

HETEROGENEITES DES MILIEUX POREUX ET INSTABILITE SPECTRALE DE LA MATRICE DE L'ECOULEMENT

Reçu le 16/06/2002 – Accepté le 20/12/2003

Résumé

Des difficultés numériques, induites par l'instabilité spectrale de la matrice de l'écoulement en milieu poreux, sont envisagées dans le contexte du modèle géostatistique des hétérogénéités. Différents affichages de perméabilités mettent en exergue le rôle clé du conditionnement. Sa détermination *a priori* est, en théorie, impérative pour que la vérification du modèle à un résidu près soit un critère d'appréciation de la solution produite. L'étude numérique sur des exemples synthétiques établit la détérioration du conditionnement avec l'accroissement du désordre du milieu poreux et la dépréciation conséquente des méthodes de résolution.

Mots clés: Conditionnement, rayon spectral, modèles numériques, hydrogéologie.

Abstract

Indeed the size of the flow matrix and the values of condition number are two competing and restricting factors to solve the discretized groundwater flow equation. Via numerical simulations, we inspect the extrema of the spectrum of the flow matrix in the case of a two dimensional autocorrelated fields of hydraulic conductivity. These are considered as realizations of a random field. The extrema of the eigenvalues appear to be more sensitive to heterogeneity expressed by the standard deviation than to correlation length. Whereas the first one has a monotone effect, the second one is influenced by the mesh size. Values of condition number obtained with Monte Carlo experiments anticipate situations where spectral instability will induce numerical difficulties.

Keywords: Condition number, spectral radius, groundwater modelling, hydrogeology.

A. BENALI

Laboratoire Eau et Environnement
Université d'Oran
BP 16 Es Sénia, Algérie

ملخص

إن الصعوبات الرقمية متعلقة بتدبير طيف مرسوفة السيلان في مكان النفود والتمثلة في النموذج جيولوجيا الإحصائية وعدم التجانس. إن مختلف النماذج النفودية تظهر بعمق العمل الأساسي للشروط والبرهان الأولي واجب لتفحص النموذج الراسب القريب من تحديد صفة المحلول الناتج. إن الدراسة الرقمية على هذه الأمثلة المركبة تؤدي إلى تفكيك الشروط مع زيادة فوضه مكان النفود وعدم تحديد نتائج طرق الحل.

الكلمات المفتاحية: النموذج جيولوجيا الإحصائية، الشروط والبرهان الأولي، الدراسة الرقمية.

Aussi bien les méthodes de résolution directe des équations de l'écoulement que les méthodes indirectes imposent de traiter des problèmes bien conditionnés. Selon le cas, cette notion de conditionnement se rapporte soit directement à la matrice de l'écoulement, soit au test d'arrêt du problème traité. Un résultat dû à Wilkinson [1] assure la stabilité spectrale du problème aux valeurs propres dans le cas où la matrice considérée et sa matrice de perturbation sont hermitiennes. Son extension lève cette restriction sur la matrice de perturbation [1]. Deux autres résultats, l'un dû à Perron [2] et l'autre à Frobénius [2] rendent compte de l'évolution du rayon spectral pour une classe particulière de matrices. Plus récemment, des bornes supérieures au conditionnement de matrices normales [3] et non-normales [4] ont pu être établies.

Les matrices que nous nous proposons d'étudier ne sont pas extraites *ex nihilo*. Elles ont une structure précise qui reflète un opérateur, expression mathématique du modèle de la diffusivité. Les variations de leurs propriétés spectrales ne peuvent être établies à partir des résultats précédents. Leurs évolutions sont donc cernées par le biais du calcul numérique quand tout ou partie des éléments de la matrice sont perturbés.

Quel que soit le point abordé, on a à résoudre un grand système dont la solution exacte ne peut être déterminée. Elle est entachée d'erreurs liées aux incertitudes sur les paramètres, sur les termes sources et sur les conditions aux limites. L'erreur liée à la représentation finie des nombres ainsi que celle qui résulte de l'arithmétique finie de l'ordinateur est délibérément omise [5, 6].

Dans ces conditions, aussi bien les coefficients qui composent la matrice de l'écoulement que ceux qui composent le second membre de l'équation matricielle ne sont connus. Ce ne sont au mieux que des approximations. Et il se peut alors, que la solution exacte \mathbf{h} du système $\mathbf{K}\mathbf{h} = \mathbf{Q}$ soit très éloignée de celle, \mathbf{h}_p , du système perturbé :

$$(\mathbf{K} + \Delta\mathbf{K})\mathbf{h}_p = (\mathbf{Q} + \Delta\mathbf{Q}) \quad (1)$$

Cela dépend du conditionnement de la matrice \mathbf{K} dont la perturbation est notée $\Delta\mathbf{K}$ alors que celle relative à \mathbf{Q} est $\Delta\mathbf{Q}$.

Dans ce qui suit, nous donnons quelques résultats théoriques relatifs aux milieux uniformes puis les éléments qui nous ont servi à mettre en œuvre l'étude numérique des milieux non homogènes.

QUELQUES RESULTATS THEORIQUES

Les incertitudes sur les matrices \mathbf{K} et \mathbf{Q} sont assimilées aux perturbations $\Delta\mathbf{K}$ et $\Delta\mathbf{Q}$. Nous faisons l'hypothèse selon laquelle le modèle représenté par l'équation (1) rend compte de l'influence des hétérogénéités. Leur caractérisation stochastique par un modèle géostatistique permettra alors d'en évaluer les moments d'ordre 1 et 2 [7].

Reste à estimer ou à majorer la différence $(\mathbf{h}_p - \mathbf{h})$ en fonction de $\Delta\mathbf{K}$ et $\Delta\mathbf{Q}$.

Cette question qui a été, par ailleurs, abordée [8] ne nous interpelle que parce qu'elle nous permet d'explicitier les termes spectraux de l'équation (1).

Conditionnement de la matrice \mathbf{K}

Ce conditionnement de l'écart de la solution du système perturbé de la solution exacte \mathbf{h} permet de ne se préoccuper que des bornes de l'erreur relative à travers l'examen des rapports :

$$\eta = \frac{\|\mathbf{R}\|}{\|\mathbf{h}\|} \quad \text{et} \quad \zeta = \frac{\|\mathbf{h} - \mathbf{h}_p\|}{\|\mathbf{h}\|}$$

\mathbf{R} étant le résidu de la résolution du système :

$$\mathbf{K}\mathbf{h}_p - \mathbf{Q} = \mathbf{R} \quad (3)$$

Il est relativement facile de montrer que la norme de l'erreur de résolution se situe dans l'intervalle :

$$\left[\eta / \|\mathbf{K}\|, \eta \|\mathbf{K}^{-1}\| \right] \quad (4)$$

le scalaire η se déterminant à partir de (2) via (3).

Au conditionnement de la matrice \mathbf{K} , défini par :

$$\gamma(\mathbf{K}) = \|\mathbf{K}\| \|\mathbf{K}^{-1}\| \quad (5)$$

peuvent être rapportées les bornes (4) de l'erreur relative ζ :

$$\gamma(\mathbf{K}) = \frac{\max \zeta}{\min \zeta}$$

Les propriétés suivantes de $\gamma(\mathbf{K})$ serviront à son appréciation :

$$\gamma(\alpha\mathbf{K}) = \gamma(\mathbf{K}) \quad \forall \alpha \neq 0$$

$$\gamma(\mathbf{K}) \geq 1$$

$$\gamma(\mathbf{K}) = |\lambda_1| / |\lambda_N| \quad \text{si } \mathbf{K} \text{ est symétrique ; } \lambda_i \text{ désignant les valeurs propres extrémales.}$$

$$\gamma(\mathbf{K}) = 1 \Leftrightarrow \mathbf{K} = \alpha\mathbf{Q}, \quad \mathbf{Q} \text{ désignant une matrice unitaire.}$$

La matrice \mathbf{K} sera d'autant bien conditionnée que $\gamma(\mathbf{K})$ est proche de l'unité. Le meilleur conditionnement s'exprimant sur les matrices unitaires. Pratiquement, on s'accommode de valeurs $\gamma(\mathbf{K}) \leq 30$.

Moyennant le rappel de ces définitions préliminaires, nous pouvons interpréter quelques résultats théoriques connus dans le contexte de l'approche stochastique des écoulements souterrains.

- Sensitivité aux variations de \mathbf{Q}

Ce cas s'identifie à une incertitude sur les termes sources et sur les conditions aux limites de type Dirichlet. On l'appréhende par un résultat déjà établi en analyse numérique des matrices [8] :

$$\frac{\|\Delta\mathbf{h}\|}{\|\mathbf{h}\|} \leq \gamma(\mathbf{K}) \frac{\|\Delta\mathbf{Q}\|}{\|\mathbf{Q}\|} \quad (6)$$

L'expression (6) donne une idée sur la sensibilité du système (3) aux incertitudes sur les conditions aux limites et sur les termes sources. Cette sensibilité est en relation linéaire avec $\gamma(\mathbf{K})$. On peut y noter que si le conditionnement est voisin de l'unité, de fait, de faibles variations sur le second membre n'induiront que de faibles variations des charges hydrauliques. C'est là une condition très restrictive quand on sait que les flux aux limites sont les termes les moins bien appréhendés dans les études hydrogéologiques.

- Sensitivité aux incertitudes des paramètres

Alors, la perturbation est restreinte aux seuls éléments de la matrice de l'écoulement sans changement de second membre. On peut établir quasiment le même résultat que précédemment [8] i.e. :

$$\frac{\|\Delta\mathbf{h}\|}{\|\mathbf{h} + \Delta\mathbf{h}\|} \leq \gamma(\mathbf{K}) \frac{\|\Delta\mathbf{K}\|}{\|\mathbf{K}\|} \quad (7)$$

Cela découle de l'invariance du second membre :

$$\mathbf{K}\mathbf{h} = (\mathbf{K} + \Delta\mathbf{K})(\mathbf{h} + \Delta\mathbf{h}) = \mathbf{Q}$$

et de la linéarité de la matrice \mathbf{K} qui est aussi régulière :

$$\Delta\mathbf{h} = \mathbf{K}^{-1} \Delta\mathbf{K} (\mathbf{h} + \Delta\mathbf{h})$$

On obtient le résultat avancé en passant aux normes et en faisant intervenir le conditionnement. Et, comme précédemment, on note que la borne supérieure de variation relative des charges est d'autant plus grande que $\gamma(\mathbf{K})$ est grand. Mais cette situation est plus favorable que la précédente, compte tenu du fait que les paramètres sont connus avec une meilleure précision que les flux.

- Sensitivité du système linéaire perturbé : cas général

L'effet concomitant des deux sources de perturbation précédentes s'exprime par [8] :

$$\frac{\|\Delta\mathbf{h}\|}{\|\mathbf{h}\|} \leq \frac{\gamma(\mathbf{K})}{1 + \gamma(\mathbf{K})} \left\{ \frac{\|\Delta\mathbf{Q}\|}{\|\mathbf{Q}\|} + \frac{\|\Delta\mathbf{K}\|}{\|\mathbf{K}\|} \right\} \quad (8)$$

On peut constater à travers ce dernier résultat que si :

$$\|\mathbf{K}^{-1}\| \|\Delta\mathbf{K}\| < 1$$

alors $\gamma(\mathbf{K})$ mesure la sensibilité du système puisque pour des valeurs proches de l'unité, de faibles incertitudes sur \mathbf{K} , \mathbf{Q} et les conditions aux limites, n'ont que peu d'incidence sur la solution. Compte tenu du niveau d'incertitude sur \mathbf{Q} , il y a lieu de s'en accommoder faute de le réduire. Il y a donc un intérêt certain à travailler avec des matrices bien conditionnées voire à équilibrer un système mal conditionné en opérant des transformations i.e. à trouver des matrices diagonales \mathbf{D}_1 et \mathbf{D}_2 de sorte que $\gamma(\mathbf{D}_1\mathbf{K}\mathbf{D}_2)$ soit proche de l'unité.

L'analyse précédente se fonde sur une connaissance *a priori* de $\gamma(\mathbf{K})$. Cette connaissance peut être effectuée en suivant la problématique développée lors des expérimentations numériques.

EXPERIMENTATIONS NUMERIQUES

Ces expérimentations sont entreprises sur des exemples synthétiques qui satisfont à 3 critères : 1) relative simplicité, pour ne requérir que de modestes moyens de calcul numérique ; 2) d'une complexité géologique modulable pour appréhender l'influence des hétérogénéités ; 3) correspondre à une caractérisation réaliste des aquifères.

A cet effet, nous avons considéré un domaine dont la géométrie est celle d'un carré de côté a égal à l'unité avec des frontières à potentiel imposé à 1 au nord et à zéro au sud (Fig. 1a). Le confinement de l'écoulement, typique de l'effet latéral des frontières est évité en raccordant les points de même niveau. Le domaine étudié apparaît alors comme le développement d'un cylindre de diamètre a et de hauteur a (Fig. 1c).

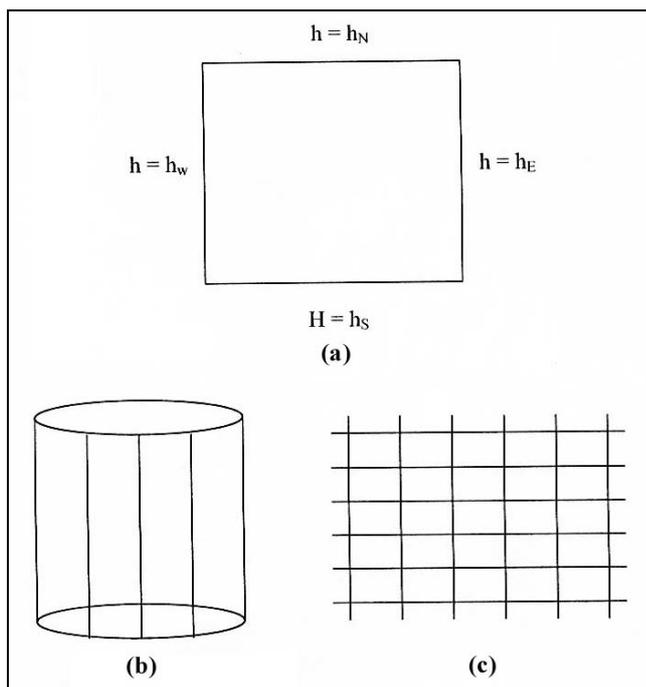


Figure 1: (a) Domaine aquifère et conditions aux limites
(b) Domaine cylindrique à symétrie axiale
(c) Domaine cylindrique développé.

Mis à part sa forme géométrique, ce domaine n'est pas atypique. Il correspond à des conditions aux limites

courantes. Il exprime aussi une normalisation de l'équation de l'écoulement :

$$\nabla \cdot \mathbf{K} \nabla h = q \quad 0 \leq x \leq a \quad 0 \leq y \leq a$$

et de ses conditions aux limites que l'on établit en posant :

$$X = x / a$$

$$Y = y / a$$

$$H = h / h_N$$

$$Q = q / Kh$$

$$K = K / E(K)$$

E désignant l'opérateur espérance mathématique.

$$\nabla \cdot \mathbf{K} \nabla H = Q \quad 0 \leq X \leq 1 \quad 0 \leq Y \leq 1 \quad (9a)$$

$$H(X, 1) = 1$$

$$H(X, 0) = 0 \quad (9b)$$

$$H(0, Y) = 1$$

$$H(1, Y) = 1$$

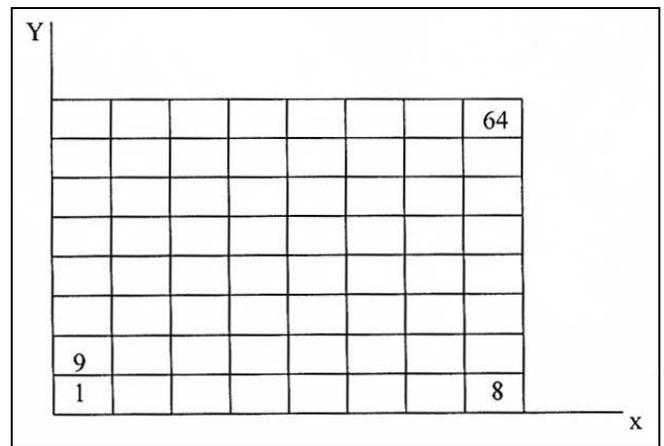


Figure 2: Discretisation du domaine d'écoulement.

Ce domaine est discrétisé par un réseau carré (8x8) de 64 blocs (Fig. 2). Ce découpage peut sembler grossier si notre propos avait été l'étude des erreurs numériques dues à la discrétisation. Ce n'est pas le cas. Les mailles peuvent être assimilées à autant de plages uniformes dont la distribution des valeurs des perméabilités suit une loi log-normale de paramètres (μ_K, σ_K) et une loi de conciliation de type exponentiel. La longueur de corrélation normalisée ℓ / a permet de s'affranchir de l'influence exercée par ℓ sur σ_K [9]. Pratiquement, on préfère recourir au logarithme de K en posant $Z = \log K$ [7]. Les valeurs de Z sont générées en décomposant la matrice de covariance selon la méthode de Nash [10]. Le nombre de réalisations de la fonction aléatoire Z utilisée est de 30, chiffre minimal pour un traitement statistique des résultats. On a examiné la reconstitution des moments de la population à partir des échantillons ainsi que l'hypothèse de normalité des valeurs de Z : les résultats des tests montrent qu'effectivement les valeurs produites sont distribuées selon une loi normale au niveau de probabilité de 0.1. Une fois restituées, les valeurs de K sont affichées aux nœuds du réseau maillé et la matrice \mathbf{K} élaborée.

1- Milieux uniformes

L'étude de ce cas permet de tester les programmes de calculs développés. C'est une phase indispensable pour valider des résultats. Avec le schéma discret à 5 points sur

un maillage carré, la matrice de l'écoulement associée à ce problème s'écrit :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{G} & \mathbf{I} & \dots & () \\ \mathbf{I} & \mathbf{G} & \mathbf{I} & \\ \dots & \mathbf{I} & \mathbf{G} & \mathbf{I} \\ () & \dots & \mathbf{I} & \mathbf{G} \end{bmatrix} \quad (10)$$

où la sous-matrice tri-diagonale \mathbf{G} est de même ordre que la matrice identité \mathbf{I} .

$$\begin{bmatrix} -4 & 1 & \dots & () \\ 1 & -4 & 1 & \\ \dots & \dots & \dots & 1 \\ () & \dots & 1 & -4 \end{bmatrix} \quad (11)$$

Ses valeurs propres sont données par :

$$\lambda_{pq} = 4 \left(\sin^2 \frac{p\pi}{2M} + \sin^2 \frac{q\pi}{2N} \right)$$

où $M = a / \Delta x$ et $N = a / \Delta y$; p et q désignant des index / : $p = 1, M-1$ et $q = 1, N-1$.

On notera, en particulier, que dans le cas de blocs de dimensions uniformes $\Delta x = \Delta y$; ses valeurs propres extrémales sont :

$$\lambda_1 = \rho(-\mathbf{K}) = 8 \sin^2 \left(\frac{(N-1)\pi\Delta x}{2a} \right) = 8 \cos^2 \left(\frac{\pi\Delta x}{2a} \right) \quad (12)$$

pour la plus grande et pour la plus petite :

$$\lambda_{N-1} = 8 \sin^2 \left(\frac{\pi\Delta x}{2a} \right) \quad (13)$$

Ces résultats nous permettent de donner une idée sur la valeur du conditionnement de la matrice \mathbf{K} associée au problème homogène :

$$\begin{aligned} \gamma(\mathbf{K}) &= \frac{1}{\tan^2(\pi\Delta x/2a)} \cong \frac{4a^2}{\pi^2(\Delta x)^2} \\ &\cong \frac{4}{\pi^2} N^2 \end{aligned} \quad (14)$$

ainsi que celui consécutif au préconditionnement de \mathbf{K} par \mathbf{D} :

$$\gamma(\mathbf{D}^{-1}\mathbf{K}) = \gamma(\mathbf{I} - \mathbf{J}) = \frac{\max \mu_i}{\min \mu_i} \quad (15)$$

soit :

$$\gamma(\mathbf{D}^{-1}\mathbf{K}) \leq [1 + \rho(\mathbf{J})][1 - \rho(\mathbf{J})]^{-1} \quad (16)$$

puisque $\mu_i = 1 - \lambda_i$ et que, d'autre part :

$$1 > \rho(\mathbf{J}) \geq \sup |\lambda_i(\mathbf{J})|.$$

En l'espèce, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \rho(-\mathbf{K}) &= 7.604 = 7.604 \\ \lambda_{36}(-\mathbf{K}) &= 0.396 = 0.396 \\ \gamma(-\mathbf{K}) &= 19.88 \cong 19.20 \end{aligned}$$

Les valeurs propres extrémales calculées analytiquement sont très proches de celles obtenues numériquement. Dans la figure 3, nous donnons la distribution des éléments du spectre de \mathbf{K} .

Quant aux éléments de la matrice de Jacobi, ils se déduisent de ceux de \mathbf{K} ou se calculent à partir des données

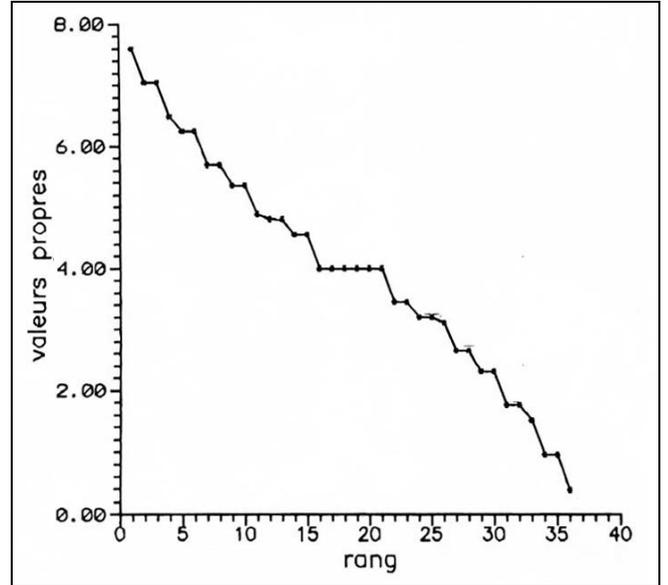


Figure 3: Spectre des valeurs propres de la matrice \mathbf{K} du problème homogène.

de \mathbf{J} . Quel que soit le mode de détermination, on obtient : $\rho(\mathbf{J}) = 0.901$.

Ces résultats extraits du tableau de valeurs calculées analytiquement confortent ceux obtenus numériquement. L'implantation des différents algorithmes et leur mise en œuvre est jugée correcte pour le calcul des valeurs propres extrémales. Par contre, le calcul des autres éléments du spectre des valeurs propres ne semblent pas avoir été réalisé avec autant de succès. Aussi s'est-on limité au calcul des extréma du spectre par la méthode de la puissance itérée et par déflation de la matrice $-\mathbf{K}$ [11].

Dès lors, le comportement des caractéristiques spectrales de $-\mathbf{K}$ et \mathbf{J} peut être inspecté en fonction du pas de discrétisation. Dans le tableau 1, nous consignons les résultats obtenus. La valeur du conditionnement $\gamma(\mathbf{D}^{-1}\mathbf{K})$ qui y est rapportée est une borne supérieure estimée à partir de $\rho(\mathbf{J})$ par (16).

N	6	9	14	24	31	36
$\rho(\mathbf{K})$	7.604	7.804	7.913	7.968	7.981	7.990
$\gamma(\mathbf{K})$	19.80	39.86	90.52	252.6	414.3	1053
$\rho(\mathbf{J})$	0.901	0.951	0.978	0.992	0.995	0.998
$\rho(\mathbf{D}^{-1}\mathbf{K})$	1.901	1.951	1.978	1.992	1.995	1.997
$\gamma(\mathbf{D}^{-1}\mathbf{K})$	19.20	39.82	89.92	248.99	399.0	991.0

Tableau 1: Variations de quelques caractéristiques spectrales en fonction du pas de discrétisation.

Performances numériques

Pour clore cet examen des milieux uniformes, nous comparons les méthodes de surrelaxation pour différentes valeurs du coefficient de surrelaxation. Le nombre d'itérations (NIT) nécessaire pour atteindre la précision ε est donné par :

$$m = -\frac{1}{V} \text{Loge}$$

ω	ρ_ω	V_ω	$1/V_\omega$	NIT	$V_\omega \times \text{NIT}$	% $1/V_\omega$	% NIT
1.00	0.8118	0.2085	4.7960	76	15.85	4.45	4.00
1.30	0.6288	0.4639	2.1556	38	17.63	2.02	2.00
1.35	0.5612	0.5776	1.7313	32	18.48	1.61	1.68
1.39	0.3950	0.9289	1.0766	26	24.15	1.	1.37

Tableau 2: Performances numériques comparées de la méthode de surrelaxation par points appliquée aux écoulements en milieu uniforme.

Connaissant le rayon spectral de la matrice de surrelaxation \mathbf{K}_ω , on évalue le taux asymptotique de convergence par $V = -\log \rho$. Le produit de V par le nombre d'itérations effectivement mesurées pour atteindre la précision ε devrait être de l'ordre de $-\text{Log } \varepsilon$. Dans le tableau 2, on donne les performances relevées lors des essais numériques.

Pour $\omega = \omega_{\text{opt}}$ et $\varepsilon = 10^{-8}$, NIT est en théorie égale à 19. On peut relever la proximité des valeurs de la colonne $V \times \text{NIT}$ avec celle obtenue à partir de $-\text{Log } 10^{-8}$ soit 18.42. Seule la valeur correspondant à $\omega = \omega_{\text{opt}}$ s'en singularise.

La méthode de surrelaxation est aussi comparée à la méthode du gradient conjuguée préconditionné (GCP) et à la méthode des directions alternées (ADIP). Dans le tableau 3, la convergence de ces méthodes est examinée à travers l'évolution du résidu d'itération en fonction du temps CPU pour une précision de $\varepsilon = 10^{-4}$. Dans le tableau 3, chaque ligne donne le temps CPU, le nombre d'itérations ainsi que l'erreur obtenue pour atteindre successivement les précisions 10^{-3} , 10^{-4} , 10^{-5} , 10^{-6} et 10^{-7} . Les rapports des nombres d'itérations obtenues confirmeraient la puissance de la méthode du gradient préconditionné qui réduit d'autant plus le temps CPU que la précision requise est grande. La méthode ADIP, quoique nécessitant deux fois plus d'opération que la méthode de surrelaxation par points, lui est supérieure. Mais cet avantage s'amointrit quand epsilon augmente. Quant à PSOR avec paramètre optimal, elle s'avère moins performante. On notera, par ailleurs, qu'il est effectivement préférable de surestimer ω_{opt} plutôt que de le sous-évaluer.

Méthode	NIT	CPU	erreur
GCP	3	0.39	$2.8 \cdot 10^{-1}$
	4	0.50	$1.9 \cdot 10^{-1}$
	6	0.66	$9.6 \cdot 10^{-2}$
	11	1.02	$3.3 \cdot 10^{-4}$
	12	1.08	$4.6 \cdot 10^{-5}$
ADIP	5	0.26	$2.5 \cdot 10^{-2}$
	6	0.33	$1.1 \cdot 10^{-2}$
	9	0.49	$8.3 \cdot 10^{-3}$
	11	0.60	$2.3 \cdot 10^{-5}$
SSOR	5	1.97	$7.2 \cdot 10^{-1}$
	10	4.01	$5.1 \cdot 10^{-2}$
	14	5.60	$2.0 \cdot 10^{-3}$
	16	6.42	$4.2 \cdot 10^{-4}$
	18	7.25	$8.9 \cdot 10^{-5}$

Tableau 3: Performances numériques comparées des méthodes de surrelaxation, des directions alternées et du gradient conjugué préconditionné.

2. Milieux hétérogènes

À la différence du cas uniforme, nous ne sommes plus en situation de disposer de résultats théoriques pour valider ceux du problème non homogène. Cependant, la matrice \mathbf{K} possède toujours la même structure. Les éléments non nuls de la sous-matrice \mathbf{G} reproduisent la variabilité spatiale des paramètres. En conséquence, les propriétés relevées dans le cas précédent sont toujours valables. Il en est d'autres qui ont un rapport avec le problème aux valeurs propres : on peut ainsi vérifier que la matrice \mathbf{K} est définie négative, que ses valeurs propres sont réelles et négatives et qu'elle possède une matrice unitaire. Par ailleurs, pour sa mesure, nous disposons de la norme spectrale $\|\mathbf{K}\|_2$ et de la norme euclidienne $\|\mathbf{K}\|_F$. Avec le théorème de Gershgorin, nous avons la latitude de localiser ses valeurs propres par :

$$\{\rho(\mathbf{K})\} \leq \max_r \{ |k_r| + \Lambda_r \} \quad (17)$$

$$\{\rho(\mathbf{K}^{-1})\}^{-1} \geq \min_r \{ |k_r| - \Lambda_r \} \quad (18)$$

$$\{\rho(\mathbf{K}^{-1})\}^{-2} \leq |\lambda_i| \leq \rho(\mathbf{K}) \quad (19)$$

Λ_r désignant le rayon des disques de Gershgorin. Et enfin, le résultat de Wilkinson [1], donné par :

$$\left\{ \sum_{i=1}^n (\delta\lambda_i)^2 \right\}^{1/2} \leq n\varepsilon \quad (20)$$

nous garantit un bon conditionnement du problème aux valeurs propres pour autant que la matrice de perturbation $\Delta\mathbf{K}$ soit, elle aussi, hermitienne et telle que $|\Delta k_{ij}| \leq \varepsilon$. Autrement, il importe de s'assurer que dans le second résultat de Wilkinson [1] :

$$|\delta\lambda_i| \leq \frac{\|\mathbf{B}\|_2}{|\mathbf{y}_i^T \mathbf{x}_i|} \quad (21)$$

cos $\theta_i \cong 1$ où $\theta_i = (y_i, x_i)$ désigne l'angle entre les vecteurs propres y_i et x_i .

Dans (20) et (21), $\delta\lambda_i$ représente la perturbation de λ_i associée à $\Delta\mathbf{K}$.

- Conditions au limites de type Dirichlet

Par l'imposition de H sur tout le pourtour du domaine, la matrice \mathbf{K} opère exclusivement sur les nœuds intérieurs : ses éléments ne dépendent que du champ des valeurs de K et de la loi de conciliation des perméabilités de passage entre deux mailles contiguës. Dans notre cas, nous avons adopté pour cette dernière la moyenne dite arithmétique : $k_{i \pm 1/2, j} = (k_{i \pm 1/2, j} + k_{i, j})/2$. La dimension de \mathbf{K} est alors celle du nombre de points intérieurs.

Le calcul des extrêma du spectre est entrepris après avoir déterminé les bornes de Gershgorin. On constate dans le tableau 4 que les valeurs propres extrémales cadrées par ces bornes en sont assez proches. Nous avons prêté attention à cette proximité en fonction de l'hétérogénéité du champ des perméabilités : nous y observons sans peine la dépréciation de ces bornes avec le degré d'hétérogénéité. Nous attribuons cela à la dégradation du conditionnement de la matrice \mathbf{K} comme cela est suggéré par le résultat de Wilkinson.

s_Y	$\rho(\mathbf{K})$	$\Lambda_r(\mathbf{K})$
0.1	8.24	9.25
0.2	9.72	12.77
0.3	12.11	16.78
0.4	15.62	24.40
0.5	20.60	30.30
0.6	27.60	41.32
0.7	37.40	56.76

Tableau 4: Proximité des bornes de Gershgorin du rayon spectral ($\xi = 0$.)

Influence de l'écart-type sur le rayon spectral

Cette influence est nettement perceptible à travers l'examen des graphes $\rho(s_Y, \xi)$. Le rayon spectral $\rho(\mathbf{K})$ apparaît comme une fonction croissante de l'écart-type s_Y (Fig. 4a). Cette allure de $\rho(\mathbf{K})$ ne semble pas être influencée par la longueur de corrélation.

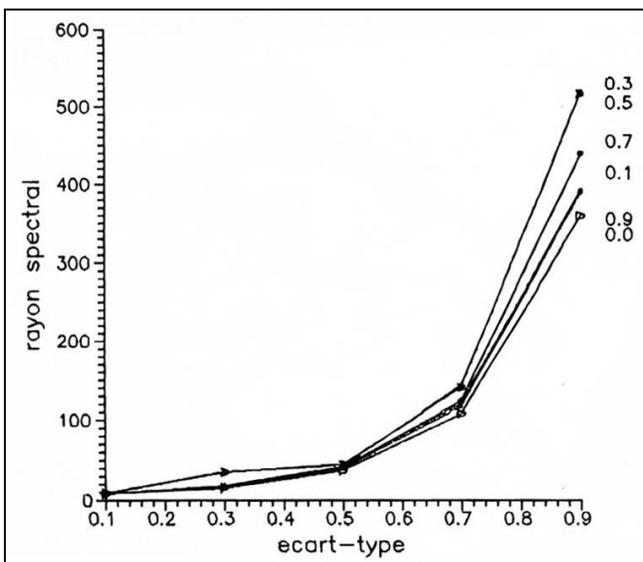


Figure 4a: Influence de l'écart-type sur le rayon spectral de la matrice \mathbf{K} pour différentes longueurs de corrélation.

Influence de la longueur de corrélation sur le rayon spectral

L'observation précédente peut être corroborée et précisée par l'examen du graphe de la figure 4b. On y a représenté l'évolution du rayon spectral en fonction de la longueur de corrélation en la paramétrant sur l'écart-type s_Y . On y note qu'effectivement le rayon spectral $\rho(\mathbf{K})$ n'est quasiment pas influencé par ξ et cela d'autant moins que l'écart-type s_Y est modeste. Par contre, lorsque la variabilité

des perméabilités est plus prononcée, $\rho(\mathbf{K})$ tend à décroître quand la longueur de corrélation croît. Cela semble attester que les paramètres de l'hétérogénéité s_Y et ξ agissent sur le rayon spectral suivant une direction commune avec des intensités spécifiques de sorte que l'uniformité de \mathbf{K} réduit $\rho(\mathbf{K})$ ainsi que les fortes corrélation.

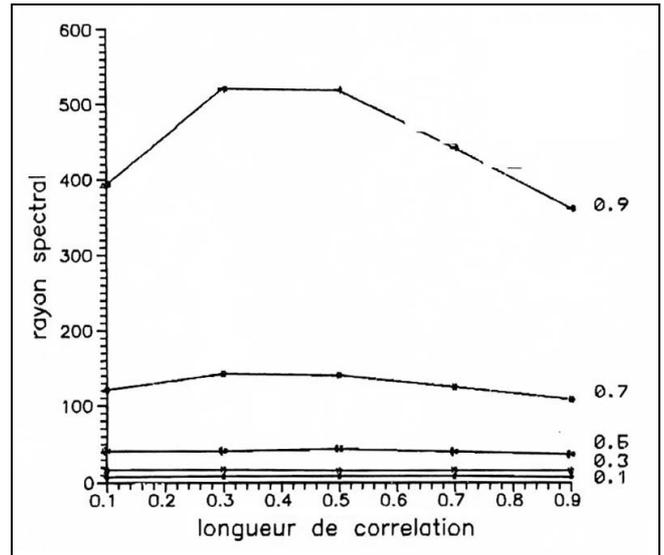


Figure 4b: Influence de la longueur de corrélation sur le rayon spectral de la matrice \mathbf{K} selon l'écart-type.

Influence de l'écart-type sur le conditionnement

Les allures des graphes de $\gamma(s_Y, \xi)$ sont similaires à ceux de $\rho(s_Y, \xi)$ de la figure 4. Les mêmes observations sont relevées i.e. le conditionnement de la matrice \mathbf{K} se dégrade quand l'écart-type de Y augmente ; en indexant les courbes sur la longueur de corrélation, on observe la même allure et presque la même pente pour des champs de Y de faible variabilité ; ensuite, la pente croît selon la valeur de la longueur de corrélation.

Influence de la longueur de corrélation sur le conditionnement

Dans ce cas aussi, les courbes $\gamma(s_Y, \xi)$ ont le mérite de préciser le comportement de $\gamma(\mathbf{K})$ en fonction des paramètres qui modulent le champ d'hétérogénéité. Il apparaît que le conditionnement de \mathbf{K} est assurément influencé par la longueur d'autocorrélation. Il se détériore entre 0 et 0.3 pour ensuite s'améliorer et tendre vers des valeurs fixées par l'hétérogénéité telle qu'elle est exprimée par l'écart-type s_Y . Cette influence de ξ sur $\gamma(\mathbf{K})$ est d'autant plus patente que le milieu est de plus forte variabilité. De plus, un seuil de longueur de corrélation semble caractériser toutes ces courbes : il correspondrait à la dimension du bloc élémentaire. On note que ce seuil s'estompe quand le milieu devient moins hétérogène. Cette observation signifierait que l'omission de la longueur de corrélation comme un des paramètres de l'hétérogénéité du champ des perméabilités induirait en erreur l'évolution du conditionnement $\gamma(\mathbf{K})$. En ce qui concerne la distribution des valeurs de $\gamma(\mathbf{K})$, elle range la matrice de l'écoulement dans la classe des matrices au conditionnement médiocre pour certaines valeurs du facteur d'hétérogénéité. Nous

avons d'ailleurs pu expérimenter ce fait *a contrario*, à travers la détermination pratique des valeurs propres extrémales dont le calcul s'est révélé instable et fastidieux.

Ces enseignements nous mettent en mesure de confirmer que, de fait, la résolution de l'équation de l'écoulement en milieu poreux se doit de prendre en charge le problème du conditionnement de la matrice **K**. Cela est particulièrement impératif dans les situations de contiguïté de zones de perméabilités contrastées et se traduisant par une faible longueur de corrélation. Cet inconvénient est exacerbé dans les milieux plus hétérogènes.

Influence du nombre de réalisations

Le caractère exhaustif de la méthode de Monte Carlo nous avait conduit à entreprendre les expérimentations numériques sur 30 réalisations pour réduire le volume des calculs. On se pose maintenant la question de savoir quelle est l'influence de la taille des échantillons sur les résultats. Pour cela, nous avons opéré des calculs similaires aux précédents avec des échantillons de taille 50 et 100 pour une gamme de variabilité de Y donnée. Cette influence a essayée d'être perçue à travers les résultats rapportés dans les tableaux 5 et 6. Leur examen révèle que cette influence n'est pas particulièrement sensible. L'erreur relative est de l'ordre de 10%. Pour cette raison, nous avons estimé justifié *a posteriori* le choix de la taille 30. Il permet un calcul des moments de $\rho(\mathbf{K})$ et de $\gamma(\mathbf{K})$ qui n'est pas excessivement biaisé.

NOMBRE DE REALISATIONS			
	30	50	100
ρ_{11}	8.41	8.44	8.46
ρ_{15}	8.58	8.55	8.48
ρ_{17}	8.51	8.47	8.36
ρ_{31}	16.29	16.24	16.56
ρ_{35}	16.48	15.79	14.84
ρ_{37}	15.74	15.11	14.04

Tableau 5: Influence du nombre de réalisations sur le rayon spectral ($s_V = 0.1; 0.3$; $\xi = 0.1; 0.5; 0.7$).

NOMBRE DE REALISATIONS			
	30	50	100
γ_{11}	21.1	21.2	21.2
γ_{15}	21.8	21.7	21.5
γ_{17}	21.7	21.5	21.3
γ_{31}	37.6	37.7	36.4
γ_{35}	40.3	37.8	35.8
γ_{37}	38.3	36.0	33.9

Tableau 6: Influence du nombre de réalisations sur le conditionnement ($s_V = 0.1; 0.3$; $\xi = 0.1; 0.5; 0.7$).

Influence de la dimension de la maille

Ce paramètre aussi ne révèle aucune surprise par rapport au cas homogène. Les caractéristiques spectrales sont toutes croissantes avec la finesse du pas de discrétisation (Tab. 7).

Performances numériques

Dans tous les exemples, le nombre points intérieurs est demeuré inchangé. Les différents cas de figure ont trait à des différences du champ des perméabilités.

DIMENSION			
	9	25	36
ρ_{33}	8.41	8.44	8.46
γ_{33}	8.58	8.55	8.48
ρ_{83}	16.29	16.24	16.56
γ_{83}	16.48	15.79	14.84

Tableau 7: Influence du pas de discrétisation sur le rayon spectral et sur le conditionnement ($s_V = 0.3; 0.8$; $\xi = 0.3; 0.9$).

La convergence a été testée sur la norme euclidienne du résidu R . Les itérations ont été arrêtées dès que $\|R\| \leq \varepsilon$ (test d'arrêt des itérations).

Compte tenu du fait que le résidu R s'interprète comme un débit d'erreur consécutif au défaut de fermeture du système, on a choisi $\varepsilon = 10^{-5}$ [12, 13].

Essais comparatifs de la méthode de surrelaxation

Pour des valeurs optimales de ω , la méthode de surrelaxation a été testée sur différents champs d'hétérogénéités. Dans le tableau 8, ω_{opt} a été calculé à partir de $\rho(\xi_1)$ grâce à l'expression de Young. Le rayon spectral $\rho(\xi_\omega)$ est la plus grande racine solution de l'équation :

$$(\eta + \omega - 1)^2 = \eta \omega^2 \rho(\xi_1)$$

et $V_\omega = -\text{Log } \rho(\xi_\omega)$ tandis que l'estimation théorique du nombre d'itérations NIT nécessaires pour atteindre la précision ε est telle que $\text{NIT} = (-1/V_\omega) \text{Log } \varepsilon$. On peut comparer à loisir les résultats de la colonne $V_\omega \times \text{NIT}$. Les valeurs consignées sont très voisines. Elles témoignent de la robustesse de la méthode de surrelaxation par points relativement au facteur d'hétérogénéité. Le tableau 9 donne enfin les résultats de quelques essais comparatifs entrepris entre la méthode de surrelaxation par points, la méthode des directions alternées et la méthode du gradient préconditionné.

(s_V, ξ)	$\rho(\xi_1)$	ω_{opt}	V_ω	$1/V_\omega$	NIT	$V_\omega \times \text{NIT}$
(0.1, 0.5)	0.8994	1.47	0.755	1.32	15	11.32
(0.3, 0.7)	0.9027	1.53	0.635	1.57	18	11.42
(0.7, 0.1)	0.9217	1.57	0.562	1.78	20	11.24

Tableau 8: Examen comparé de la méthode de surrelaxation pour différents champs d'hétérogénéité.

(s_V, ξ)	Méthode	NIT	CPU	Erreur ($\times 10^{-5}$)
(0.7, 0.7)	SSOR	19	7.19	8.7
	ADIP	14	0.84	2.8
	GCP	20	1.74	5.1
(0.3, 0.7)	SSOR	17	6.43	7.4
	ADIP	13	0.72	2.0
	GCP	19	1.68	8.2
(0.0, 1.0)	SSOR	18	6.76	8.9
	ADIP	11	0.55	2.3
	GCP	12	1.08	4.6

Tableau 9: Examen comparé de SSOR, ADIP et GCP pour différents champs d'hétérogénéité.

Comparaisons milieux uniformes–milieux hétérogènes

Pour peu que le champ de Y soit convenablement décrit, on constate que numériquement les hétérogénéités du champ des perméabilités nécessitent un ajustement des méthodes itératives ad hoc pour préserver leurs performances numériques. La méthode des directions alternées ADIP, qui devrait être desservie par le nombre d'opération par itération, apparaît en milieu homogène plus performante que la méthode de surrelaxation PSOR, dont le taux de convergence est plus faible. Cette supériorité est affectée par le facteur d'hétérogénéité qui réhabilite PSOR. Cette qualité serait due à la factorisation par blocs de ADIP beaucoup plus adaptée à une hétérogénéité ordonnée. Quant à la méthode du gradient conjugué préconditionné, à ce niveau de précision et pour cette dimension de la matrice \mathbf{K} , ses avantages ne peuvent être établis.

- Conditions aux limites de type Fourier

L'imposition de conditions de flux, en plus des conditions de potentiel, si elle ne pose pas de problème particulier, présente néanmoins l'inconvénient d'introduire de nouvelles inconnues H_Γ . Dans le cas de la géométrie du domaine précédent et en supposant le flux uniformément réparti sur chaque bloc, les NL-2 équations supplémentaires se dérivent de la loi de Darcy en faisant :

$$\partial H / \partial X = 0 \quad ; \quad \{ \partial H / \partial Y \}_{i,j+1/2} = q_{i,j} / k_{i,j+1/2}$$

de sorte qu'on se trouve de nouveau face au problème (19) à la différence près que la dimension de la matrice \mathbf{K} est plus grande que celle associée au problème de Dirichlet. En l'espèce, elle s'est accrue de 17 %. Cet accroissement n'est pas sans affecter les caractéristiques spectrales de \mathbf{K} . Nous avons déjà pu avoir une idée du comportement de $\rho(\mathbf{K})$ et $\gamma(\mathbf{K})$ en fonction du pas de discrétisation i.e. de la dimension de \mathbf{K} . Par ailleurs, comme le changement de conditions aux limites s'exprime aussi localement par une incertitude accrue des paramètres du fait de l'introduction de termes de flux, nous suspectons une détérioration des caractéristiques spectrales. Et, en effet, les expérimentations numériques opérées sur ce cas de figure révèle un rayon spectral et un conditionnement plus élevés que ceux obtenus précédemment. Cela traduit une moins bonne adéquation des conditions de flux que celles de potentiel. Ce constat serait à rapprocher de celui relevé par Newman [14].

- Conditions aux limites de type Neumann

L'imposition exclusive des conditions de flux, d'une part, accroît le nombre de nouvelles inconnues et, d'autre part, augmente localement l'incertitude de certains paramètres. On retrouve le cas de figure précédent de dépréciation des caractéristiques spectrales.

CONCLUSIONS

Le comportement du rayon spectral avec le facteur d'hétérogénéité, qui n'était que suspecté [15], a pu être établi et précisé à partir des résultats des expérimentations numériques. Sa croissance est d'autant plus importante que le milieu est plus fortement corrélé. Ces résultats devraient tempérer ceux obtenus en éludant les liaisons corrélatoires.

Le conditionnement de la matrice de l'écoulement se déprécie très vite avec le facteur d'hétérogénéité et avec le

pas de discrétisation. C'est là une contrainte qu'il importe de prendre en compte dans le compromis d'une représentation raisonnable des systèmes aquifères. Cela détériore d'autant le conditionnement et amplifie l'instabilité spectrale. Nulle doute aussi que la largeur de bande de \mathbf{K} ainsi qu'un pas d'espace variable affectent aussi ces caractéristiques spectrales et assignent des limites à la technique des mailles variables.

L'imposition des conditions de seconde et de troisième espèce, enfin, accroît cette dépréciation et incite assurément à privilégier les conditions de potentiel dans les modèles numériques de nappes.

REFERENCES

- [1]- Wilkinson J.H., "The Algebraic Eigenvalue Problem", Clarendon Press, Oxford (1965).
- [2]- Varga R.S., "Matrix Iterative Analysis", Prentice-Hall, Inc, Englewood Cliffs, New Jersey, George Forsythe, editor, (1962), pp.30-33.
- [3]- Harrabi A., "Etudes de Pseudo-Spectres d'Opérateurs Intégraux et Différentiels. Application à la Physique mathématique", Thèse de Doctorat présenté à l'Université de Toulouse I (1998).
- [4]- Bernhard Bekermann, "The Condition Number of Real Vandermonde, Krylov and positive definite Hankel Matrices", Publication ANO 380, Université de Lille (1997).
- [5]- Hoteit H., Erhel J., Mosé R., Phillippe B. and Ackerer P., "Numerical Reliability and CPU time for the Mixed Methods Applied to Solve the Flow Problems in Porous Media", Rap. De recherche INRIA n° 4228 (2001), pp.46.
- [6]- Ehrel J., "Experiments with Data Perturbations to Study Condition Numbers and Numerical Stability", Computing, 51 (1993), pp.29-44.
- [7]- Neuman S.P., "Statistical Characterisation of Aquifer Heterogeneities: an Overview. Recent trends in Hydrogeology", Geol. Soc. Am., spec. paper 189 edited by Narashiman Boulder, Colorado (1982), pp.81-162.
- [8]- Lascaux P. et Théodore R., "Analyse Numérique Matricielle Appliquée à l'Art de l'Ingénieur", Tome 1, Masson (1986), pp.1-400.
- [9]- Smith L. and Freeze R.A., "Stochastic Analysis of Steady-State Groundwater Flow in Bounded Domain. 2. Two Dimensional Simulations", *Water res. Research*, vol.15, n°6 (1979), pp.1543-1559.
- [10]- Nash J.C., "Compact Numerical Methods for Computers : Linear Algebra and Function Minimization", New york, John Wiley and Sons (1985).
- [11]- Gourlay A.R. & Watson G.A., "Computational Methods for Matrix Eigenproblems", John Wiley sons, Chichester, New York (1973), p.24.
- [12]- Hill M.C., "Methods and Guidelines for Effective Model Calibration", U.S. Geological Survey Water-Resources Investigation Report 98-4005 (1998), 90 p.
- [13]- Mandle R.J., "Groundwater Modeling Guidance", Michigan Dept of environmental quality, GMP, draft 1.0 (2002).
- [14]- Neuman S.P., "A Statistical Approach to the Inverse Problem of Aquifer Hydrology, 3. Improved Solution and Added Perspective", *Water res. Research*, vol. 16, n°2 (1980), pp.331-346.
- [15]- Ababou R., McLaughlin D., Gehlar L.W. and Thompson A.F.B., "Numerical Simulation of Saturated/Unsaturated Flow Fields in Randomly Heterogeneous Porous Media", Intern. Symp. On the Stochastic Approach to Subsurface Flow. CNRS-Greco 35 Hydrogéologie, editor de Marsily G., Montvillargène (1985), pp.294-312. □

