  $j$  of  $E$  and  $\mathbf{w}_j^E$  are the Raviart-Thomas basis functions.

The discretization of the Darcy's law and the mass balance equation (with implicit scheme in time) give the total flux  $Q_{f,i}^{E,n+1}$  (see Younes et al., 2006 for details):

$$Q_{f,i}^{E,n+1} = \sum_j N_{ij}^E Th_{f,j}^{E,n+1} - \frac{|E|}{3} \left( S_f^E \frac{Th_{f,i}^{E,n+1} - Th_{f,i}^{E,n}}{\Delta t} - \alpha^E (Th_{m,i}^{E,n+1} - Th_{f,i}^{E,n+1}) - f_f^E \right) \quad (5)$$

where  $Th_i^E$  is the averaged head on edge  $i$  of  $E$ ,  $\Delta t$  the time step size, index  $(n)$  refers to the time step level,  $|E|$  is the area of element  $E$ , and  $N^E$  is a local matrix given by

$$N_{ij}^E = -\frac{\det(K_f^E)}{|E|} \mathbf{r}_i^T (K_f^E)^{-1} \mathbf{r}_j \quad (\text{see Younes et al., 2004})$$

where  $\mathbf{r}_i$  is the edge vector face to the

vertex  $i$  of element  $E$  and  $T$  is the transposition operator.  $K^E$ ,  $S^E$ , and  $\alpha^E$  are the hydrodynamic parameters and  $f^E$  is the sink-source term on element  $E$ .

The final discretized system is obtained by writing continuities of pressure heads ( $Th_i^E = Th_i^{E'}$ ) and fluxes ( $Q_{f,i}^E + Q_{f,i}^{E'} = 0$ ) between elements  $E$  and  $E'$  having a common edge  $i$  and by using the analytical solution of Eq. (2):

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{3} \left[ \frac{|E|S_f^E + |E'|S_f^{E'}}{\Delta t} - (|E|\alpha^E + |E'|\alpha^{E'}) e^{\frac{-\alpha_i^E \times \Delta t}{S_{m,i}^E}} \right] Th_{f,i}^{E,n+1} - \sum_j N_{ij}^E Th_{f,j}^{E,n+1} - \sum_j N_{ij}^{E'} Th_{f,j}^{E',n+1} \\
& = \left( \frac{|E|S_f^E}{3} + \frac{|E'|S_f^{E'}}{3} \right) \frac{Th_{f,i}^{E,n}}{\Delta t} - \left( \frac{|E|\alpha^E}{3} + \frac{|E'|\alpha^{E'}}{3} \right) e^{\frac{-\alpha_i^E \times \Delta t}{S_{m,i}^E}} Th_{m,i}^{E,n} + \frac{|E|}{3} f_f^E + \frac{|E'|}{3} f_f^{E'}
\end{aligned} \tag{6}$$

$$Th_{m,i}^{E,n+1} - Th_{f,i}^{E,n+1} = \left( Th_{m,i}^{E,n} - Th_{f,i}^{E,n+1} \right) e^{\frac{-\alpha_i^E \times \Delta t}{S_{m,i}^E}} \tag{7}$$

where  $\alpha_i^E$  and  $S_{m,i}^E$  are the parameters' values ( $\alpha$  and  $S_m$ ) at edge  $i$  of element  $E$  which are calculated using the arithmetic mean of the neighbored elements' parameters' values weighted by the area of each element.

These equations are written for each edge of the element and constitute the following direct system:

$$\begin{cases} A \cdot \mathbf{Th}_f^{n+1} = \mathbf{F}_f^n \\ I \cdot \mathbf{Th}_m^{n+1} = \mathbf{F}_m^n \end{cases} \tag{8}$$

where  $A$  (of sizes  $N_e \times N_e$ ) is the mass matrix,  $I$  (of sizes  $N_e \times N_e$ ) the identity matrix,  $\mathbf{Th}^{n+1}$  (of size  $N_e$ ) the vector of hydraulic head and  $\mathbf{F}^n$  (of size  $N_e$ ) the vector of second member.

Here  $N_e$  is the number of edges in the mesh.

### 3 The parameter estimation problem

From a practical point of view, the resolution of the system (8) requires the values of the four parameters ( $K_f$ ,  $S_f$ ,  $S_m$  and  $\alpha$ ), which are not always satisfactory in the sense that there are some experimental data which are difficult to match. Therefore, it is natural to try to estimate directly these parameters using information (data) of the state variables (hydraulic heads)

which are not difficult to match in some locations of the domain. However, the two parameters  $S_m$  and  $\alpha$  are correlated (see system (6)-(7)). Therefore, we are unable to estimate these two parameters simultaneously. Moreover,  $S_m$  is a storage coefficient which has a physical sense, contrary to  $\alpha$  which is unknown generally. Consequently, in this work we focus on the estimation of the triplet of parameters  $\{K_f, S_f, \alpha\}$ .

### 3.1 Formulation of the problem

In order to estimate the set of parameters  $\{K_f, S_f, \alpha\}$ , data of the state variables must be available. In practice, the hydraulic head is observed in the fractures  $\mathbf{h}_f^{O,n+1} = \{h_{f,if}^{O,n+1}\}$  and the matrix  $\mathbf{h}_m^{O,n+1} = \{h_{m,im}^{O,n+1}\}$  at time  $t^{n+1}$ , and different locations  $(x_{if}, y_{if})$  and  $(x_{im}, y_{im})$ . For simplification we assume that the hydraulic heads in fracture and matrix blocks are measured at the same times. For modeling purposes, the objective is to determine the values of  $K_f$ ,  $S_f$  and  $\alpha$  in each element from the limited number of observations scattered in the field so that a certain criterion is optimized. In this work, we use the classical least square error function  $J$  called also the objective function. For a given set (vector) of parameters  $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots, p_{N_p})^T$ , the objective function measures errors between simulation and observation heads in the fractures and the matrix, respectively:

$$\begin{aligned}
J(\mathbf{p}) &= \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} (\mathbf{h}_f^{n+1} - \mathbf{h}_f^{O,n+1})^T \cdot \Omega_f^{n+1} \cdot (\mathbf{h}_f^{n+1} - \mathbf{h}_f^{O,n+1}) + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} (\mathbf{h}_m^{n+1} - \mathbf{h}_m^{O,n+1})^T \cdot \Omega_m^{n+1} \cdot (\mathbf{h}_m^{n+1} - \mathbf{h}_m^{O,n+1}) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=1}^{N_f} w_{f,i}^{n+1} (h_{f,i}^{n+1} - h_{f,i}^{O,n+1})^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=1}^{N_m} w_{m,i}^{n+1} (h_{m,i}^{n+1} - h_{m,i}^{O,n+1})^2.
\end{aligned} \tag{9}$$

Here  $w_{f,i}^{n+1}$  and  $w_{m,i}^{n+1}$  are weights given to the observations  $h_{f,i}^{O,n+1}$  and  $h_{m,i}^{O,n+1}$  ( $w_{f,i}^{n+1} = w_{m,i}^{n+1} = 1$  in the numerical experiments),  $h_{f,i}^{n+1}$  (resp.  $h_{m,i}^{n+1}$ ) are the calculated hydraulic heads in the fracture (resp. matrix) for the current set of parameters,  $\Omega_f^{n+1}$  and  $\Omega_m^{n+1}$  are assumed diagonal matrices where diagonal elements are  $w_{f,i}^{n+1}$  and  $w_{m,i}^{n+1}$ , respectively,  $N_f$  (resp.  $N_m$ ) the number of measurements in the fractures (resp. the matrix),  $N$  the number of time steps. This objective function is composed of two terms corresponding to the errors between simulation and observation of the head in the fracture and the matrix, respectively.

### 3.2 Optimization procedure

The parameter estimation problem is solved iteratively starting from an initial set of parameters  $\mathbf{p}^0$  and using Levenberg-Marquardt (Levenberg, 1944, Marquardt, 1963) algorithm. With this algorithm, the relationship between two consecutive iterations is given by:

$$\mathbf{p}^{k+1} = \mathbf{p}^k - (\mathbf{J}_f^T \cdot \Omega_f \cdot \mathbf{J}_f + \mathbf{J}_m^T \cdot \Omega_m \cdot \mathbf{J}_m + \eta \mathbf{I})^{-1} \cdot \nabla J(\mathbf{p}^k) \tag{10}$$

where  $k$  is the iteration index.  $\mathbf{J}_f$  and  $\mathbf{J}_m$  are the sensitivity (or Jacobian) matrices which correspond to the fractures and the matrix, respectively. They are defined as follows:

$$\mathbf{J}_f = (\mathbf{J}_f^0, \mathbf{J}_f^1, \dots, \mathbf{J}_f^{N-1}) \quad \text{and} \quad \mathbf{J}_m = (\mathbf{J}_m^0, \mathbf{J}_m^1, \dots, \mathbf{J}_m^{N-1}) \quad (11)$$

$$\text{where } \mathbf{J}_f^{n+1} = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_{f,i}^{n+1}}{\partial p_j} \\ \vdots \\ \frac{\partial h_{f,i}^{n+1}}{\partial p_j} \end{bmatrix}_{\substack{1 \leq i \leq N_f \\ 1 \leq j \leq N_p}} \quad \text{and} \quad \mathbf{J}_m^{n+1} = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_{m,i}^{n+1}}{\partial p_j} \\ \vdots \\ \frac{\partial h_{m,i}^{n+1}}{\partial p_j} \end{bmatrix}_{\substack{1 \leq i \leq N_m \\ 1 \leq j \leq N_p}} \quad \text{for } n = 1, \dots, N-1.$$

In Eq. (10),  $\mathbf{I}$  is the identity matrix (of dimensions  $N_p \times N_p$ ) and  $\eta$  is a positive parameter.

The Levenberg-Marquardt algorithm is a modification of the Gauss-Newton method that, in a self-adaptive manner, navigates between the Gauss-Newton algorithm and the method of steepest descent (Press et al., 1992). Combining the robustness of the latter with the computational efficiency of the Gauss-Newton method, the Levenberg-Marquardt algorithm has become a highly valued optimization tool for non-linear problems of least-squares fitting in many engineering fields.

### 3.3 Computation of sensitivity coefficients

The Levenberg-Marquardt algorithm requires calculating the sensitivity coefficients  $\frac{\partial h_{f,i}^{n+1}}{\partial p_j}$

and  $\frac{\partial h_{m,i}^{n+1}}{\partial p_j}$  of the state variables with respect to the unknown parameters. These sensitivity

coefficients can be calculated by finite differences or by the sensitivity method (Sun, 1994).

The advantage of the latter is that it provides an exact estimate of the coefficients. Moreover,

the sensitivity method requires the computation of some derivatives which have been already

computed for the direct problem.

The idea of the sensitivity method is to derive the discrete system (8) with respect to the unknown parameters:

$$\begin{cases} A \cdot \frac{\partial \mathbf{Th}_f^{n+1}}{\partial p_j} = -\frac{\partial A}{\partial p_j} \cdot \mathbf{Th}_f^{n+1} + \frac{\partial \mathbf{F}_f^n}{\partial p_j} \\ I \cdot \frac{\partial \mathbf{Th}_m^{n+1}}{\partial p_j} = \frac{\partial \mathbf{F}_m^n}{\partial p_j} \end{cases} \quad (12)$$

where  $\frac{\partial \mathbf{Th}_f^{n+1}}{\partial p_j} = \left( \frac{\partial \mathbf{Th}_{f,1}^{n+1}}{\partial p_j}, \dots, \frac{\partial \mathbf{Th}_{f,N_e}^{n+1}}{\partial p_j} \right)^T$  and  $\frac{\partial \mathbf{Th}_m^{n+1}}{\partial p_j} = \left( \frac{\partial \mathbf{Th}_{m,1}^{n+1}}{\partial p_j}, \dots, \frac{\partial \mathbf{Th}_{m,N_e}^{n+1}}{\partial p_j} \right)^T$  are the un-

knowns of the system.

The matrices of system (12) are the same than the matrices of system (8) which also make the sensitivity method attractive concerning computational effort. Indeed, the solution method used for solving the direct system can be used to solve the set of sensitivity systems. The number of simulation runs required to generate the sensitivity coefficients per iteration is  $(N_p + 1)$  at each time step (one simulation for the direct problem and  $N_p$  simulations for the sensitivity systems).

The resolutions of system (12) give us the quantities  $\frac{\partial \mathbf{Th}_{f,i}^{n+1}}{\partial p_j}$  and  $\frac{\partial \mathbf{Th}_{m,i}^{n+1}}{\partial p_j}$  which represent the

values of the sensitivities coefficients at each edge. The sensitivity coefficients  $\frac{\partial h_{f,i}^{n+1}}{\partial p_j}$  and

$\frac{\partial h_{m,i}^{n+1}}{\partial p_j}$  in each element can be calculated from the relation between  $h_{f,i}^{n+1}$  (resp.  $h_{m,i}^{n+1}$ ) and

$\mathbf{Th}_{f,i}^{n+1}$  (resp.  $\mathbf{Th}_{m,i}^{n+1}$ ) which are obtained from the MFE method with mass lumping:

$$\frac{\partial h_{f,i}^{n+1}}{\partial p_j} = \frac{1}{3} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial Th_{f,i_k}^{n+1}}{\partial p_j} \quad \text{and} \quad \frac{\partial h_{m,i}^{n+1}}{\partial p_j} = \frac{1}{3} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial Th_{m,i_k}^{n+1}}{\partial p_j} \quad (13)$$

where  $Th_{f,i}^{n+1}$  are the averaged heads on each edge of element ( $i$ ).

## 4 Parameterization

The method of zonation is used in this work in order to redefine functions  $K_f(x, y)$ ,  $S_f(x, y)$  and  $\alpha(x, y)$ . Then these functions are approximated by:

$$K_f(x, y) = \sum_{i=1}^{N_p/3} K_{f,i} I_{Z_i}(x, y), \quad S_f(x, y) = \sum_{i=1}^{N_p/3} S_{f,i} I_{Z_i}(x, y) \quad \text{and} \quad \alpha(x, y) = \sum_{i=1}^{N_p/3} \alpha_i I_{Z_i}(x, y) \quad (14)$$

where  $K_{f,i}$ ,  $S_{f,i}$  and  $\alpha_i$  are the unknown values of  $K_f$ ,  $S_f$  and  $\alpha$  on zone  $Z_i$ , and  $I_{Z_i}(x, y)$

is the characteristic function of zone  $Z_i$  defined by

$$I_{Z_i}(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{if } (x, y) \in Z_i, \\ 0 & \text{if } (x, y) \notin Z_i. \end{cases} \quad (15)$$

We note that the shapes of zones  $Z_i$  are unknown and must be determined. Once a current parameterization is determined the above optimization algorithm is used in order to determine the parameter values in each zone of the parameterization.

### 4.1 Refinement indicator

In order to determine the shape of each zone, we use refinement indicators introduced by Chavent and Bissel (1998) and used by Ben Ameer et al. (2002) and Hayek and Ackerer (2007). These authors use the optimally conditions in order to define the refinement indicator.

Recently, Hayek et al. (2008) give a new mathematical development to define the refinement indicator and extend it to the case of multi-dimensional refinement indicator in order to identify the hydrodynamic parameters in one-dimensional unsaturated porous media. In this paper, we use the same formulation to define the multi-dimensional refinement indicator corresponding to the set of parameters  $\{K_f, S_f, \alpha\}$ .

Indeed, assume that the current parameterization (for example the homogeneous case) constitute an unsatisfactory solution of the parameter estimation problem, then an additional degree of freedom (additional parameters vector) is necessary. This can be obtained by dividing the domain into two zones  $Z_1$  and  $Z_2$ . The main problem is to find the optimal location of the boundary between the two zones. This is achieved using the refinement indicator. Refinement indicators  $I_{K_f}$ ,  $I_{S_f}$  and  $I_\alpha$  corresponding to parameters  $K_f$ ,  $S_f$  and  $\alpha$  are defined by

$$I_{K_f} = \left| \sum_{i \in Z_1} \frac{\partial J(K_f^*, S_f^*, \alpha^*)}{\partial K_{f,i}} \right|, \quad I_{S_f} = \left| \sum_{i \in Z_1} \frac{\partial J(K_f^*, S_f^*, \alpha^*)}{\partial S_{f,i}} \right| \quad \text{and} \quad I_\alpha = \left| \sum_{i \in Z_1} \frac{\partial J(K_f^*, S_f^*, \alpha^*)}{\partial \alpha_i} \right| \quad (16)$$

where  $(K_f^*, S_f^*, \alpha^*)$  is the solution corresponding to the current parameterization. The definition of refinement indicators is extended to the more general case of multi-dimensional distributed parameters. Since vector  $(I_{K_f}, I_{S_f}, I_\alpha)^T$  is constant by zone, the global refinement indicator can be computed by using the refinement indicator corresponding to each parameter. If we denote by  $I_{K_{f,i}}$ ,  $I_{S_{f,i}}$  and  $I_{\alpha_i}$  the refinement indicators corresponding to parameters  $K_f$ ,

$S_f$  and  $\alpha$  at location  $i$ , and by  $\tilde{I}_{K_{f,i}} = \frac{I_{K_{f,i}}}{\max_i I_{K_{f,i}}}$ ,  $\tilde{I}_{S_{f,i}} = \frac{I_{S_{f,i}}}{\max_i I_{S_{f,i}}}$  and  $\tilde{I}_{\alpha_i} = \frac{I_{\alpha_i}}{\max_i I_{\alpha_i}}$ , the dimensionless indicators corresponding to  $I_{K_{f,i}}$ ,  $I_{S_{f,i}}$  and  $I_{\alpha_i}$ , then the multi-dimensional re-

refinement indicator corresponding to the set of parameters  $\{K_f, S_f, \alpha\}$  is defined as the norm of vector  $(\tilde{I}_{k_{f,i}}, \tilde{I}_{S_{f,i}}, \tilde{I}_{\alpha_i})^T$ :

$$\lambda_i = \left\| (\tilde{I}_{k_{f,i}}, \tilde{I}_{S_{f,i}}, \tilde{I}_{\alpha_i})^T \right\| = \tilde{I}_{k_{f,i}} + \tilde{I}_{S_{f,i}} + \tilde{I}_{\alpha_i} \quad (17)$$

As we observe, multi-dimensional refinement indicators are calculated from the derivatives of the objective function with respect to the local value (the value at each mesh element) of each parameter. These multi-dimensional refinement indicators are calculated for a fixed number of parameter discontinuity locations defined by the users, and the location(s) corresponding to the greater refinement indicators are selected for the next refinement level. For more details of how to obtain these refinement indicators, the reader can be referred to Hayek et al. (2008).

## 4.2 Refinement strategy

In the reality, starting from a current parameterization, there are infinite possibilities to refine a zone. Numerically, we are unable to test all these possibilities, and then a strategy of refinement must be adopted. Ben Ameer et al. (2002) and Hayek and Ackerer (2007) used the so-called vertical and horizontal refinement indicators in order to define interfaces between zones. In their works, the mesh used for solving the direct problem is rectangular and refinement indicators are supported by the edges of the mesh elements. Consequently, interfaces between zones are verticals or horizontals. In this work, we extend the study to the case of irregular mesh (here triangular). We use vertical and horizontal indicators. Vertical indicators are numbered starting from left to right and horizontal indicators are numbered starting from down to up. The distance between two vertical (resp. horizontal) indicators is defined by the

users. Fig. 1a represents a grid of refinement indicators composed of four vertical and four horizontal indicators.

Now, let us explain how we can refinement indicators in order to build the interface between two zones. Let's take for example the third vertical refinement indicator (Fig. 1b). This indicator divides the domain into two zones left and right. It intersects six mesh elements. The method requires that each zone is composed by a certain number of mesh elements, then some parts of the mesh elements which intersect the indicator must gathered or removed from the left zone. The idea is as follows: if the center of mass of the mesh element is located at the left of the indicator then the entire element is gathered to the left zone. If not, then the element is removed from the left and gathered the right zone. Consequently, for this example the third indicator gives the interface plotted in Fig. 1b. The same strategy is used for the horizontal indicators.

## **5 Adjoint state method**

Refinement indicators require the calculation of the gradients of the objective function with respect to the parameter values in each mesh element. These gradients can be computed by using the sensitivity method which is equivalent to solving at each time step a number of linear systems equal to the number of elements and consequently, this is very costly numerically. Therefore, in order to reduce computation costs, the adjoint-state method (Chavent, 1974; Sun, 1994) is used. This method requires the resolution of only two systems (direct system

and adjoint system) at each time step, and the gradients of the objective function are obtained by simple scalar products.

Consider the following optimization problem (at each time step):

$$\begin{cases} \text{Find } \mathbf{p} \in R^{N_p} \text{ that minimizes } J(\mathbf{p}) \text{ under constraints :} \\ A \cdot \mathbf{Th}_f^{n+1} \cdot \mathbf{F}_f^n = 0 \\ I \cdot \mathbf{Th}_m^{n+1} \cdot \mathbf{F}_m^n = 0 \end{cases} \quad (18)$$

The Lagrangian associated to this optimization problem write:

$$\mathcal{L}(\mathbf{p}, \mathbf{Th}_f, \mathbf{Th}_m, \gamma_f, \gamma_m) = J(\mathbf{p}) + \sum_{n=0}^{N-1} \left\langle A \cdot \mathbf{Th}_f^{n+1} \cdot \mathbf{F}_f^n, \gamma_f^n \right\rangle_{R^{N_e}} + \sum_{n=0}^{N-1} \left\langle I \cdot \mathbf{Th}_m^{n+1} \cdot \mathbf{F}_m^n, \gamma_m^n \right\rangle_{R^{N_e}} \quad (19)$$

where  $\gamma_f = (\gamma_f^0, \gamma_f^1, \dots, \gamma_f^{N-1})^T$  and  $\gamma_m = (\gamma_m^0, \gamma_m^1, \dots, \gamma_m^{N-1})^T$  are the two vectors of Lagrange multipliers associated to the two state variables  $\mathbf{Th}_f = (\mathbf{Th}_f^1, \mathbf{Th}_f^2, \dots, \mathbf{Th}_f^N)$  and  $\mathbf{Th}_m = (\mathbf{Th}_m^1, \mathbf{Th}_m^2, \dots, \mathbf{Th}_m^N)$ , and  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{R^{N_e}}$  is the scalar product in  $R^{N_e}$ . In (19)  $\mathbf{p}$ ,  $\mathbf{Th}_f$  and  $\mathbf{Th}_m$  are considered as independent variables but are relied by the constraints (8).

The Lagrange multipliers are solutions of the adjoint-system:

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{Th}_f} \cdot \delta \mathbf{Th}_f = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{Th}_f^{n+1}} \cdot \delta \mathbf{Th}_f^{n+1} = 0 \quad \forall \delta \mathbf{Th}_f^{n+1} \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{Th}_m} \cdot \delta \mathbf{Th}_m = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{Th}_m^{n+1}} \cdot \delta \mathbf{Th}_m^{n+1} = 0 \quad \forall \delta \mathbf{Th}_m^{n+1} \end{cases} \quad (20)$$

which is discretized at each time step in:

$$\begin{cases} A \cdot \gamma_f^n = \left[ \frac{\partial \mathbf{F}_f^{n+1}}{\partial \mathbf{Th}_f^{n+1}} \right]^T \cdot \gamma_f^{n+1} + \left[ \frac{\partial \mathbf{F}_m^n}{\partial \mathbf{Th}_f^{n+1}} \right]^T \cdot \gamma_m^n - \left[ \frac{\partial \mathbf{h}_f^{n+1}}{\partial \mathbf{Th}_f^{n+1}} \right]^T \cdot \Omega_f^{n+1} \cdot (\mathbf{h}_f^{n+1} - \mathbf{h}_f^{O,n+1}) \\ I \cdot \gamma_m^n = \left[ \frac{\partial \mathbf{F}_m^{n+1}}{\partial \mathbf{Th}_m^{n+1}} \right]^T \cdot \gamma_m^{n+1} + \left[ \frac{\partial \mathbf{F}_f^{n+1}}{\partial \mathbf{Th}_m^{n+1}} \right]^T \cdot \gamma_f^{n+1} - \left[ \frac{\partial \mathbf{h}_m^{n+1}}{\partial \mathbf{Th}_m^{n+1}} \right]^T \cdot \Omega_m^{n+1} \cdot (\mathbf{h}_m^{n+1} - \mathbf{h}_m^{O,n+1}) \end{cases} \quad (21)$$

This system is retrograde in time ( $n = N-1, \dots, 0$ ) with initial condition:  $\gamma_f^N = \gamma_m^N = 0$ .

To determine the gradients of the objective function with respect to the values in the mesh elements, we use the Lagrangian differential which writes:

$$\delta \mathcal{L} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{p}} \cdot \delta \mathbf{p} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{Th}_f} \cdot \delta \mathbf{Th}_f + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{Th}_m} \cdot \delta \mathbf{Th}_m + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \gamma_f} \cdot \delta \gamma_f + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \gamma_m} \cdot \delta \gamma_m. \quad (22)$$

Since  $\mathbf{p}$ ,  $\mathbf{Th}_f$  and  $\mathbf{Th}_m$  are considered as independent variables and using (20) we obtain:

$$\nabla J(\mathbf{p}) \cdot \delta \mathbf{p} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{p}} \cdot \delta \mathbf{p} \quad \forall \delta \mathbf{p} \quad (23)$$

Consequently, the gradient of the objective function equal to the partial derivative of the Lagrangian with respect to  $\mathbf{p}$  and we can write:

$$\nabla J(\mathbf{p}) = \frac{\partial \mathcal{L}(\mathbf{p}, \mathbf{Th}_f, \mathbf{Th}_m, \gamma_f, \gamma_m)}{\partial \mathbf{p}} \quad (24)$$

By writing  $\mathbf{p}$  as a vector of all mesh elements parameter values (i.e.

$\mathbf{p} = (p_{k,i}; k = 1, \dots, 3; i = 1, \dots, N_{mesh})^T$  where index  $k$  represents the parameters  $K_f$ ,  $S_f$  and  $\alpha$

( $k = 1$  for  $K_f$ ,  $k = 2$  for  $S_f$ ,  $k = 3$  for  $\alpha$ ), we obtain:

$$\frac{\partial J(\mathbf{p})}{\partial p_{k,i}} = \frac{\partial \mathcal{L}(\mathbf{p}, \mathbf{Th}_f, \mathbf{Th}_m, \gamma_f, \gamma_m)}{\partial p_{k,i}} \quad (25)$$

Using (19) we obtain:

$$\frac{\partial J(\mathbf{p})}{\partial p_{k,i}} = \sum_{n=0}^{N-1} \left\langle \frac{\partial A}{\partial p_{k,i}} \mathbf{T} \mathbf{h}_f^{n+1} - \frac{\partial \mathbf{F}_f^n}{\partial p_{k,i}}, \gamma_f^n \right\rangle_{R^{N_e}} + \sum_{n=0}^{N-1} \left\langle -\frac{\partial \mathbf{F}_m^n}{\partial p_{k,i}}, \gamma_m^n \right\rangle_{R^{N_e}} \quad (26)$$

Since matrix  $A$ , vectors  $\mathbf{F}_f^n$  and  $\mathbf{F}_m^n$  depend explicitly on the mesh parameters  $p_{k,i}$ , the derivatives in Eq. (26) can be calculated directly. Eq. (26) gives the gradients of the objective function with respect to the mesh parameter values which are needed for the computation of the refinement indicators. To obtain these quantities, the direct system (8) must be solved for all time steps to obtain the state variables, and then these later are used in system (21) to obtain the adjoint states at each time step. In conclusion, the computations of refinement indicators need the resolutions of  $2 \times N$  linear systems.

## 6 Adaptive parameterization algorithm

The following algorithm can be applied to the estimation of the triplet of parameters  $\{K_f, S_f, \alpha\}$  in system (1)-(2). This algorithm provides an adaptive parameterization technique that increases the degrees of freedom step by step. It allows to determine geometry of zones and parameter values in each zone. The algorithm is as follows:

1. Choose the total number of zones  $n_z$ , a starting threshold  $\varepsilon > 0$ , an initial  $n_0$ -parameterization  $P_{n_0}$  and an initial vector of parameters  $\mathbf{p}^{n_0} \in R^{3n_0}$  (in practice we take  $n_0 = 1$  which corresponds to homogeneous case, but this is not necessary).
2. Minimize the objective function and compute the optimal solution  $\mathbf{p}^{n_0^*}$ .

3. Choose a fixed grid of indicators composed of vertical and horizontal indicators.

4. **For**  $k = n_0, nz$  **do**

Denote by  $P_k$  a parameterization containing  $k$  zones.

**For** each zone of  $P_k$  **do**

- a. Compute all multi-dimensional refinement indicators  $\lambda_i^k$ .
- b. Let  $\lambda^{k,\max} = \max_i \lambda_i^k$  (the largest value of all multi-dimensional indicators of the  $k$  zones). Select a number of partitions corresponding to indicators which have values  $\lambda_i^k \geq \tau \cdot \lambda^{k,\max}$ .
- c. Each selected partition contains  $k+1$  zones. At this stage, we minimize the objective function for each one of these partitions.
- d. Select the partition which corresponds to the smallest objective function.

**End do**

**End do**

5. The current parameterization contains now  $nz$  zones which we denote as  $P_{nz}$ . If the objective function is smaller than  $\varepsilon$  then we have found the solution. If not, for each zone of  $P_{nz}$ : compute all multi-dimensional refinement indicators and select the partitions corresponding to the largest refinement indicators (greater than  $\lambda^{nz,\max}$ ).

6. The selected partitions at step (5) now contain  $nz+1$  zones. Each one of these partitions gives us two partitions of  $nz$  zones each one. In this stage, we minimize the ob-

jective function for each of the two partitions (of  $nz$  zones) deriving from the partition of  $nz + 1$  zones.

7. Select the partition which corresponds to the smallest objective function.
8. If the objective function is smaller than  $\varepsilon$  then we have found the solution. If not, we return to stage (5).

**Remark 1.** In stages (4b) and (5) of the algorithm, we take partitions corresponding to indicators which have values greater than  $\lambda^{k,\max}$ . Because, the refinement indicators are defined at the first order, we suggest to select not only the partition corresponding to the larger value of indicators but a set of partitions.  $\tau$  is a user's defined value, equal to 0.6 in our case.

**Remark 2.** In stage (6), since we seek a  $nz$ -parameterization (parameterization contains  $nz$  zones), we suggest a way to gather three zones into two zones. Fig. 2 describe stage (6) of the algorithm for  $nz = 4$ . The indicator (dashed line) divides zone  $Z_2$  into two sub-zones  $Z_{12}$  and  $Z_{22}$ , then the current partition contains 5 zones. This partition gives us two partitions of 4 zones each one. The first partition is obtained by gathering  $Z_{21}$  to  $Z_4$  and the second one is obtained by gathering  $Z_{22}$  to  $Z_4$ . We note that the two newly partitions conserve discontinuity of parameters at the indicator location.

## 7 Numerical examples

To evaluate the applicability and efficiency of the developed inverse procedure in estimation of model parameters in dual medium, we consider the following theoretical problem:

- The domain is rectangular of dimensions  $200\text{ m} \times 200\text{ m}$  and is discretized into 388 triangular elements (see Fig. 3).
- It is divided into three zones (see Fig. 4 and Table 1 for the corresponding parameters). The parameter  $S_m$  is fixed to  $3 \times 10^{-5}\text{ m}^{-1}$  in the whole domain.
- The boundary conditions are of Dirichlet type with constant head  $h_f = 1\text{ m}$  imposed at the boundary, and a source of flow rate  $f_f = 50\text{ m}^3\text{ h}^{-1}$  is located at the center.
- The simulated period is 5000 seconds and the heads in fractures and the matrix are measured every 500 seconds.

### 7.1 Parameters estimation

The first run consists in estimating the parameters only, the parameterization (geometry and positions of zones) is known. The total number of parameters to be estimated is 9. This first run is done to estimate the accuracy of the inverse procedure when the parameterization is known. The efficiency of the proposed inverse procedure is depicted in Fig. 5. This figure presents the evolution of the objective function as a function of iteration level in the inverse algorithm. The exact and estimated parameters set after optimizations are summarized in

Table 1. The match between exact and estimated parameters is very good. Various initial parameters sets were used and provide the same accurate solution.

## 7.2 Parameters and zones identifications

The parameterization and the associated parameters sets are identified in the second run, using refinement indicators and the algorithm described in the previous section. In this test-case, we use total measurement data (i.e. one measurement per element). These data are solutions of the direct problem corresponding to the exact parameters. Since the true solution (zonation and parameters) is known, the aim of this run is to check the capabilities of the parameterization algorithm to seek the optimal parameterization and optimal solution. The initial parameterization consists in 1 zone with the following initial parameter set:  $K_f = 10^{-6} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $S_f = 10^{-5} \text{ m}^{-1}$ ,  $\alpha = 10^{-11} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  (stage 1 of the algorithm). After minimizing the objective function, the optimal solution for this parameterization is  $K_f = 2.985 \times 10^{-5} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $S_f = 2.620 \times 10^{-6} \text{ m}^{-1}$ ,  $\alpha = 4.113 \times 10^{-11} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  and the value of the optimal objective function is  $73.75 \times 10^4$  (stage 2 of the algorithm).

A fixed set (grid) of refinement indicators is selected first by the user. We decide to estimate the interfaces between zones with a precision of 10 m. Then the grid of refinement indicators is composed of 9 vertical and 9 horizontal refinement indicators (stage 3). Therefore, we have 18 possible locations of discontinuity. At this stage (stage 4a) we compute multi-dimensional refinement indicators corresponding to these discontinuities by using Eq. (17). The multi-dimensional refinement indicator values are represented in Fig. 6a. The six selected disconti-

nities (V5, V6, V7, H3, H4, H5) having an indicator greater than  $0.6\lambda^{1,\max}$  are plotted in Fig. 7a in vertical and horizontal lines (stage 4b). The optimization is performed for these six discontinuities (stage 4c) and the smallest value of the objective function is obtained for V7 (solid line in Fig. 7a). Then the parameterization (cut) which corresponds to V7 is retained for the first iteration (stage 4d). This parameterization is composed of two zones and it is showed in Fig. 7b. The parameters values in each zone and the value of the objective function correspond to this cut are represented in Table 2.

For the second iteration, the computation of refinement indicators is based on the solution obtained previously at the first iteration. The multi-dimensional refinement indicators in each one of the two zones are plotted in Fig. 6b. For this iteration, nine refinement indicators have values greater than  $0.6\lambda^{2,\max}$ : V8 in zone 1 and (V4, V5, V6, H3, H4, H5, H6, H7) in zone 2 (see Fig. 6b and Fig. 7b). The parameterization corresponding to H3 provides the smallest objective function ( $J = 3.85 \times 10^4$ ), then this parameterization is retained for the second iteration (see Fig. 7c and Table 2 for the corresponding parameters). Since the optimal objective function does not reach the fixed threshold, then we continue to the next iteration by computing all multi-dimensional refinement indicators in each zone of the three-zone parameterization retained for the second iteration (stage 5).

For the third iteration, six refinement indicators are selected. All these indicators are in zone 2 (V3, V4, V5, H5, H6, H7) (see Fig. 6c and Fig. 7c). Each one of these indicators gives us two parameterizations of three zones each one (stage 6). Then, the objective function is minimized for the corresponding twelve parameterizations. The retained parameterization at the third

iteration is one of the parameterization corresponding to V5 and it is represented in Fig. 7d. Again, the optimal objective function is greater than the fixed threshold (see Table 2), then we return to stage (5) of the algorithm (stage 8).

The procedure is repeated three more times. Fig. 7d (resp. Fig. 7e and Fig. 7f) represents the parameterization retained at the fourth iteration (resp. the fifth iteration and the sixth iteration). The corresponding parameters and optimal objective functions are presented in Table 2. At the sixth iteration, one of the parameterization corresponding to indicator V4 in zone 2 (see Fig. 7) gives the smallest optimal objective function. This parameterization is identical to the true parameterization represented in Fig. 4. The value of the optimal objective function is very close to 0 (see Table 3). The stopping criteria of the parameterization based on the minimum value of the objective function are reached and the iterative procedure is stopped. The zonation is well identified and the parameters set for each zone is estimated with accuracy (Table 3). The solution obtained by the algorithm is the exact solution in terms of parameter values and heterogeneity.

### **7.3 Effect of number of data points**

The robustness of the algorithm is examined with respect to the number of data points. Then four test-cases have been run by using successively 300, 200, 100 and 50 data points. In all these test-cases, data-point locations are selected arbitrary such that they are distributed in the three zones (i.e. each zone contains at least one data point). The numerical solutions for the four test-cases give exactly the same iterations than the case of total data. However, when the

number of data points becomes smaller than 50, the algorithm becomes unable to detect the true parameterization. This problem will be discussed in section 7.5.

#### 7.4 Effect of noisy data

We tested the behaviour of the algorithm with respect to noise on the measured data. In a realistic situation, data noises may be due to equipment. We consider here the case of Fig. 8 where symbols (•) indicate locations of measurements points (50 data points). We assume that data include noise and we will try to reconstruct this parameterization.

Measurement errors are simulated by adding a random number to the exact values  $h_{f,i}^{n+1}(\mathbf{p})$  and  $h_{m,i}^{n+1}(\mathbf{p})$  :

$$\begin{aligned} h_{f,i}^{O,n+1} &= h_{f,i}^{n+1}(\mathbf{p}) + \varepsilon_f \cdot \delta_{f,i}^{n+1} \\ h_{m,i}^{O,n+1} &= h_{m,i}^{n+1}(\mathbf{p}) + \varepsilon_m \cdot \delta_{m,i}^{n+1} \end{aligned} \quad (27)$$

where  $\varepsilon_f = \varepsilon_m = 0.4$  and  $\delta_{f,i}^{n+1}, \delta_{m,i}^{n+1} \in ]-0.5, 0.5[$  are random numbers. In practice, we take  $\varepsilon_f = \varepsilon_m = 0.2$  which correspond to an error of 10%, but here we chose a higher level of noise (20%) in order to test the efficiency of the algorithm.

Fig. 9 shows the successive parameterizations obtained by the algorithm. The true parameterization is detected after six iterations as in the case of total data point and without noisy in data. However, the selected parameterizations are not similar for all iterations. Indeed, the parameterizations retained for the first and second iterations are identical in the two cases but those retained for the third, fourth and fifth iterations are different (see Fig. 7 and Fig. 9). Results concerning the parameters are given in Table 4.

## 7.5 Locations of data points

As discussed previously, when the number of data points decreases and if the locations of measurements are chosen arbitrary, the algorithm becomes unable to detect the true parameterization. Indeed, measurement points (piezometers) which give low head values cannot provide good estimate of parameters. Since the true solution is known, the aim of this example is to study the capacity of the algorithm in the case of small number of data point, but these data points are installed at locations where the hydraulic head values are relatively high. Fig. 10 shows the hydraulic head profile in the fractures which corresponds to the exact parameters. The same profile is obtained for the head in the matrix. Twenty data points are used in this run, seven in zone 1, four in zone 2 and nine in zone 3. These data points are installed at locations of high head values (see Fig. 10). The run is performed without measurement errors. After six iterations, the true parameterization is found and the estimated parameters are close to the exact ones (see Table 4). We note that the parameterizations selected at each iteration are exactly the same than the case of full data points.

## 7.6 Lack of data

In all previous examples, measurement points were localized in every zone. We consider now the case of Fig. 10 but the measurement points located in the second zone have been removed and added to zones 1 and 3. The run is performed without measurement errors. The procedure is stopped automatically after 10 iterations of refinement level if the objective function did not reach the fixed threshold. The parameterization which corresponds to the smallest objective

function is presented in Fig. 11. This parameterization is obtained at the sixth iteration and the corresponding objective function value is 196.157. As we see, this parameterization is different from the exact one. Indeed, zone 1 is the same, however a part of zone 3 (the dashed boundary) is gathered to zone 2. For this example, the lack of data affects the parameterization and consequently the parameters values in some zones (see Table 5). However, this affection remains locally: only the interface between zone 2 (which does not contain measurement points) and zone 3 has been changed. This explains the efficiency of our algorithm since refinements are performed in some zones of the domain (zones which have the larger refinement indicators). The parameters values in zones 1 and 3 are well estimated compared to the values in zone 2 (Table 5).

## 8 Conclusion

This paper presents a complete inverse approach for efficiently identifying the hydrodynamic parameters in 2D dual-porosity model. An adaptive multiscale parameterization algorithm based on the multi-dimensional refinement indicators is proposed to parameterize the distributed parameters into a number of zones. The principle is as follows: we search the parameters vector like a piecewise constant and unknowns are both the parameters values and the geometry of zones. At each step, the algorithm ranks new possible parameterizations in the domain by using the multi-dimensional refinement indicators and selects, among the remaining nominated parameterizations, that which gives the best actual decrease to the data objective function.

The Levenberg-Marquardt algorithm is developed to solve the optimization problem. Sensitivities of the state variables which are required to this optimization algorithm are computed using the sensitivity method. The adjoint state method is developed in order to compute the local gradients needed for the calculation of refinement indicators.

The parameterization algorithm is tested on some synthetic cases. In ideal cases ('enough' measurements, spread over a wide range of values), the suggested algorithm allows to identify the proper parameterization (geometry of zones) and the hydraulic parameters for every zone. We showed that when the locations of measurement points are well chosen, the algorithm is able to recover the true parameterization even in the case of a low measurement point number. The behavior of the algorithm is tested also in the case of noisy data. Results show that only the parameters values are affected in this case. Finally, the case of missing data in one zone is studied. In this case, the optimal parameterization is affected locally, i.e. only the boundary of the zone which does not contain measurement points is changed, which explains the efficiency of refinement indicators.

## References

- Barenblatt, G.I., Y.P. Zheltov, and I.N. Kochina. Basic concepts in the theory of seepage of homogeneous liquids in fissured rocks. *J. Appl. Math. Mech.*, 24: 1286-1303 (1960).
- Ben Ameer, H., G. Chavent, and J. Jaffré. Refinement and coarsening indicators for adaptive parameterization: application of the estimation of hydraulic transmissivities. *Inverse Probl.*, 18(3):775-794 (2002).
- Boudreau, B.P. Diagenetic models and their implementation: modeling transport and reactions in aquatic sediments. Springer-Verlag, 414 pp. (1997).
- Burger, M. A level set method for inverse problems. *Inverse Probl.*, 17:1327–1356 (2001).
- Cacas, M. C., E. Ledoux, G. de Marsily, B. Tillie, A. Barbreau, E. Durand, B. Feuga, and P. Peaudecerf. Modeling fracture flow with a stochastic discrete fracture network: calibration and validation 1. The flow model. *Water Resour. Res.*, 26(3):479-489 (1990).
- Carrera, J. and S.P. Neuman. Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions: 3. Application to synthetic and field data. *Water Resour. Res.*, 22(2):228-242 (1986).
- Chavent G. Identification of functional parameter in partial differential equations. In: Goodson R.E., Polis M., editors. Identification of parameters in distributed systems. New York: Am. Soc. Mech. Eng., 31-48 (1974).
- Chavent G, and R. Bissel. Indicator for the refinement of parameterization. In: Tanaka M., Dulikravich G.S., editors. Inverse problems in engineering mechanics. Elsevier, 309–314 (1998).
- Delay, F. A. Kaczmaryk, and P. Ackerer. Inversion of interference hydraulic pumping tests in both homogeneous and fractal dual media. *Adv. Water Resour.*, 30:314-334 (2007).

- Dershowitz, W. S., and H.H. Einstein. Characterizing Rock Joint Geometry with Joint System Models. *Rock Mech. Rock Eng.*, 1(1):21-51 (1988).
- Durlofsky, L.J. Accuracy of mixed and control volume finite element approximations to Darcy velocity and related quantities. *Water Resour. Res.*, 30(4):965-973 (1994).
- Dverstorp, B., and J. Andersson. Application of the discrete fracture network concept with field data: possibilities of model calibration and validation. *Water Resour. Res.*, 25(3):540-550 (1989).
- Eppstein, M.J., and D.E. Dougherty. Simultaneous estimation of transmissivity values and zonation. *Water Resour. Res.*, 32(11):3321-3336 (1996).
- Gerke, H.H., and M.T. van Genuchten. A dual-porosity model for simulating the preferential movement of water and solutes in structured porous media. *Water Resour. Res.*, 29(2):305-319 (1993a).
- Gerke, H.H., and M.T. van Genuchten. Evaluation of a first order water transfer term for variably saturated dual-porosity flow models. *Water Resour. Res.*, 29(4):1225-1238 (1993b).
- Gerke, H.H., and M.T. van Genuchten. Macroscopic representation of structural geometry of simulating water and solute movement in dual-porosity media. *Adv. Water Resour.*, 19:343-357 (1996).
- Hantush, M.M., M.A. Mariño, and M.R. Islam. Models for leaching of pesticides in soils and groundwater. *J. Hydrol.*, 227:66-83 (2000).
- Hantush, M.M., and R.S. Govindaraju, M.A. Mariño, and Z. Zhang. Screening mode for volatile pollutants in dual-porosity soils. *J. Hydrol.*, 260:58-74 (2002).
- Hantush, M.M., and R.S. Govindaraju. Theoretical development and analytical solutions for transport of volatile organic compounds in dual-porosity soils. *J. Hydrol.*, 279:18-42 (2003).
- Hayek M., and P. Ackerer. An adaptive subdivision algorithm for the identification of the diffusion coefficient in two-dimensional elliptic problems. *J. Math. Model. Algor.*, 6:529-545 (2007).

- Hayek M., F. Lehmann, and P. Ackerer. Adaptive multi-scale parameterization for one-dimensional flow in unsaturated porous media. *Adv. Water Resour.*, 31:28-43 (2008).
- Herbert, A.W., and G.W. Lanyon. Discrete fracture network modelling of flow and transport within a fracture zone at Stripa. In: *Proceedings of the ISRM Regional Conference on Fractured and Jointed Rock Masses, Lake Tahoe, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, California*, 3:699-708 (1992).
- Jarvis, N.J., P.E. Jansson, and P.E. Dik. Modelling water and solute transport in macroporous soil. 1. Model description and sensitivity analysis. *J. Soil Soc.*, 42:59-70 (1991a).
- Jarvis, N.J., L. Bergstrom, and P.E. Dik. Modelling water and solute transport in macroporous soil. 2. Chloride breakthrough under non-steady flow. *J. Soil Soc.*, 42:71-81 (1991b).
- Kätterer, T., B. Schmied, K.C. Abbaspour, and R. Schulin. Single and dual-porosity modelling of multiple tracer transport through soil columns: effects of initial moisture and mode of application. *Eur. J. Soil Soc.*, 52(1):25-36 (2001).
- Kazemi, H., M.S. Seth, and G.W. Thomas. The interpretation of interference tests in naturally fractured reservoirs with uniform fracture distribution. *Soc. Pet. Engrg. J.*, 9:463-472 (1969).
- Khaleel, R. Scale dependence of continuum models for fractured basalts. *Water Resour. Res.*, 25(8):1847-1855 (1989).
- Larsbo, M., and N. Jarvis. Simulating solute transport in a structured field soil: uncertainty in parameter identification and predictions. *J. Environ. Qual.*, 34:621-634 (2005).
- Larsson, M.H., N.J. Jarvis. Evaluation of a dual-porosity model to predict field scale solute transport in a macroporous soil. *J. Hydrol.*, 215:153-171 (1999).
- Levenberg, K. A method for the solution of certain nonlinear problems in least squares. *Quart. Appl. Math.*, 2:164-168 (1944).

- Lichtner, P.C. Critique of dual continuum formulation of multi-component reactive transport in fractured porous media. *Geophys. Monogr.*, 122:281-298 (2000).
- Lien, M., I. Berre, and T. Mannseth. Combined adaptive and level-set parameter estimation. *Multiscale Model. Simul.*, 4(4):1349–1372 (2007).
- Long, J.C.S., J.S. Remer, C.R. Wilson, and P.A. Witherspoon. Porous media equivalents for networks of discontinuous fractures. *Water Resour. Res.*, 18(3):645-658 (1982).
- Lu, Z., B.A. Robinson. Parameter identification using the level set method. *Geophys. Res. Lett.*, 33:L06404, doi:10.1029/2005GL025541 (2006).
- Marquardt, D.W. An algorithm for least squares estimation of non-linear parameters. *J. Soc. Indust. Appl. Math.*, 11:431-441 (1963).
- Oda, M. Permeability tensor for discontinuous rock masses. *Geotechnique*, Vol. 35, 483 pp. (1985).
- Odeh, A.S. Unsteady-state behavior of naturally fractured reservoirs. *Soc. Pet. Engrg. J.*, 5:60-66 (1965).
- Press, W.H., B.P. Flannery S.A. Teukolsky, and W.T. Vetterling. *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, Cambridge, 2nd edition (1992).
- Ray, C., T.R. Ellsworth, A.J. Valocchi, C.W. Boast. An improved dual-porosity model for chemical transport in macroporous soils. *J. Hydrol.*, 193:270-292 (1997).
- Schwartz, R.C., A.S.R. Juo, K.J. McInnes. Estimating parameters for a dual-porosity model to describe non-equilibrium, reactive transport in a fine-textured soil. *J. Hydrol.*, 229:149-167 (2000).
- Šimunek, J., N.J. Jarvis, M.T. van Genuchten, and A. Gårdenäs. Review and comparison of models for describing non-equilibrium and preferential flow and transport in the vadose zone. *J. Hydrol.*, 272:14-35 (2003).

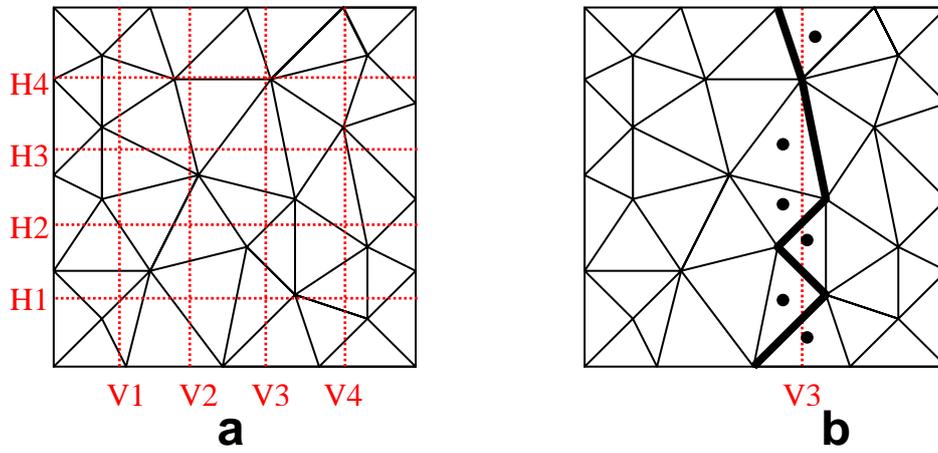
- Sun, N.Z. Inverse problems in groundwater modelling. Dordrecht, The Netherlands: Kluwer Academic, 337 pp. (1994).
- Sun, N.Z., and W.G. Yeh. Identification of parameter structure in groundwater inverse problem. *Water Resour. Res.*, 21(6):869-883 (1985).
- Svensson, U. A continuum representation of fracture networks. Part I: Method and basic test cases. *J. Hydrol.*, 250:170-186 (2001).
- Tsai, F.T.C., N.Z. Sun, and W.G. yeh. Global-local optimization for parameter structure identification in three-dimensional groundwater modeling. *Water Resour. Res.*, 39(2):1043, doi:10.1029/2001WR001135 (2003).
- Warren, J.E., and P.J. Root. The behavior of naturally fractured reservoirs. *Soc. Pet. Engrg. J.*, 3:245-255 (1963).
- Wilson, C.R., P.A. Witherspoon, J.C.S. Long, R.M. Galbraith, A.O. Dubois, and M.J. Macpherson. Large-scale hydraulic conductivity measurements in fractured granite. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci. Geomech. Abstr.*, 20(6):71-83 (1983).
- Younes, A., P. Ackerer, and F. Lehmann. A new mass lumping scheme for the mixed hybrid finite element method. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 67:89-107 (2006).
- Younes, A., P. Ackerer, and G. Chavent. From mixed finite elements to finite volumes for elliptic PDE in 2 and 3 dimensions. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 59:365-388 (2004).
- Zhang, X., D.J. Sanderson, R.M. Harkness, and N.C. Last. Evaluation of the 2-D permeability tensor for fractured rock mass. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci. Geomech. Abstr.*, 33(1):17-37 (1996).

## List of Figures

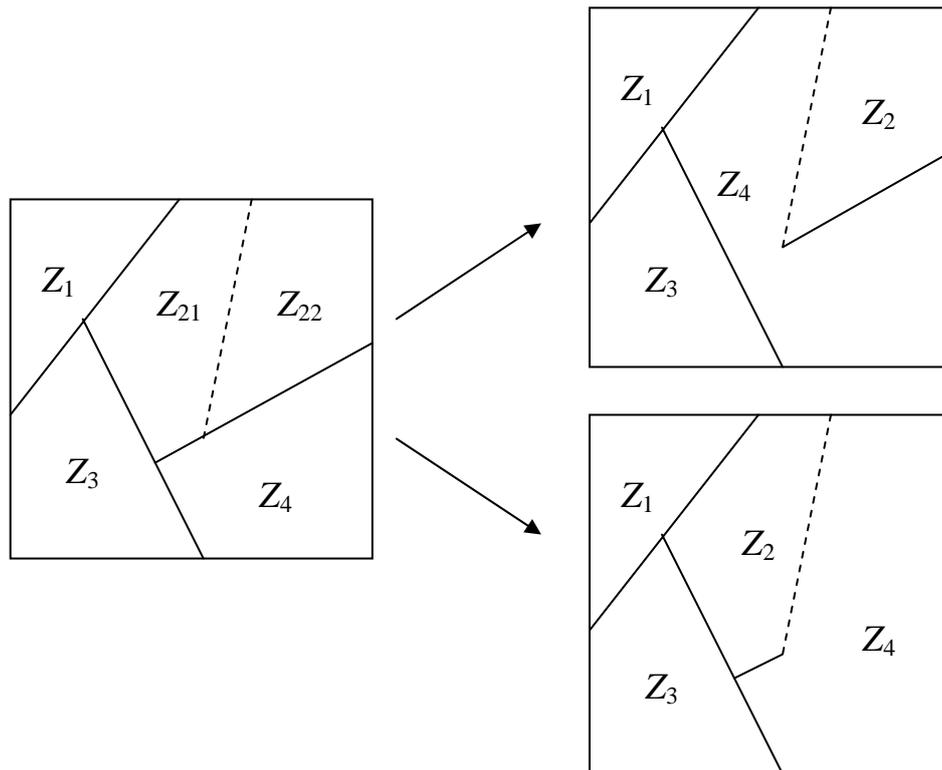
Fig. 1. (a) Vertical and horizontal indicators, (b) interface between zones corresponds to a vertical indicator.....	37
Fig. 2. Description of stage (6) of the algorithm for $n_z = 4$ . .....	37
Fig. 3. Schematic representation of the computational mesh and boundary conditions of the 2D domain. ....	38
Fig. 4. The exact three-zone parameterization, solution of the inverse problem. ....	38
Fig. 5. Evolution of the objective function as a function of iteration level in the inverse procedure developed. ....	39
Fig. 6. Refinement indicator values: (a) for the first iteration, (b) for the second iteration, (c) for the third iteration, (d) for the fourth iteration, (e) for the fifth iteration and (f) for the sixth iteration.....	40
Fig. 7. The optimal refinement process required to recover the three-zone parameterization of Fig. 4. (a) Initial parameterization and locations of refinement indicators selected for the first iteration. (b), (c) (d), (e) and (f) represent cuts retained at the first, second, third, fourth and fifth iteration, respectively, and locations of refinement indicators selected for the second, third, third, fourth, fifth and sixth iteration. ....	41
Fig. 8. Schematic representing the exact three-zone parameterization and the space-distribution of 50 measurement points. ....	42
Fig. 9. Cuts retained at: (a) the first iteration, (b) the second iteration, (c) the third iteration, (d) the fourth iteration, (e) the fifth iteration and (f) the sixth iteration, respectively, for the case of figure Fig. 8 with noisy data. ....	43
Fig. 10. Hydraulic head profile in the fractures and distribution of 20 measurement points at locations of high head values. ....	44
Fig. 11. The optimal parameterization corresponding to the case of lack of data in zone 2....	45

## List of Tables

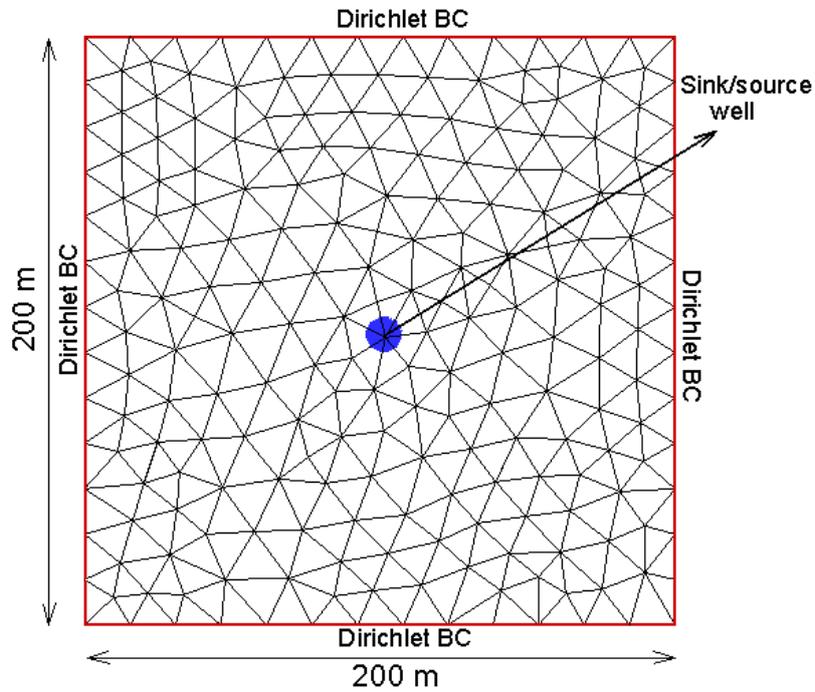
Table 1. Results of the inverse problem with known parameterization. ....	46
Table 2. Results obtained by the algorithm at the first five iterations. ....	47
Table 3. Comparison between the exact solution and the numerical solution obtained by the algorithm at the sixth iteration (the optimal solution).....	48
Table 4. Comparison between the exact solution and the numerical solution obtained by the algorithm for the case of noisy data. ....	49
Table 5. Comparison between the exact solution and the numerical solution obtained by the algorithm for the case of lack of data.....	50



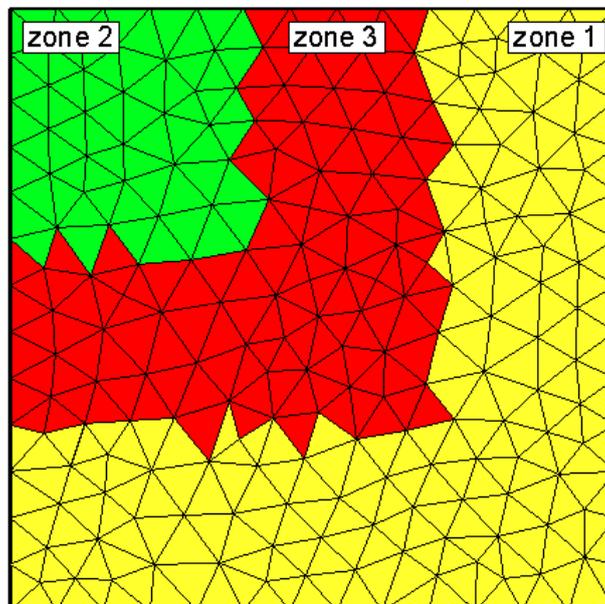
**Fig. 1.** (a) Vertical and horizontal indicators, (b) interface between zones corresponds to a vertical indicator.



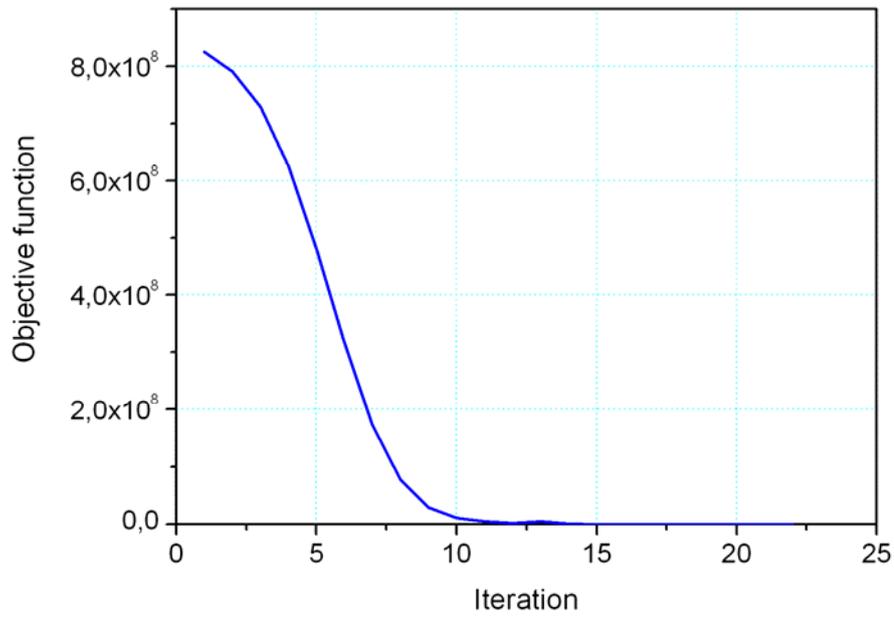
**Fig. 2.** Description of stage (6) of the algorithm for  $n_z = 4$ .



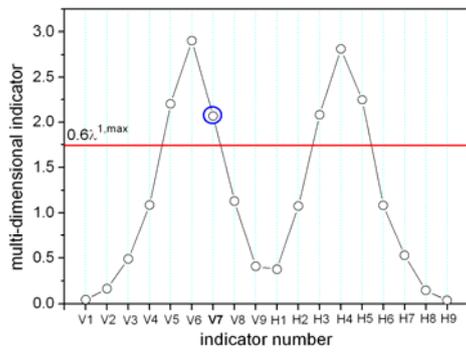
**Fig. 3.** Schematic representation of the computational mesh and boundary conditions of the 2D domain.



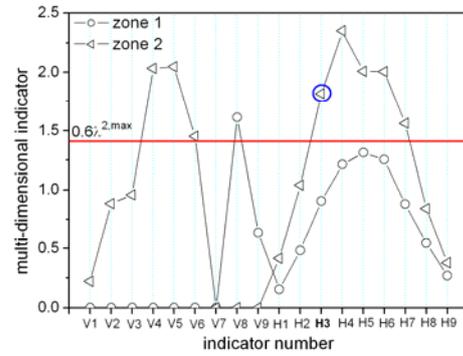
**Fig. 4.** The exact three-zone parameterization, solution of the inverse problem.



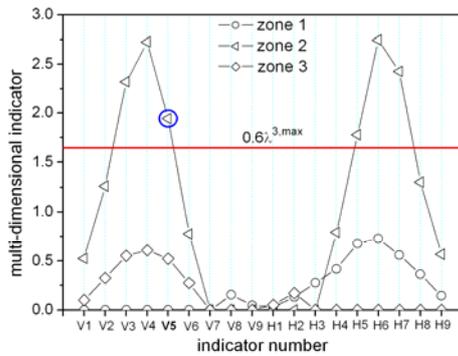
**Fig. 5.** Evolution of the objective function as a function of iteration level in the inverse procedure developed.



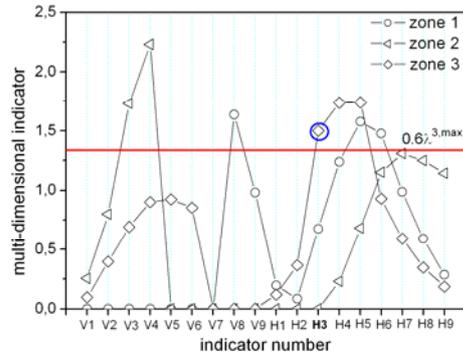
**a**



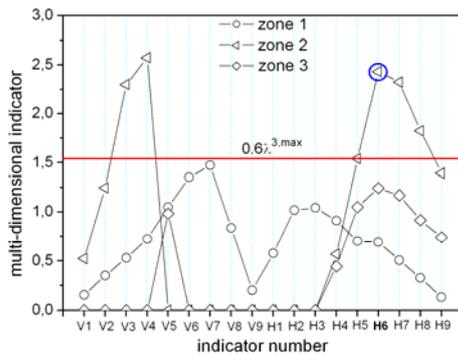
**b**



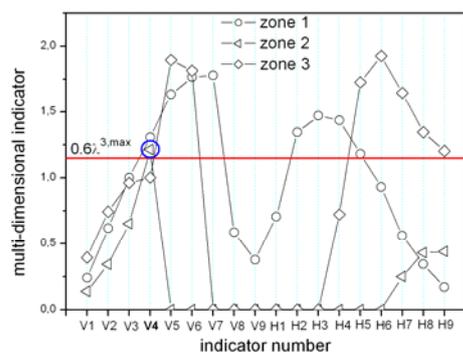
**c**



**d**

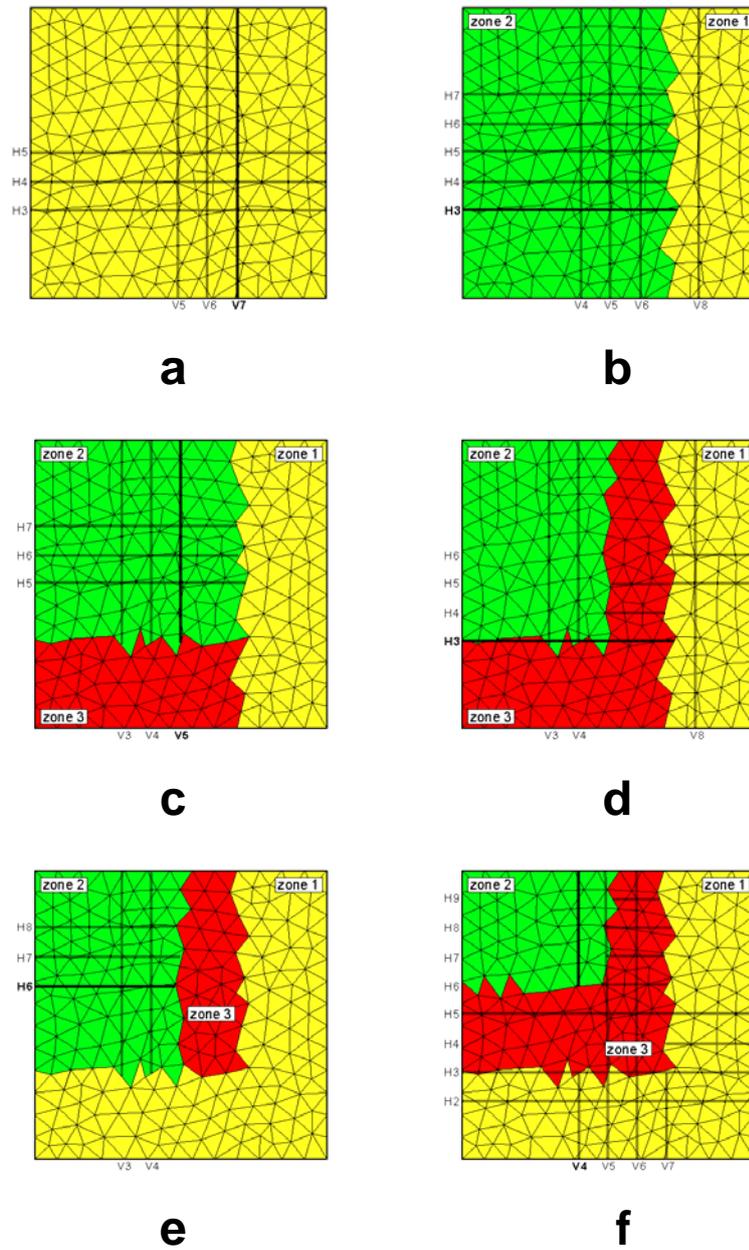


**e**

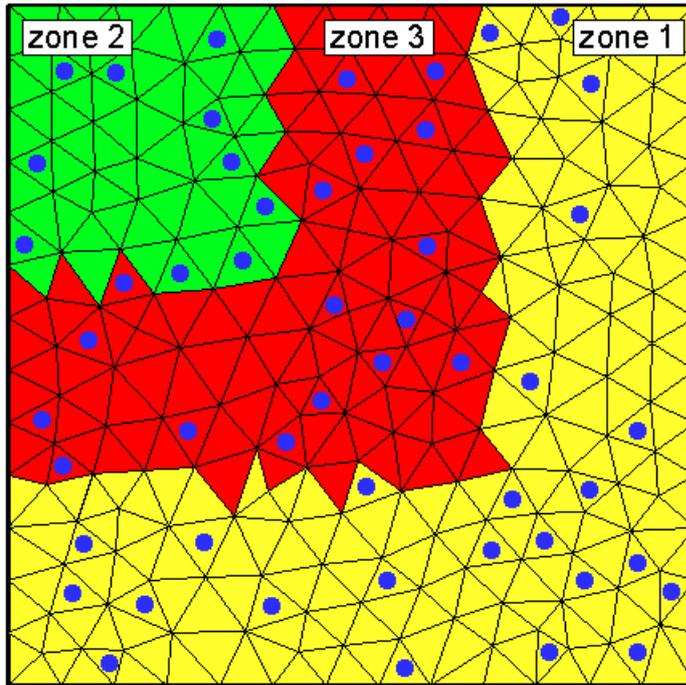


**f**

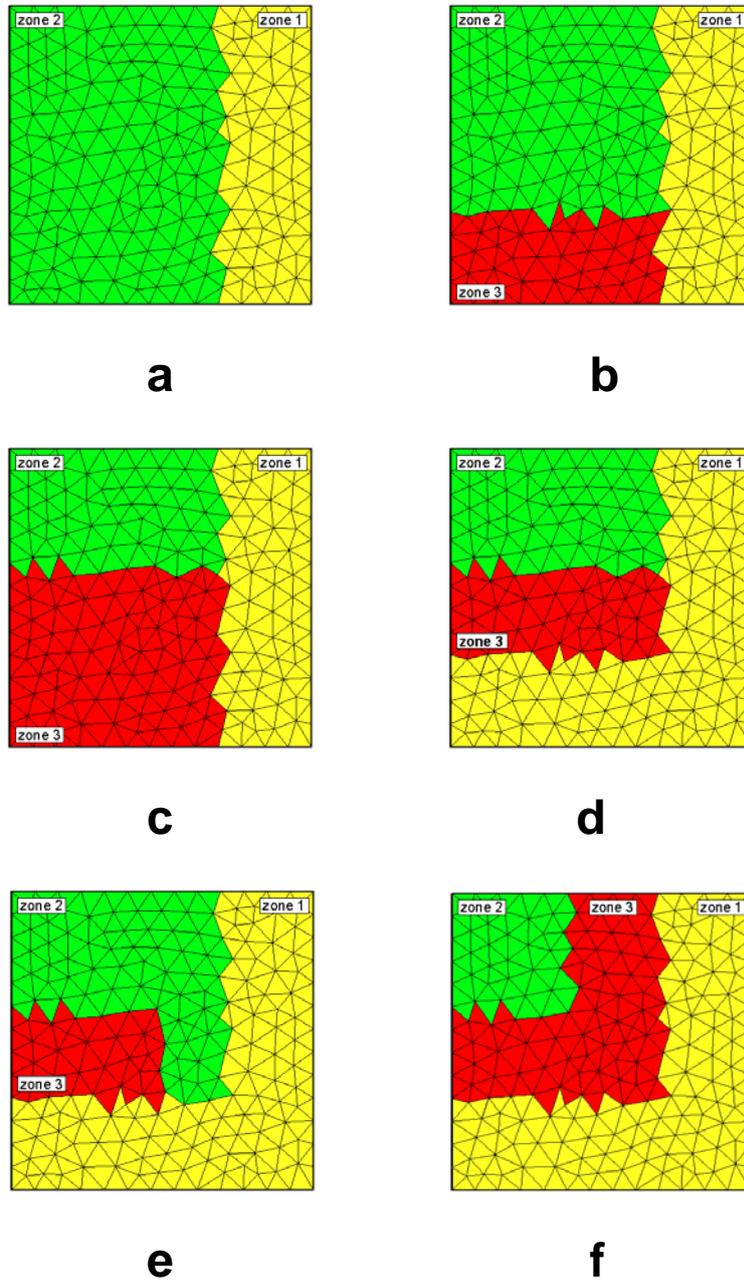
**Fig. 6.** Refinement indicator values: (a) for the first iteration, (b) for the second iteration, (c) for the third iteration, (d) for the fourth iteration, (e) for the fifth iteration and (f) for the sixth iteration.



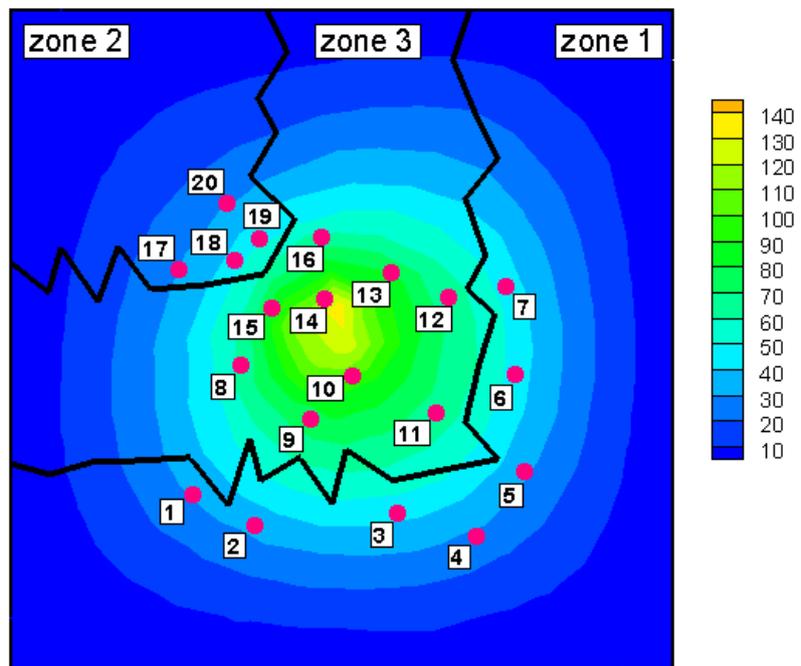
**Fig. 7.** The optimal refinement process required to recover the three-zone parameterization of **Fig. 4**. (a) Initial parameterization and locations of refinement indicators selected for the first iteration. (b), (c) (d), (e) and (f) represent cuts retained at the first, second, third, fourth and fifth iteration, respectively, and locations of refinement indicators selected for the second, third, fourth, fifth and sixth iteration.



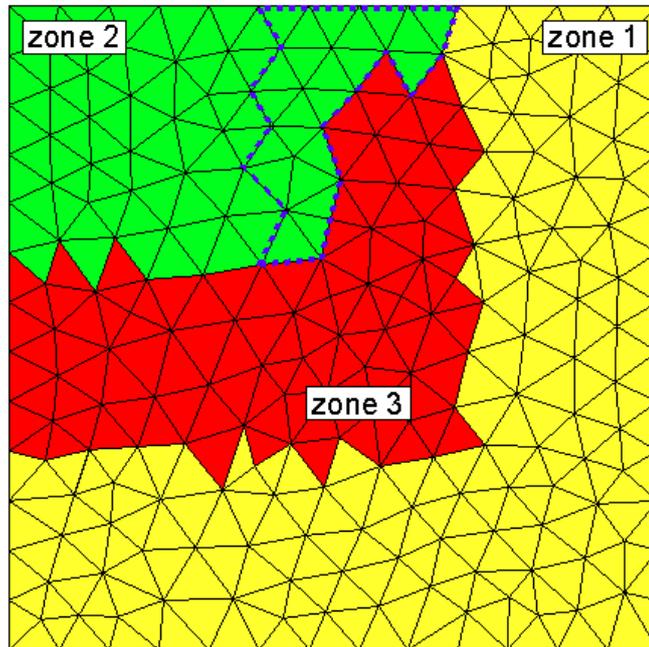
**Fig. 8.** Schematic representing the exact three-zone parameterization and the space-distribution of 50 measurement points.



**Fig. 9.** Cuts retained at: (a) the first iteration, (b) the second iteration, (c) the third iteration, (d) the fourth iteration, (e) the fifth iteration and (f) the sixth iteration, respectively, for the case of figure Fig. 8 with noisy data.



**Fig. 10.** Hydraulic head profile in the fractures and distribution of 20 measurement points at locations of high head values.



**Fig. 11.** The optimal parameterization corresponding to the case of lack of data in zone 2.

	Parameters	zone 1	zone 2	zone 3	$J(\mathbf{p})$
Exact solution	$K_f$	$1.0 \times 10^{-5}$	$8.0 \times 10^{-5}$	$4.0 \times 10^{-5}$	0.0
	$S_f$	$1.0 \times 10^{-6}$	$7.0 \times 10^{-6}$	$3.5 \times 10^{-6}$	
	$\alpha$	$5.0 \times 10^{-10}$	$1.0 \times 10^{-10}$	$3.0 \times 10^{-10}$	
Initial solution	$K_f$	$1.0 \times 10^{-6}$	$1.0 \times 10^{-6}$	$1.0 \times 10^{-6}$	$8.24 \times 10^8$
	$S_f$	$1.0 \times 10^{-5}$	$1.0 \times 10^{-5}$	$1.0 \times 10^{-5}$	
	$\alpha$	$1.0 \times 10^{-11}$	$1.0 \times 10^{-11}$	$1.0 \times 10^{-11}$	
Optimal solution	$K_f$	$0.999 \times 10^{-5}$	$8.0 \times 10^{-5}$	$4.0 \times 10^{-5}$	$3.07 \times 10^{-20}$
	$S_f$	$1.0 \times 10^{-6}$	$7.0 \times 10^{-6}$	$3.499 \times 10^{-6}$	
	$\alpha$	$4.999 \times 10^{-10}$	$0.999 \times 10^{-10}$	$3.0 \times 10^{-10}$	

**Table 1.** Results of the inverse problem with known parameterization.

<b>First iteration</b>			
Parameter	zone 1	zone 2	zone 3
$K_f$	$4.274 \times 10^{-6}$		$3.912 \times 10^{-5}$
$S_f$	$9.168 \times 10^{-7}$		$3.284 \times 10^{-6}$
$\alpha$	$5.655 \times 10^{-10}$		$2.665 \times 10^{-10}$
$J(\mathbf{p})$		$25.62 \times 10^4$	
<b>Second iteration</b>			
Parameter	zone 1	zone 2	zone 3
$K_f$	$1.086 \times 10^{-5}$	$4.563 \times 10^{-5}$	$1.091 \times 10^{-5}$
$S_f$	$4.362 \times 10^{-7}$	$4.080 \times 10^{-6}$	$3.736 \times 10^{-7}$
$\alpha$	$5.024 \times 10^{-10}$	$3.353 \times 10^{-10}$	$5.069 \times 10^{-10}$
$J(\mathbf{p})$		$3.85 \times 10^4$	
<b>Third iteration</b>			
Parameter	zone 1	zone 2	zone 3
$K_f$	$1.626 \times 10^{-6}$	$6.856 \times 10^{-5}$	$1.208 \times 10^{-5}$
$S_f$	$2.034 \times 10^{-7}$	$7.315 \times 10^{-6}$	$6.779 \times 10^{-7}$
$\alpha$	$3.048 \times 10^{-10}$	$3.238 \times 10^{-10}$	$3.261 \times 10^{-10}$
$J(\mathbf{p})$		$4.04 \times 10^4$	
<b>Fourth iteration</b>			
Parameter	zone 1	zone 2	zone 3
$K_f$	$9.409 \times 10^{-6}$	$7.178 \times 10^{-5}$	$3.635 \times 10^{-5}$
$S_f$	$9.372 \times 10^{-7}$	$6.853 \times 10^{-6}$	$1.018 \times 10^{-6}$
$\alpha$	$4.953 \times 10^{-10}$	$3.548 \times 10^{-10}$	$3.028 \times 10^{-10}$
$J(\mathbf{p})$		$3.68 \times 10^4$	
<b>Fifth iteration</b>			
Parameter	zone 1	zone 2	zone 3
$K_f$	$9.629 \times 10^{-6}$	$6.818 \times 10^{-5}$	$3.896 \times 10^{-5}$
$S_f$	$1.044 \times 10^{-6}$	$7.483 \times 10^{-6}$	$3.221 \times 10^{-6}$
$\alpha$	$4.994 \times 10^{-10}$	$2.141 \times 10^{-10}$	$3.015 \times 10^{-10}$
$J(\mathbf{p})$		$0.51 \times 10^4$	

**Table 2.** Results obtained by the algorithm at the first five iterations.

	Parameter	zone 1	zone 2	zone 3	$J(\mathbf{p})$
Exact solution	$K_f$	$1.0 \times 10^{-5}$	$8.0 \times 10^{-5}$	$4.0 \times 10^{-5}$	0.0
	$S_f$	$1.0 \times 10^{-6}$	$7.0 \times 10^{-6}$	$3.5 \times 10^{-6}$	
	$\alpha$	$5.0 \times 10^{-10}$	$1.0 \times 10^{-10}$	$3.0 \times 10^{-10}$	
Optimal solution	$K_f$	$0.999 \times 10^{-5}$	$8.0 \times 10^{-5}$	$4.0 \times 10^{-5}$	$3.07 \times 10^{-20}$
	$S_f$	$1.0 \times 10^{-6}$	$7.0 \times 10^{-6}$	$3.499 \times 10^{-6}$	
	$\alpha$	$4.999 \times 10^{-10}$	$0.999 \times 10^{-10}$	$3.0 \times 10^{-10}$	

**Table 3.** Comparison between the exact solution and the numerical solution obtained by the algorithm at the sixth iteration (the optimal solution).

	Parameter	zone 1	zone 2	zone 3	$J(\mathbf{p})$
Exact solution	$K_f$	$1.0 \times 10^{-5}$	$8.0 \times 10^{-5}$	$4.0 \times 10^{-5}$	0.0
	$S_f$	$1.0 \times 10^{-6}$	$7.0 \times 10^{-6}$	$3.5 \times 10^{-6}$	
	$\alpha$	$5.0 \times 10^{-10}$	$1.0 \times 10^{-10}$	$3.0 \times 10^{-10}$	
Optimal solution	$K_f$	$0.999 \times 10^{-5}$	$8.0 \times 10^{-5}$	$4.0 \times 10^{-5}$	0.476
	$S_f$	$0.999 \times 10^{-6}$	$6.998 \times 10^{-6}$	$3.5 \times 10^{-6}$	
	$\alpha$	$5.015 \times 10^{-10}$	$0.993 \times 10^{-10}$	$3.004 \times 10^{-10}$	

**Table 4.** Comparison between the exact solution and the numerical solution obtained by the algorithm for the case of noisy data.

	Parameter	zone 1	zone 2	zone 3	$J(\mathbf{p})$
Exact solution	$K_f$	$1.0 \times 10^{-5}$	$8.0 \times 10^{-5}$	$4.0 \times 10^{-5}$	0.0
	$S_f$	$1.0 \times 10^{-6}$	$7.0 \times 10^{-6}$	$3.5 \times 10^{-6}$	
	$\alpha$	$5.0 \times 10^{-10}$	$1.0 \times 10^{-10}$	$3.0 \times 10^{-10}$	
Optimal solution	$K_f$	$0.992 \times 10^{-5}$	$5.984 \times 10^{-5}$	$4.032 \times 10^{-5}$	196.157
	$S_f$	$0.942 \times 10^{-6}$	$4.588 \times 10^{-6}$	$3.555 \times 10^{-6}$	
	$\alpha$	$4.992 \times 10^{-10}$	$3.013 \times 10^{-10}$	$3.013 \times 10^{-10}$	

**Table 5.** Comparison between the exact solution and the numerical solution obtained by the algorithm for the case of lack of data.



## Bibliographies

1. Ackerer Ph., Mosé R. and Semra K. (1990): Natural tracer test simulation by stochastic particle tracking method, Transport and mass exchange process in sand and gravel aquifers, *Ottawa, G. Moltyaner*, 595-604.
2. Audouin, O., (2007): Intégration - inversion de données géologiques et mesures hydrodynamiques in-situ pour le conditionnement d'un modèle 3D d'aquifère calcaire : Site Expérimental Hydrogéologique (SEH) de Poitiers, France, *Thèse de Doctorat de l'Université de Poitiers*.
3. Audouin, O., Bodin, J., (2007): Analysis of slug-tests with high-frequency oscillations, *J. Hydrol.*, 334, 282– 289.
4. Audouin, O., Bodin, J., (2008): Cross-borehole slug test analysis in a fractured limestone aquifer, *J. Hydrol.*, 348, 510-523.
5. Audouin, O., Bodin, J., Porel, G., Bourbiaux, B., (2008): Flowpath structure in a limestone aquifer : multi-borehole logging investigations at the hydrogeological experimental site of Poitiers, *France, Hydrogeol. J.*, 16 (5), 939-950.
6. Arbogast T., Dawson N., Keenan P., Wheeler M., and Yotov I (1998): Enhanced cell-centered finite differences for elliptic equations on general geometry, *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(2):404-425.
7. Arbogast T., Wheeler M. F. and Yotov I. (1997): Mixed finite elements for elliptic problems with tensor coefficients as finite differences, *SIAM J. Numer. Anal.*, 34(2):828-852.
8. Barenblatt G. I., Zheltov I. P. and Kochina I. N. (1960): Basic concepts in the theory of homogeneous liquids in fissured rocks, *J. Appl. Math.*, 24, 1286-1303
9. Baranger J., Maitre J. F. and Oudin F. (1995): Convection between Finite Volume and Mixed Finite Element Methods. *Equipe d'analyse Numérique Lyon Saint-Etienne*, N: 198.
10. Batten P., Lambert C. and Causen D. (1996): Positively conservative high-resolution convection schemes for unstructured elements, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 39:1821-1838.
11. Bear J. (1979): Hydraulic of groundwater, Mc Grew-Hill Series in *Water Resources and Environmental Engineering*, New-York.
12. Bear J., Verruijt A. (1987): Modeling groundwater flow and pollution (theory and application of transport in porous media), Dordrecht, *Holland: D Reidel Publ Company*.

13. Belfort B. (2006): Modélisation des écoulements en milieux poreux non saturés par la méthode des éléments finis mixtes hybrides. *Thèse à l'université Louis Pasteur*.
14. Belfort B., Lehmann. F. (2005): Comparison of equivalent conductivities for numerical simulation of one-dimensional unsaturated flow. *Vadose Zone Journal* 4, 1191-1200.
15. Ben Ameer, Chavent, Jaffré (2002): Refinement and coarsening indicators for adaptive parameterization: Application to the estimation of hydraulic transmissivities, *Inverse Problems*, 18, 775-794.
16. Berkowitz B., Bear J. and Braester C. (1988): Continuum models for contaminant transport in fractured porous formations, *Water Resour Res*, 24, 1225 – 1236.
17. Bernard, S., (2005): Caractérisation hydrodynamique des réservoirs carbonatés fracturés : application au Site Expérimental Hydrogéologique (SEH) de l'Université de Poitiers, *Thèse de Doctorat de l'Université de Poitiers*.
18. Bernard, S., Delay, F., Porel, G., (2006): A new method of data inversion for the identification of fractal characteristics and homogenization scale from hydraulic pumping tests in fractured rocks, *J. Hydrol.*, 328 (3-4), 647-658.
19. Bernard, S., Delay, F. (2008): Determination of porosity and storage capacity of a calcareous aquifer (France) by correlation and spectral analyses of time series, *Hydrogeol. J.*, in Press.
20. Bourbiaux, B., Callot, J.-P., Doligez, B., Fleury, M., Gaumet, F., Guiton, M., Lenormand, R., Mari, J.-L., Pourpak, H., (2007): Multi-Scale Characterization of an Heterogeneous Aquifer Through the Integration of Geological, Geophysical and Flow Data : a Case Study, *Oil & Gas Science and Technology*, 62 (3), 347-37.
21. Brezzi F., Douglas J. and Marini D. (1985): Two families of mixed finite elements for second order elliptic problems, *Numer. Math.*, 47:217-235.
22. Brezzi F., Douglas J., Fortin J. and Marini D. (1987): Efficient rectangular mixed finite elements for second order elliptic problems in two and three variables, *M2AN*, 51:581-604.
23. Brezzi F. and Fortin M. (1991): Mixed and Hybrid Finite Element Method, *Springer-Verlag, New York*.
24. Broyden C. G. (1970): The convergence of a class of double rank minimization algorithms, part I. *Journal of the Institute of Mathematics and its Applications*, 6 : 76-90.
25. Carrayrou J. , Mosé R. , Behra P. (2004): Operator-splitting procedures for reactive transport and comparison of mass balance errors. *J. Contam. Hydrol*; 68:239–268.

26. Carrera J., Neuman S. P. (1986): Estimation of aquifer parameters under transient and steady-state conditions. 2. Uniqueness, stability, and solution algorithms, *Water Resources Research*, 22(2), 211–227.
27. Celia M. A., Bouloutras E. T. and Zarba R. L. (1990). A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation, *Water Resources Research*, 26 (7), 1483-1496.
28. Cederberg G. A., Street R. L. and Leckie J. O. (1985): A groundwater mass transport and equilibrium model for multicomponent system. *Water Resour. Res.*; 21(2):1095-1104.
29. Chatevaire, L., (2006) : Porosité et perméabilité des roches réservoirs et corrélation avec les observations pétrographiques : application à l'aquifère du Site Expérimental Hydrogéologique (SEH), *Rapport Master 2 Géomatériaux-Eaux, Université de Poitiers.*
30. Chavent G., Cockburn B., Cohen G. and Jaffré J. (1985) : Une méthode d'éléments finis pour la simulation dans un réservoir de déplacements bidimensionnel d'huile par de l'eau, *rapport INRIA*, No 353.
31. Chavent G. and Cockburn B (1989): The local projection  $P_0 \oplus P_1$ –discontinuous Galerkin finite element method for scalar conservation laws, *M2AN*, 23:565: 592.
32. Chavent G., Bissel R. (1998): Indicator for the refinement of parameterization, *Proceedings of the international Symposium on Inverse Problems in Engineering, Nagano, Japan*, 185-190
33. Chavent G. (1991): On the theory and practice of non-linear least-squares. *Adv. Water Res.*, 14(2) : 55-63.
34. Chavent G. and Jaffré J. (1986): Mathematical Models and Finite Elements for Reservoir Simulation, *Elsevier Science Publishers B.V, Netherlands.*
35. Chavent G. and Roberts J. E. (1991): A unified physical presentation of mixed, mixed-hybrid finite element method and standard finite difference approximations for the determination of velocities in water flow problems, *Adv. Water Resour.*, 14(6):329-348.
36. Chounet L. M., Hilhorst D.; Jouron C.; Kelanemer Y.; Nicolas P. (1999): imulation of water flow and heat transfer in soils by means of a mixed finite element method, *Advances in Water Resources*, 22, 445-460.
37. Chow S., Anderssen R. (1991): Determination of the transmissivity zonation using a linear functional strategy, *inverse problems*, 7, 841 – 851.
38. Coast K.H. and Smith B.D. (1964): Dead end pore volume and dispersion in porous media, *Soc, Petrol. Eng. J.* ,4 , 73 – 84.

39. Cooley R. L. (1977): A method of estimating parameters and assessing reliability for models of steady state groundwater flow, 1, Theory and numerical properties. *Water Resources Research*, 13(2) : 318-324.
40. Cooley R. L. (1982): Incorporation of prior information on parameters into nonlinear regression groundwater flow models, 1, Theory. *Water Resources Research*, 18(4) : 965-976.
41. Cooley R. L. (1983): Incorporation of prior information on parameters into nonlinear regression groundwater flow models, 2, Applications. *Water Resources Research*, 19(3) : 662-676.
42. Cooley R. L. (1985): A comparison of several methods of solving nonlinear regression groundwater flow problems. *Water Resources Research*, 21(10) : 1525-1538.
43. Dawson C., van Duijn C.J., and Wheeler M.F (1994): Characteristic-Galerkin Methods for Contaminant Transport with Non-Equilibrium Adsorption Kinetics, *SIAM J. Numer. Anal.*, 982-999.
44. Dawson C. N., Wheeler M. F., Kinton W. (1998); Time splitting for advection dominated parabolic problem in one space variable. *Communication in Applied Numerical Methods*, 413-423.
45. Davis T. A., Duff I. S. (1999): A combined Unifrontal/Multifrontal method for unsymmetric sparse matrices. *Technical Report, TR-97-016, Computer and Information Science and Engineering Department, University of Florida.*
46. de Dreuzy, J.-R., Bodin, J., Le Grand, H., Davy, P., Boulanger, D., Battais, A., Bour, O., Gouze, P., Porel, G., (2006): General Database for Ground Water Site Information, *Ground Water*, 44 (5), 743-748.
47. Delay, F., Porel, G., Bernard, S., (2004): Analytical 2D model to invert hydraulic pumping tests in fractured rocks with fractal behavior, *Geophys. Res. Letters*, 31, L16501, 10.1029/2004GL020500.
48. Delay, F., Kaczmeryk, A., Ackerer, P., (2007): Inversion of interference hydraulic pumping tests in both homogeneous and fractal dual media, *Adv. Water Resour.*, 30 (3), 314-334.
49. Delay F., Porel G. (2003) : Inverse modeling in the time domain for solving diffusion in heterogeneous rock matrix. *Geophys. Res. Lett*; 30(3):1147.
50. Delay F, Kaczmeryk A, Ackerer P (2007): Inversion of interference hydraulic pumping tests in both homogeneous and fractal dual media. *Advances in Water Resources* 30 :14–334.
51. De Marsily G. (1981). *Hydrogéologie Quantitative, Masson, Paris.*

52. De Marsilly G., Delhomme P., Delhay F., Buoro A. (1996) : regards sur 40 ans de problèmes inverses en hydrogéologie. *Comptes rendus de l'académie des sciences. Série II – Fascicule A. sciences de la terre et des Planètes*, 329(2), 73 – 87.
53. Dirichlet G. L.(1850): Uber die reduction der positiven quadratischen formen mit drei unbestimmten ganzen Zahlen. *Journal of fur die Reine und Angewandte Mathematik*, 40 : 209-234.
54. DiStifano N. and Rath A. (1975): An identification approach to subsurface hydrological systems . *Water Resources Research*, 11(6) : 1005-1012
55. Douglas Jr., Arbogast T., Paes Leme P.J., Hensley J.L. and Nunes N.P. (1993): Immiscible displacement in vertically fractured reservoirs, *Transport in Porous Media*, 12, 73 – 106.
56. Douglas J. and Roberts J. E. (1985). Global estimates for mixed methods for second order elliptic equations, *Math. Comp.*, 44:39-52.
57. Duguid J., Lee P. (1977): Flow in fractured media, *Water Resour Res*, 13(3), 558-566.
58. Durlofsky L. (1994): Accuracy of mixed and control volume finite element approximations to Darcy velocity and related quantities. *Water Resour. Res.*, 30(4):965.
59. Emsellem Y., De Marsily G. (1971): An automatic solution for the inverse problem, *Water Resour. Res.*, 7(5), 1264-1283.
60. Eppstein M. J., Dougherty D. E. ( 1996): Simultaneous estimation of transmissivity values and zonation, *Water Resour.*, 32, 3321 – 3336.
61. Ewing R. E. (1988): Finite element techniques for convective-diffusive transport in porous media. *In proceeding of the VII International Conference, Computational method in water resources, vol2. Numerical methods for transport and hydrologic processes, edited by Celia M.A. et al., pp.27-34, Computational Mechanics Publication, Southampton, United Kingdom.*
62. Farthing M. W., Kees C. E. and Miller. C. T. (2003): Mixed finite element methods and higher order temporal approximations for variably saturated groundwater flow, *Advances in Water Resources*, 26, 373-394.
63. Fletcher R. A (1970): New approach to variable metric algorithms. *The Computer Journal*, 13 : 317-322.
64. Gerke H., van Genuchten H., Evaluation M. (1993 a): Of a first – order water transfer term for variably – saturated dual – porosity models. *Water Resour. Res.*, 29, 1225 – 1238, (1993).

65. Gerke H. and van Genuchten M (1993 b): A Dual-Porosity Model for Simulating the Preferential Movement of Water and Solutes in Structured Porous Media, *Water resources research*, vol. 29 (2), 305-319.
66. Goldfarb D. A (1970): family of variable-metric method derived by variational means. *Mathematics of Computation*, 24:23-26.
67. Hadamard J. (1952): , Lectures on Cauchy's problem in linear partial differential equations, *New York, Dover Publication*, 316.
68. Hayek M., F. Lehmann, and P. Ackerer. (2008): Adaptive multi-scale parameterization for one-dimensional flow in unsaturated porous media. *Adv. Water Resour.*, 31:28-43.
69. Hayek M., and P. Ackerer. (2007): An adaptive subdivision algorithm for the identification of the diffusion coefficient in two-dimensional elliptic problems. *J. Math. Model. Algor.*, 6:529-545.
70. Herzer J. and Kinzelbach W. (1989): Coupling of transport and chemical processes in numerical transport models. *Geoderma*; 44:115-127.
71. Hoeksema, R. J., Kitanidis P. K. (1984): An application of the geostatistical approach to the inverse problem in two-dimensional groundwater modeling., *Water Resour. Res.*, 20(7), 1003-1020.
72. Hornung U., Showalter R.E. (1990): Diffusion models for fractured media, *J. Math. Anal. Appl.*, 147, 69 – 80.
73. Horst H. and van Genuchten M. (1996): Macroscopic representation of structural geometry for simulating water and solute movement in dual-porosity media, *Advances in water resources*, 19 ( 6), 343-357.
74. Jacquard P. and Jain C. (1965): Permeability distribution from field pressure data. *Soc. Pet. Eng. J.*, 5(4) : 281-294.
75. Ju S. H. and Kung K. J. S. (1997). Mass types, element orders and solution schemes for the Richards equation, *Computers and Geosciences*, 23 (2), 175–87.
76. Kaczmaryk A, Delay F (2007-a): Interference pumping tests in a fractured limestone (Poitiers – France): Inversion of data by means of dual-medium approaches. *Journal of Hydrology*, 337, 133– 146.
77. Kaczmaryk A, Delay F (2007-b): Improving dual-porosity-medium approaches to account for karstic flow in a fractured limestone: Application to the automatic inversion of hydraulic interference tests (Hydrogeological Experimental Site, HES – Poitiers – France). *Journal of Hydrology*, 347, 391– 403.
78. Kaczmaryk A (2008) : approches multi-continuum de la dualite homogenisation - inversion des proprietes hydrodynamiques en milieu poreux fracture. *Thèse de doctorat, université de Poitiers*.

79. Karthikeyan M., Tan T. S. and Phoon K. K. (2001): Numerical oscillation in seepage analysis of unsaturated soils, *Canadian Geotechnical Journal.*, 38, 639–651.
80. Kitanidis P.K., Vomvoris E.G. (1983): A geostatistical approach to the inverse problem in groundwater modeling (steady state) and one-dimensional simulations, *Water Resour. Res.* 19(3), 677–690.
81. Konikow L. and Bredehoft J. (1978): Computer model of two dimensional solute transport and dispersion in groundwater. *US Government Printing Office, Washington, D.C.*
82. La Venue A.M. (1998): A new pilot point inverse method in hydrogeology: generating an ensemble of conditionally – simulated transmissivity fields. *Thèse de doctorat de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.*
83. Levenberg K. A (1944): method for the solution of certain nonlinear problems in leastsquares. *Quart. Appl. Math.*, 2:164-168.
84. Long J., Renner J., Wilson C. and Witherspoon P. (1982): Porous media equivalents for networks of discontinuous fractures, *Water Resour Res*, 18(3), 645 – 658.
85. Mari, J.-L. and Porel, G., (2008): 3D Seismic Imaging of a Near-Surface Heterogeneous Aquifer : A Case Study, *Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP*, 63 (2), 179-201.
86. Marini D. (1985). An inexpensive method for the evaluation of the solution of the lowest order Raviart-Thomas mixed method, *SIAM J. Numer. Anal.*, 22: 493-496.
87. Marle C. (1971) : Ecoulements monophasiques en milieu poreux, *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, 22, 10, PP 1471-1509.
88. Marquardt D. W. (1963): An algorithm for least squares estimation of non linear parameters. *J. SIAM*, 11:431-441.
89. McLaughlin D. and L.R. Townley L. R. (1996): A reassessment of the groundwater inverse problem, *Water Resour. Res.*, 32(5), 1131–1161.
90. Meissner U. (1973): A mixed finite element model for use in potential flow problem. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 6: 467-473.
91. Milly P.C.D. (1985): A mass-conservative procedure for time-stepping in models of unsaturated flow, *Advances in Water Resources*, 8, 32-36.
92. Mosé R. (1990): Application de la méthode des éléments finis mixtes hybrides et de la "marche par hasard" pour la modélisation de l'écoulement et du transport de masse en milieu poreux, *Thèse de Doctorat de l'Université Louis Pasteur, Strasbourg.*

93. Mose R., Siegel P., Ackerer Ph. and Chavent G. (1994): Application of the mixed hybrid finite element approximation in a ground water flow model: Luxury or necessity? *Water Resour. Res.*, 30-11.
94. Nedelec J. (1986): Mixed finite elements in  $R^3$ . *Numer. Math.*, 50:57-82.
95. Nedelec J. (1980): A new family for mixed finite elements in  $R^3$ . *Numer. Math.*, 35:315-341.
96. Nelson, R. W.(1960): In-place measurement of permeability in heterogeneous media, 1.Theory of a proposed method, *Jour. of Geophysical Res*, 65(6), 1753-1760.
97. Nelson, R. W. (1961): In-place measurement of permeability in heterogeneous media 2. Experimental and computational considerations, *Jour. of Geophysical Res.*, 66, 2469-2478.
98. Nelson, R. W. (1968): In-place determination of permeability distribution of heterogeneous porous media through analysis of energy dissipation, *Soc. Pet. Eng. Jour.*, 33-42.
99. Neuman S. P. (1972): Finite element computer programs for flow in saturated-unsaturated porous media, second annual report, Rep. A10-SWC-77, *Hydraul. Eng. Lab., Technion, Haifa, Israël*.
100. Neuman S. P. (1973): Calibration of distributed parameter groundwater flow models viewed as a multiple – objective decision process under uncertainty, *Water Resources Research*, 9(4), 1006 – 1021.
101. Pan L., Warrick A. W. and Wierenga P. J. (1996): Finite element methods for modeling water flow in variably saturated porous media: Numerical oscillation and mass-distributed schemes, *Water Resources Research*, 32 (6), 1883-1889.
102. Peszynska M. (1992): Fluid flow through fissured media, Mathematical analysis and numerical approach, *Ph.D. Thesis. University of Augsburg*.
103. Pruess K. and Narashiman T (1985). A practical method for modeling fluid and heat flow in fractured media, *Soc Petrol Eng. J.*, 25, 14 – 26.
104. Raviart P.A. and Thomas J.M. (1977): A mixed hybrid finite element method for the second order elliptic problem, *Lectures Notes in Mathematics 606. Springer-Verlag, New York*, 292-315.
105. Roberts J. and Thomas J.M. (1989): Mixed and Hybrid methods, Handbook of numerical analysis II, Finite element methods 1, *P. Ciarlet and J. Lions, Amsterdam*.
106. Rubin, Y., Dagan G. (1987a): Stochastic identification of transmissivity and effective recharge in steady groundwater flow: 1. Theory., *Water Resour. Res.* 23(7), 1185-1192.

107. Russell T. and Wheeler M. (1983): Finite element and finite difference methods for continuous flows in porous media. *SIAM, R. Ewing, the Mathematics of Reservoir Simulation*, 35-106.
108. Saaltink M. W., Careera J., Ayora C. (2001): On the behavior of approaches to simulate reactive transport. *J Contam Hydrol.*; 48:213–235.
109. Samardzioska T. and Popov V. (2005): Numerical comparison of the equivalent continuum, non-homogeneous dual porosity models for flow and transport in fractured porous media, *Advances in water resources*, 28, 235 – 255.
110. Shanno D. F. (1970): Conditioning of quasi-Newton methods for function minimization. *Mathematics of Computation*, 24:647-656.
111. Siegel P. (1995): Transfert de masse en milieux poreux fortement hétérogènes : modélisation et estimation de paramètres par éléments finis mixtes hybrides et discontinus, *Thèse Univ. Louis Pasteur Strasbourg, I.M.F., URA CNRS 854*.
112. Sitharam T., Sridevi J. and Shimizu N. (2001): Practical equivalent continuum characterization of jointed rock masses, *Int. J. Rock Mech Min Sci*, 38(3), 437 – 448.
113. Sun N. Z. (1994): Inverse problems in Groundwater Modeling , *Kluwer Academic Publishers, Dordrecht*, 337 p., 1994.
114. Sun N. Z., Yang S.-L. and Yeh W. W.-G. (1998) : A proposed stepwise regression method for model structure identification. *Water Resources Research*, 34(10):2561-2572.
115. Thomas J. (1977): Sur l'Analyse Numérique des Méthodes d'Elément Finis Hybrides et Mixtes. *Thèse de Doctorat d'Etat, Université de Pierre et Marie Curie*.
116. Thomas L. K., Jullums L. J. and Reheis G. M. (1972): A nonlinear automatic history matching technique for reservoir simulation models. *Soc. Pet. Eng. j.*, 12(6):508-514.
117. Tsai F. T.-C., Sun N. Z. and Yeh W. W.-G. (2003 a): A combinatorial optimization scheme for parameter structure identification in groundwater modeling. *Ground Water*, 41(2):156-169,
118. Tsai F. T.-C., Sun N. Z. and Yeh W. W.-G. (2003 b) Global-local optimization for parameter structure identification in three-dimensional groundwater modeling. *Water Resources Research*, 39(2):art. no.1043
119. Valocchi A. J., Malmstead M. (1992): Accuracy of operator splitting for advection-dispersion reaction problems. *Water Resour. Res.*; 28(5):1471-1476.
120. Voronoi G. (1908) : Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratiques, deuxième mémoire, recherche sur les parallélogrammes primitifs. *Journal of fur die Reine und Angewandte Mathematik*, 134 : 198-287.

121. Walter E. and Pronzato L. (1994) : Identification de modèles paramétriques à partir de données expérimentales. *Ed. Masson*, 371 p..
122. Warren, J.E. and Root, P.J. (1963): The behavior of naturally fractured reservoirs, *Soc. Petrol. Eng. J.*, 245 – 255.
123. Wilson C. and Witherspoon P. (1970): An investigation of laminar flow in fractured porous rocks, *Soil Mech. Bitum. Mater. Lab., Dep. Of Civil Eng., Univ. Of Calif., Berkeley, Report 70-6*.
124. Yeh G.T. and Tripathi V.S. (1989): A critical evaluation for recent developments in hydro geochemical transport models of reactive multichemical components. *Water Resour. Res.*; 25(1):93-108.
125. Yeh G. T. and Tripathi V. S. (1990): HYDROGEOCHEM: A coupled model of hydrological transport and geochemical equilibrium of multi-component system. *Oak Ridge Nat. Lab., Oak Ridge, TN. Rep.; ORNL-6731:312*.
126. Yeh, W. (1986): Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology : the inverse problem. *Water Resources Research*, 22(1) :95-108.
127. Yeh W.W.G., Yoon Y.S. (1981): Aquifer parameter identification with optimum dimension in parameterization, *Water Resources Research*, 17 (3), 664–672.
128. Yoon Y. S. and Yeh W. W.G. (1976):Parameter identification in an inhomogeneous medium with the finite element method. *Soc. Pet. Eng. J.*, 16(4):217-226.
129. Younes A., Mose R., Ackerer Ph. and Chavent G. (1999): A New Formulation of the Mixed Finite Element Method for Solving Elliptic and Parabolic PDE with Triangular Elements, *Journal of Comp. Phys.*, 149:148-167.
130. Younes, A., Ackerer, P., Lehmann, F., (2006): A new mass lumping scheme for the mixed hybrid finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 67, 89–107.
131. Zheng C. and Wang P. (1996): Parameter structure identification using tabu search and simulated annealing. *Adv. Water Res.*, 19(4):215-224.
132. Zimmerman D.A., G. DE Marsily, C.A. Gotway, M.G. Marietta, C.L. Axness, R.L. Beauheim, R.L. Bras, J. Carrera, G. Dagan, P.B. Davies, D.P. Gallegos, A. Galli, J. Gómez-Hernández, P. Grindrod, A.L. Gutjahr, P.K. Kitanidis, A.M. Lavenue, D. McLaughlin, S.P. Neuman, B.S. Ramarao, C. Ravenne & Y. Rubin. (1998): Comparison of seven geostatistically based inverse approaches to estimate transmissivities for modeling advective transport by groundwater flow. *Water Resources Research*, 34(6), 1373-1413.



# Liste des figures

## Chapitre 1

Figure 1.1: Milieu poreux fracturé dans la nature	14
Figure 1.2: Milieu fracturé 3D / 2D	15
Figure 1.3: Modèle NH	16
Figure 1.4: Modèle EC	17
Figure 1.5: Modèle DP	18
Figure 1.6: Modèle double porosité complète	19
Figure 1.7: Ecoulement d'un fluide dans un milieu fracturé	20

## Chapitre 2

Figure 2.1 : Les fonctions tests sur un élément E.	27
Figure 2.2 : Continuité deux flux sur chaque facette	32
Figure 2.3 : Algorithme du code EDM.	40
Figure 2.4: Domaine géométrique et conditions aux limites pour le premier cas test.	41
Figure 2.5 : Maillage utilisé pour les simulations	42
Figure 2.6 : La distribution spatiale de la charge hydraulique et le champ de vitesse obtenus par le code EDM.	42
Figure 2.7 : Variations de la pression en fonction du temps sur M1, M2 et M3.	43
Figure 2.8 : La variation de la pression en fonction du temps sur M1, M2 et M3 avec le code EDM et la méthode des EFMH.	43
Figure 2.9: La variation de la pression en fonction du temps sur M1, M2 et M3 avec le code EDM et la méthode des EFMH pour le 2ème cas test	44
Figure 2.10 : Répartition géométrique des zones pour le 3ème cas test.	45
Figure 2.11 : La variation de la pression en fonction du temps sur M1, M2 et M3 avec le code EDM et la méthode des EFMH pour le 3ème cas test.	45
Figure 2.12: La variation de la pression en fonction du temps sur M1, M2 et M3 avec le code EDM et l'approche OD pour le 1er cas test.	48
Figure 2.13: La variation de la pression en fonction du temps sur M1, M2 et M3 avec le code EDM et l'approche OD pour le 2ème cas test.	48
Figure 2.14: La variation de la pression en fonction du temps sur M1, M2 et M3 avec le code EDM et l'approche OD pour le 3ème cas test.	48

### Chapitre 3

Figure 3.1 : Approche générale	53
Figure 3.2 : Minimum local et minimum global pour une fonction à un paramètre	57
Figure 3.3: Fonction moindre carrée	57
Figure 3.4: Demi – espace des directions de descente	59
Figure 3.5: Algorithme des méthodes à directions de descente	60
Figure 3.6 : Algorithme du code INV_EDM.	85
Figure 3.7 : Carte de convergence (K, S)	87
Figure 3.8 : Carte de convergence (K, $\sigma$ )	87
Figure 3.9 : Carte de convergence (K,S)	88
Figure 3.10 : Carte de convergence (K, S, $\sigma$ )	88

### Chapitre 4

Figure 4.1 : Procédure multi - échelle	93
Figure 4.2 : Domaine divisé en plusieurs zones (technique Zonation)	94
Figure 4.3 : Paramétrisation (1 zone)	95
Figure 4.4: Paramétrisation (2 zone)	95
Figure 4.5 : Maillage couvrant le domaine	105
Figure 4.6 : Maillage des indicateurs	105
Figure 4.7 : Indicateur horizontale divise le domaine en deux sous parties	105
Figure 4.8 : Localisation du SEH	108
Figure 4.9 : Coupe géologique simplifiée	109
Figure 4.10 : Disposition des forages du SEH	109
Figure 4.11: Maillage triangulaire irrégulier par (8650 mailles)	111
Figure 4.12: Variations de la pression avec les deux maillages	112
Figure 4.13 : Variations de la pression (pas de temps constante et variable)	113
Figure 4.14 : Fonction objectif (domaine homogène)	114
Figure 4.15 : Maillage des indicateurs	114
Figure 4.16 : Valeurs des indicateurs à la première itération	115
Figure 4.17 : Paramétrisation deux zones (deuxième itération)	116
Figure 4.18 : Valeurs des indicateurs à la deuxième itération (2 zones)	116
Figure 4.19 : Paramétrisation deux zones (troisième itération)	117

Figure 4.20 : Valeurs des indicateurs à la troisième itération (2 zones)	117
Figure 4.21 : Paramétrisation deux zones (quatrième itération)	118
Figure 4.22 : Valeurs des indicateurs à la quatrième itération (2 zones)	118
Figure 4.23 : Paramétrisation deux zones (cinquième itération)	119
Figure 4.24 : Comparaison entre les pressions calculées et mesurées	120
Figure 4.25 : Valeurs des indicateurs (domaine homogène)	121
Figure 4.26 : Paramétrisation deux zones	121
Figure 4.27 : Valeurs des indicateurs à la deuxième itération (2 zones)	122
Figure 4.28 : Paramétrisation trois zones (troisième itération)	122
Figure 4.29 : Valeurs des indicateurs à la troisième itération (3 zones)	123
Figure 4.30 : Répartition finale des zones	124
Figure 4.31 : Comparaison entre les pressions calculées et mesurées	124
Figure 4.32: Les itérations pour la deuxième simulation	126
Figure 4.33 : Les pressions mesurées et calculées	127
Figure 4.34 : Les résultats obtenus par Delay et al.2007 dans les cas du modèle DP homogène.	129
Figure 4.35 : Les résultats obtenus par Delay et al.2007 dans les cas du modèle fractal.	129
Figure 4.36: Répartition des zones de conductivité en haut : Puits M6 (données 2004), en bas : Puits M16 (données 2005)	131
Figure 4.37 : Répartition des zones d'emmagasinement en haut : Puits M6 (données 2004), en bas : Puits M16 (données 2005)	131
Figure 4.38: Pressions calculées et mesurées gauche : Puits M6 (données 2004), droite : Puits M16 (données 2005)	132
Figure 4.39 : Répartition des zones obtenue par EDM_PARAM (essai M6)	133
Figure 4.40 : Répartition des zones obtenue par EDM_PARAM (essai M16)	133

# Liste des tableaux

## Chapitre 2

Tableau 2.1 : Les paramètres hydrodynamiques pour le 3ème cas test. 44

Tableau 2.2 : Les temps de calcul (en second) obtenus par les solveurs UMFPACK et PGCET.

49

## Chapitre 4

Tableau 4.1 : Résultats obtenues dans les trois itérations 123

Tableau 4.1 : Les paramètres hydrodynamiques pour la dernière itération. 127

