

Titre: Calibration et optimisation automatisées des propriétés
hydrogéologiques d'une halde à stériles avec couche de contrôle
des écoulements
Title:

Auteur: Tom Crouzal
Author:

Date: 2020

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Crouzal, T. (2020). Calibration et optimisation automatisées des propriétés
hydrogéologiques d'une halde à stériles avec couche de contrôle des
écoulements [Master's thesis, Polytechnique Montréal]. PolyPublie.
Citation: <https://publications.polymtl.ca/5528/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/5528/>
PolyPublie URL:

**Directeurs de
recherche:** Thomas Pabst
Advisors:

Programme: Génie minéral
Program:

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

**Calibration et optimisation automatisées des propriétés hydrogéologiques
d'une halde à stériles avec couche de contrôle des écoulements**

TOM CROUZAL

Département des génies civil, géologique et des mines

Mémoire présenté en vue de l'obtention du diplôme de *maîtrise ès sciences appliquées*

Génie Minéral

Décembre 2020

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

Ce mémoire intitulé:

Calibration et optimisation automatisées des propriétés hydrogéologiques d'une halde à stériles avec couche de contrôle des écoulements

Présenté par **Tom CROUZAL**

en vue de l'obtention du diplôme de *maîtrise ès sciences appliquées*

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

Bruno BUSSIÈRE, président

Thomas PABST, membre et directeur de recherche

Vincent CLOUTIER, membre

REMERCIEMENTS

Je remercie mon directeur de recherche Thomas Pabst pour son implication, ses conseils, et son intérêt au cours de ces deux années de maîtrise.

Je tiens à remercier également les professeurs, les associés de recherche, les techniciens, et les étudiants qui sont à l’Institut de recherche en mine et environnement (IRME). Ces deux années ont été agréables en votre compagnie.

RÉSUMÉ

Les opérations minières produisent des volumes importants de roches stériles pour accéder aux zones minéralisées à valeur économique. Les roches stériles sont caractérisées par une granulométrie grossière et étalée possédant une composition minéralogique variable. Les stériles sont généralement entreposés dans des haldes en surface, dont la construction et la restauration représentent un défi pour l'industrie. Une couche de contrôle des écoulements (CCE), constituée d'un matériau granulaire fin, installé au sommet de chaque banc, pourrait contribuer à contrôler l'infiltration d'eau et améliorer la stabilité géotechnique et géochimique des haldes de stériles. Une halde à stériles expérimentale a été construite sur le site de la mine du Lac Tio (Rio Tinto Fer et Titane, Québec, Canada) afin d'évaluer la performance d'une CCE en conditions de terrain (Bussière 1999; Aubertin et al. 2002a; Fala et al. 2005; Broda et al. 2014; Bréard Lanoix 2017; Martin et al. 2017; Dubuc 2018). Des essais d'infiltration à grande échelle et un suivi des précipitations pendant 17 mois ont été réalisés afin d'évaluer le comportement hydrogéologique de la halde expérimentale et de la CCE. Les résultats ont ensuite été utilisés afin de calibrer des simulations numériques dans le but d'optimiser et d'extrapoler la méthode pour d'autres sites et d'autres conditions climatiques. Cependant, les données mesurées étaient bruitées et parfois incomplètes, ce qui rendait les simulations numériques difficiles à calibrer.

L'objectif principal de ce projet était donc de développer une nouvelle méthode de calibration des propriétés hydrogéologiques d'un système de restauration en conditions non saturées et de l'appliquer au cas de la halde à stériles expérimentale de la mine du Lac Tio. Les propriétés hydrogéologiques utilisées pour ce processus étaient la conductivité hydraulique et les paramètres de l'équation de van Genuchten (2018). La calibration était basée sur deux essais d'infiltration à grande échelle qui ont permis d'isoler des variations de teneurs en eau volumique marquées dans les différents matériaux de la halde expérimentale et d'observer des tendances représentatives du comportement hydrogéologique du système permettant de simplifier et d'automatiser le processus de calibration. L'approche a ensuite consisté à définir pour chaque essai d'infiltration trois points caractéristiques qui représentaient les variations de teneurs en eau volumique induites par le passage du front de mouillage. Ces paramètres ont servi de comparaison entre les simulations numériques et les mesures de terrain.

La méthode de calibration est basée sur les optimisations de boîte noire, elles-mêmes basées sur les algorithmes de type « mesh adaptative direct search » (Mads) permettant une résolution mathématique itérative d'équations non linéaires et non dérivables. Dans ce mémoire, les variables d'entrées étaient définies par les propriétés hydrogéologiques des matériaux de la halde à stériles expérimentale. L'objectif de la calibration correspondait à un ensemble d'algorithmes visant à minimiser l'erreur entre les points spécifiques mesurés et simulés. Ce processus a permis d'itérer un nombre conséquent de propriétés hydrogéologiques jusqu'à l'obtention d'un optimum. Les paramètres calibrés ont ensuite été validés au moyen d'une simulation numérique de 523 jours représentant la durée totale de suivi sur la halde à stériles expérimentale. Le comportement hydrogéologique simulé de la halde était généralement proche des valeurs mesurées et l'écart entre les teneurs en eau volumique mesurées et simulées restait globalement inférieur à l'erreur de mesure des sondes de teneur en eau volumique.

L'approche de calibration automatique a également pu être modifiée afin d'optimiser les propriétés de la CCE pour maximiser la déviation latérale de l'eau d'infiltration. La valeur « objectif » à minimiser correspondait dans ce cas aux volumes cumulés dans les lysimètres situés sous les stériles réactifs. L'optimum simulé représentait une efficacité de 100% pour une CCE de 0.77 m d'épaisseur et dont le matériau était sensiblement plus fin que le sable installé sur la halde expérimentale.

La méthode de calibration proposée a donc permis d'obtenir une bonne calibration des propriétés hydrogéologiques des matériaux de la halde à stériles expérimentale de la mine du Lac Tio. L'approche développée a aussi permis l'optimisation d'une CCE adapté aux propriétés hydrogéologiques calibrées des roches stériles de la halde expérimentale.

ABSTRACT

Mining operations produce large volumes of waste rock to access economically valuable mineralized zones. Waste rocks are characterized by coarse and spread grain size distribution. Waste rock is generally stored in surface piles, where the construction and restoration represent a challenge for the industry. A flow control layer (FCL), made of fine granular material, and constructed on the top of each waste rock bench, could contribute to control water infiltration, thus improving the geotechnical and geochemical stability of the waste rock piles. An experimental waste rock pile was built on the Lac Tio mine site (Rio Tinto Fer et Titane, Quebec, Canada) to evaluate a performance of a FCL in field conditions (Bussière 1999, Aubertin et al. 2002a, Fala et al. 2005, Broda et al. 2014, Bréard Lanoix 2017, Martin et al. 2017, Dubuc 2018). Large-scale infiltration tests and rainfall monitoring for 17 months were carried out to assess the hydrogeological behavior of the experimental waste rock pile. The results were used to calibrate numerical simulations to optimize and extrapolate the method for other sites and other climatic conditions. However, the measured data was noisy and sometimes incomplete, making numerical simulations difficult to calibrate.

The main objective of this project was to develop a new calibration method for the hydrogeological properties of a restoration system under unsaturated conditions and to apply it to the case of the experimental waste rock pile at the Lac Tio mine. The hydrogeological properties were the hydraulic conductivity and the parameters of the van Genuchten (2018) equation. The calibration was based on two large-scale infiltration tests which was possible to isolate marked variations in the measured volumetric water content in the different materials of the experimental waste rock pile. The approach consisted of defining for each infiltration test three characteristic points which represented the variations in volumetric water content induced by the passage of the wetting front. These parameters served as a comparison between numerical simulations and field measurements.

The calibration method was based on black-box optimizations, themselves based on "mesh adaptive direct search" (Mads) type algorithms allowing iterative mathematical resolution of non-linear and non-differentiable equations. In this thesis, the input variables were defined by the hydrogeological properties of the materials in the experimental waste rock pile. The objective of the calibration to minimize the error between the parameter obtained by measurements and simulations. This process permitted to iterate a significant number of hydrogeological properties

until an optimum was obtained. The calibrated properties were validated using a numerical simulation of 523 days representing the total monitoring time on the experimental waste rock pile. The simulated hydrogeological behavior of the waste rock pile was generally close to the measurements and the difference between the measured and simulated volumetric water contents remained less than the measurement error of the volumetric water content probes.

The automatic calibration approach could also be modified to optimize the properties of the FCL to maximize the lateral deflection of the groundwater. The “objective” value was to minimize the cumulative water volumes in the lysimeters located under the reactive waste rock. The optimum result was 100% efficiency for a 0.77 m thickness with a new material thinner than the sand installed on the experimental waste rock pile.

The proposed calibration method permits to obtain a good calibration of the hydrogeological properties of the experimental waste rock pile at the Lake Tio mine. The new approach also allowed the optimization of the FCL adapted to the calibrated hydrogeological properties of the waste rocks of the experimental waste rock pile.

TABLE DES MATIÈRES

| | |
|--|-------|
| REMERCIEMENTS | III |
| RÉSUMÉ..... | IV |
| ABSTRACT | VI |
| TABLE DES MATIÈRES | VIII |
| LISTE DES TABLEAUX..... | XII |
| LISTE DES FIGURES..... | XIII |
| LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS | XVIII |
| LISTE DES ANNEXES..... | XXI |
| CHAPITRE 1 INTRODUCTION..... | 1 |
| 1.1 Contexte | 1 |
| 1.2 Objectifs | 3 |
| 1.3 Contenu du mémoire | 4 |
| CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE | 5 |
| 2.1 Haldes à stériles..... | 5 |
| 2.1.1 Propriétés des roches stériles..... | 5 |
| 2.1.2 Haldes à stériles..... | 5 |
| 2.2 Drainage minier contaminé | 7 |
| 2.3 Restauration minière | 8 |
| 2.4 Écoulement en milieux poreux..... | 9 |
| 2.4.1 Écoulement saturé | 9 |
| 2.5 Écoulement non saturé dans un milieu poreux..... | 10 |
| 2.5.1 Équation de Richards | 10 |
| 2.5.2 Courbe de rétention d'eau | 11 |

| | | |
|------------|---|----|
| 2.5.3 | Fonction de la conductivité hydraulique | 12 |
| 2.5.4 | Effets de barrière capillaire | 13 |
| 2.5.5 | Méthode de la couche de contrôle des écoulements (CCE) | 14 |
| 2.5.6 | Effet de pente | 15 |
| 2.6 | Halde expérimentale de la mine du Lac Tio | 16 |
| 2.6.1 | Contexte | 16 |
| 2.6.2 | Propriétés hydrogéologiques des matériaux de la halde à stérile expérimentale ... | 19 |
| 2.6.3 | Essais d'infiltration à grande échelle | 20 |
| 2.7 | Simulations numériques et optimisation | 22 |
| 2.7.1 | Simulations numériques | 22 |
| 2.7.2 | Calibration et optimisation | 23 |
| CHAPITRE 3 | MÉTHODOLOGIE | 26 |
| 3.1 | Halde à stériles expérimentale et mesures de terrain | 26 |
| 3.2 | Simulations numériques | 29 |
| 3.2.1 | Géométrie et maillage du modèle..... | 29 |
| 3.2.2 | Conditions initiales et conditions aux frontières | 30 |
| 3.2.3 | Convergence..... | 31 |
| 3.3 | Calibration automatisée des simulations numériques | 32 |
| 3.3.1 | Traitement des données | 34 |
| 3.3.2 | Fonction de précipitation..... | 40 |
| 3.3.3 | Valeurs d'entrées..... | 41 |
| 3.3.4 | Fonction de communication entre la boîte noire et le fichier des propriétés hydrogéologiques du logiciel HydroGeoSphere. | 42 |
| 3.3.5 | Fonction d'extraction des teneurs en eau volumique simulées | 44 |
| 3.3.6 | Obtentions des paramètres t1, t2 et ta simulés | 45 |

| | | |
|---|--|----|
| 3.4 | Fonction de boîte noire..... | 48 |
| 3.4.1 | Algorithme de Mads..... | 50 |
| 3.4.2 | Utilisation du logiciel d'optimisation Nomad..... | 52 |
| 3.4.3 | Fonction « surrogate »..... | 54 |
| 3.4.4 | Validations des propriétés hydrogéologiques calibrées | 55 |
| 3.4.5 | Analyse paramétrique..... | 55 |
| 3.5 | Optimisation de la conception de la CCE | 57 |
| CHAPITRE 4 ARTICLE 1 : AN AUTOMATED APPROACH TO CALIBRATE NUMERICAL SIMULATIONS AND OPTIMIZE COVER DESIGN : APPLICATION TO A FLOW CONTROL LAYER CONSTRUCTED ON AN EXPERIMENTAL WASTE ROCK PILE | | 60 |
| 4.1 | Introduction | 61 |
| 4.2 | Background on calibration approaches | 62 |
| 4.3 | Methodology | 65 |
| 4.3.1 | Experimental waste rock pile and field monitoring data..... | 65 |
| 4.3.2 | Data treatment | 67 |
| 4.3.3 | Numerical simulations..... | 69 |
| 4.3.4 | Automated calibration approach | 71 |
| 4.4 | Results | 72 |
| 4.4.1 | Calibration results | 72 |
| 4.4.2 | Validation for the 2016-2017 period..... | 78 |
| 4.5 | Sensitivity of calibration to input parameters | 81 |
| 4.6 | FCL design optimization using the automated black box approach | 82 |
| 4.7 | Discussion | 86 |
| 4.8 | Conclusion..... | 88 |

| | | |
|------------|-------------------------------------|-----|
| 4.9 | Acknowledgments | 88 |
| 4.10 | References | 89 |
| CHAPITRE 5 | DISCUSSION GÉNÉRALE | 102 |
| CHAPITRE 6 | CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS | 106 |
| 6.1 | Conclusion..... | 106 |
| 6.2 | Recommandations | 106 |
| RÉFÉRENCES | | 108 |
| ANNEXES | | 119 |

LISTE DES TABLEAUX

| | |
|---|----|
| Tableau 3.1 : Valeurs des temps t_1 et t_2 pour les essais I-C et I-D à 0,80 m de profondeur (sondes P1 à P6). Les paramètres n'ont pas pu être déterminés pour la sonde P4 (voir texte pour détails). | 38 |
| Tableau 3.2 : Valeurs des temps t_a pour les essais I-C et I-D à 1,30 m de profondeur. | 40 |
| Tableau 3.3 : Valeurs initiales utilisées pour la calibration des simulations numériques de la halde expérimentale. k_{sat} : conductivité hydraulique saturée, α_{vG} , n : paramètres d'ajustement de van Genuchten (1980). | 42 |
| Tableau 3.4 : Valeurs d'entrées, conditions aux limites et tailles de sondage (« poll size ») utilisées avec Nomad. Les données sont exprimées avec leur forme logarithmique (voir texte pour détails). | 54 |
| Tableau 3.5 : Valeurs d'entrées utilisées dans le processus d'optimisation de la CCE. Les limites supérieures et inférieures utilisées dans le logiciel Nomad sont aussi présentées. | 59 |
| Tableau 4.1 : Initial and calibrated material properties in the numerical simulations of the experimental waste rock pile. k_{sat} : <i>saturated hydraulic conductivity</i> , α_{vG} , n_{vG} : <i>van Genuchten (1980) fitting parameters</i> | 73 |
| Tableau 4.2 : Arrival times (in hours) after the beginning of test I-C in the FCL (0.8 m below the surface) and in the waste rock (1.4 m below the surface). The peak arrival time at 0.80 m depth is also compared. N/A : <i>not measured</i> | 75 |

LISTE DES FIGURES

- Figure 2.1 : (a) Déversement à la benne (*end-dumping*), et (b) épandage au butoir (*push dumping*) (tiré de de Bussière et al, 2015).....6
- Figure 2.2 : Coupe conceptuelle d’une halde à stériles. Les passages répétés de la machinerie lourde à la surface des bancs entraînent la formation de couches de matériaux fins compactés représentées en gris sur la figure. Le granoclassement dans les pentes (particules noires dans la figure) dépend de la méthode de déposition (voir texte pour détails) (tiré de Fala et al., 2005).....7
- Figure 2.3 : Courbe de rétention d’eau typique d’une roche stérile (bleu) et d’un sable (orange) (Bréard Lanoix et al., 2020; L-Bolduc, 2012). Les valeurs d’AEV et de ψ_r ont été déterminées ici au moyen de la méthode des tangentes. La zone I correspond à la zone saturée. La zone II est la zone de transition et la zone III correspond à la zone désaturée..... 11
- Figure 2.4 : Courbe de conductivité hydraulique typique d’une roche stérile (bleu) et d’un sable (orange) (Bréard Lanoix et al., 2020; L-Bolduc, 2012). La zone rouge indique la plage de succion pour laquelle la conductivité hydraulique du matériau grossier est plus faible que la conductivité hydraulique saturée du matériau fin. 14
- Figure 2.5: Roches stériles réactives (jaune) avec des CCE (marrons) intercalées déviant l’eau vers l’extérieur de la halde où des stériles non réactifs ont été placés (gris) (Michel Aubertin et al., 2005)..... 15
- Figure 2.6: Représentation schématique d’un recouvrement à effet de barrière capillaire avec une inclinaison. La longueur de déviation est la longueur LD. Le point DDL est représenté en rouge (tirée de Aubertin et al. (2009))..... 16
- Figure 2.7 : Localisation géographique de la mine du Lac Tio (Rio Tinto Fer et Titane), représenté en gris sur l’atlas (crédit RNCAN)..... 17
- Figure 2.8 : Halde expérimentale de la mine du lac Tio (crédit IRME). Les roches stériles sont recouvertes de matériaux fins dont le sable formant la couche de contrôle des écoulements et l’anorthosite concassée visible en gris clair. La pente est de 5%. La surface de la halde possède une berme sur le pourtour..... 18

| | |
|--|----|
| Figure 2.9 : Coupe transversale de la halde à stériles expérimentale de la mine du Lac Tio. Les stériles non réactifs sont représentés en bas de pente (tirée de Dubuc, 2018). | 19 |
| Figure 2.10: Camion-citerne utilisé pour les essais d'infiltration à grande échelle sur la halde expérimentale de la mine du lac Tio (crédit IRME)..... | 20 |
| Figure 2.11: Teneurs en eau volumique mesurées (bleu) et simulées (rouge) 50 cm sous la surface de la halde expérimentale pour la période du 6 juin au 9 septembre 2016. La zone bleue correspond à l'incertitude des sondes de teneurs en eau volumique ($\pm 0,03$;Decagon devices inc, 2017). Les précipitations sont également indiquées (tiré de Dubuc, 2018). | 22 |
| Figure 3.1 : Coupe transversale simplifiée de la halde à stériles expérimentale. Les positions des sondes de teneurs en eau volumique sont indiquées. | 27 |
| Figure 3.2 : Teneur en eau volumique mesurée à 0,80 m de profondeur entre le 4 avril 2016 et le 13 septembre 2017. Les précipitations sont présentées en bleu et les essais d'infiltration à grande échelle en rouge. | 28 |
| Figure 3.3 : Teneurs en eau volumique mesurées à 0,80 m de profondeur pour les sondes P1 à P6 placées dans le sable. Les précipitations sont représentées en bleu et les essais d'infiltration I-C et I-D en orange. Le test I-C a commencé le 7 juin 2016 à 20h ($t = 0$ j) et le test I-D le 14 juin ($t = 7$ j)..... | 29 |
| Figure 3.4 : Géométrie et maillage du modèle numérique de la halde expérimentale du Lac Tio réalisé avec le code HydroGeoSphere. Quatre conditions frontières ont été utilisées : (1) une condition de nappe à $z = 0$ m permettait de simuler la rétention d'eau dans les lysimètres; (2) une condition de Neumann à $x = 60$ m simulait la continuité de la pression, (3) une fonction de flux au sommet du modèle permettait de reproduire les précipitations et les essais d'infiltration et (4) une condition frontière imperméable appliquée aux faces $x = 0$ m, $y = 0$ m et $y = 10$ m..... | 30 |
| Figure 3.5 : Procédure générale de la méthode de calibration. La méthode comprend deux parties: (a) correspond aux traitements des mesures obtenues avec les sondes GS3. (b) représente la procédure de calibration automatisée et qui interagit entre le logiciel Nomad et le logiciel HydroGeoSphere. | 33 |

- Figure 3.6 : Exemple de l'application du filtre passe-bas sur la courbe de teneurs en eau volumique mesurées par la sonde P2 pendant les essais I-C et I-D : (a) Mesures brutes de teneurs en eau volumique, (b) décomposition fréquentielle et filtration à 0,5 j et (c) teneurs en eau volumique filtrée.35
- Figure 3.7: (a) Détermination des paramètres t_1 , t_2 appliqués au test I-C et I-D pour le capteur P5 dans le FCL à 0,80 m de profondeur. (b) t_a (heure d'arrivée) 1,30 m de profondeur pour l'essai I-C et I-D pour le capteur S5.36
- Figure 3.8 : Fonction de précipitations utilisées lors de la calibration du modèle numérique de la halde expérimentale. Le temps 0 correspond au 1er mai 2017. Les essais d'infiltrations I-C et I-D ont débuté respectivement le 7 juin 2017 et le 14 juin 2017.41
- Figure 3.9 : Illustration de la génération des points d'essais lors d'une itération de l'algorithme de Mads dans le cas où $\Delta km = \Delta kp = 0,5$. Le point rouge correspond à la valeur d'entrée itérée à l'itération k pour un problème d'itération dans \mathbb{R}^2 . Les points noirs correspondent aux valeurs d'essais proposés appartenant à l'ensemble P_k51
- Figure 4.1 : (a) Experimental waste rock pile at Lac Tio mine (credits: RIME) and (b) simplified cross section of the waste rock pile with instrumentation. The experimental pile was 70 m long and 10 m wide, with a maximal height of 7 m and a 5% slope (towards the bottom right of the picture). Waste rock (WR) was covered by a 0.7 m thick sand layer (SL) and a 0.3 m thick crushed anorthosite layer (CA). Locations of GS3 probes are shown with color points. A1-A6 sensors, (Black), P1-P6 sensors (red), and S1-S6 sensors (white) were placed 0.25 m, 0.80 m, and 1.30 m below the surface, respectively. Lysimeter positions (L1-L6; see text for details) are also shown.65
- Figure 4.2 : Measured volumetric water content 0.80 m below the surface and for different positions inside the experimental pile (see Figure 4.1 for the position of probes P1 to P6). Precipitations are represented in blue and the large infiltration tests I-C and I-D in grey. Time $t = 0$ d corresponds to the start of test I-C, i.e. June 7, 2017. Test I-D started at day 7, i.e. June 14, 2017.67
- Figure 4.3: (a) Volumetric water content variations measured at P2 (0.80 m below the surface; see Figure 4.1b for sensor location) during tests I-C and I-D (b) variation frequency with low pass

spectral filtration to remove periodic variation below 0.5 d (see text for details) and (c) filtered volumetric water content variations used to determine the arrival time of the wetting front. The same filter was applied to the other measurements.....68

Figure 4.4 : (a) Determination of parameters t_1 , t_2 for sensor P5 (0.80 m below the surface, in the FCL) during tests I-C and I-D; (b) determination of t_a (arrival time) for sensor S5 (1.40 m below the surface) during tests I-C and I-D.69

Figure 4.5 : The geometry of the conceptual model of the Lac Tio experimental waste rock pile used inside HydroGeoSphere. Four boundary conditions were used: (1) a water table condition at $z = 0$ m simulated water retention in the lysimeters; (2) a Neumann condition at $x = 60$ m simulated the continuity of the water flux, (3) a flux function at the top of the model reproduced the precipitations and the infiltration tests, and (4) an impermeable boundary condition applied to face $x = 0$ m, $y = 0$ m and $y = 10$ m.71

Figure 4.6 : Measured (dashed lines) and calibrated (solid lines) water retention curves of the waste rock (blue), FCL sand (green), and crushed anorthosite (red) in the experimental waste rock pile (Bréard Lanoix et al., 2020; Dubuc, 2018).74

Figure 4.7 : Measured (orange curve) and simulated (blue curve) volumetric water content 0.80 m below the surface after large scale infiltration tests I-C (day = 0) and I-D (day = 7).77

Figure 4.8: Simulated (blue) and measured (orange) cumulative water volumes leached at the bottom of the waste rock 7 days after test I-C. and 7 days after test I-D.78

Figure 4.9 : Simulated (blue) and measured (orange) volumetric water contents 0.80 m below the surface of the experimental waste rock pile between April 4, 2016 (day 0) and September 13, 2017 (day 523).80

Figure 4.10 : Measured and simulated volumetric water contents 0.80 m below the surface of the experimental waste rock pile during tests I-C and I-D for various calibrations. Calibration: calibration using all available sensors (also see previous sections). Calibration P1 + P6: calibration using sensors located above lysimeters L1 and L6 only. Water Flux: calibration based on the water outflow measured in the lysimeters.82

Figure 4.11 : Calibrated and optimized water retention curves of the materials.84

Figure 4.12: Volumetric water contents at 0.8 m obtained for the optimized hydrogeological properties. Time 0 corresponded to the start of test I-C.....85

Figure 4.13 : (a) Volumetric water contents at 0.8 m obtained for the optimized hydrogeological properties with the application of the precipitations of April 4, 2016, to September 13, 2017.
 (b) Cumulative water volume at each lysimeter after 17 months of simulations.....86

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

| | |
|-----------|---|
| 3D | 3 dimensions |
| AEV | Valeur d'entrée d'air (<i>Air Entry Value</i>) [L] |
| CCE | Couche de contrôle des écoulements |
| CEBC | Couverture avec effet de barrière capillaire |
| C_u | Coefficient d'uniformité [-] |
| D_{10} | Diamètre des grains correspondant à 10% passant [L] |
| D_{60} | Diamètre des grains correspondant à 60% passant [L] |
| DDL | Point ou zone dans une pente représentant la fin de l'effet de barrière capillaire dans une pente (<i>Down Dip Limit</i>) |
| DMA | Drainage minier acide |
| DNC | Drainage neutre contaminé |
| D_r | Densité relative des grains solides [-] |
| e_{sum} | Erreur quadratique moyenne [-] |
| f_c | Fréquence de coupure [T^{-1}] |
| g | Constante gravitationnelle (9,81 m ² /s) [$L.T^{-2}$] |
| GERAD | Groupe d'Études et de Recherche en Analyse des Décisions |
| GS3 | Sonde de teneur en eau volumique (Decagon Devices Inc.) |
| h | Charge hydraulique [L] |
| H | Fonction de transfert |
| i | Unité imaginaire |
| inf | Borne inférieure |
| IRME | Institut de Recherche en Mine et en Environnement |
| k_{sat} | Conductivité hydraulique saturée [$L.T^{-1}$] |

| | |
|---------------|--|
| k_u | Conductivité hydraulique relative [-] |
| L_D | Longueur du bris capillaire [L] |
| m_{VG} | Paramètre d'ajustement du modèle de Van Genuchten [-] |
| n_{VG} | Paramètre d'ajustement du modèle de Van Genuchten [-] |
| P | Pression [$M.L^{-1}.T^{-2}$] |
| pH | Potentiel hydrogène |
| p_i | Paramètre de calibration |
| p_i^* | Paramètre de calibration |
| q | Vitesse de Darcy [$L.T^{-1}$] |
| Q | Débits [$L^3.T^{-1}$] |
| \mathbb{R} | Ensemble des nombres réels |
| t | Temps [T] |
| t_1 | Paramètres de calibration [T] |
| t_2 | Paramètres de calibration [T] |
| t_a | Paramètres de calibration [T] |
| WEV | Valeur d'entrée d'eau (<i>Water Entry Value</i>) [L] |
| z | Profondeur [L] |
| ∇ | Gradient |
| Δ | Laplacien |
| α_{VG} | Paramètre d'ajustement du modèle de Van Genuchten [-] |
| θ | Teneur en eau volumique [-] |
| θ_e | Teneur en eau volumique équivalente [-] |
| θ_r | Teneur en eau volumique résiduelle [-] |
| θ_s | Teneur en eau volumique saturée [-] |

| | |
|------------|---|
| π | Nombre π |
| ρ | Masse volumique [M.L ⁻³] |
| ν | Viscosité cinématique [L.T ⁻²] |
| ψ | Succion [M.L ⁻¹ .T ⁻²] |
| ψ_a | Pression d'entrée d'air [M.L ⁻¹ .T ⁻²] |
| ψ_r | Succion résiduelle [M.L ⁻¹ .T ⁻²] |
| ω | Pulsation [-] |
| ω_c | Pulsation de coupure [-] |

LISTE DES ANNEXES

| | | |
|----------|--|-----|
| Annexe A | Code Python utilisé lors de la calibration de la simulation numérique..... | 119 |
|----------|--|-----|

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

1.1 Contexte

Le Québec possède un secteur minier important comptant une soixantaine de projets en cours et en développement, et représentant un cinquième de la production minière du Canada (Ministère de l'Énergie et des Ressources Naturelles, 2017). Les impacts environnementaux de l'extraction, de la production et de la transformation minières sont toutefois importants et les grandes quantités de rejets produites présentent des défis majeurs pour leur gestion à court et à long terme (Michel Aubertin et al., 2016).

L'exploitation minière produit notamment de grands volumes de roches stériles, extraites par forage et sautage afin d'accéder aux zones minéralisées (McLemore et al., 2009). Les roches stériles sont généralement stockées dans des haldes en surface. Leur taille et leur forme sont variables et dépendent de plusieurs facteurs tels que la minéralogie des roches, le type d'exploitation minière ou encore de la méthode de construction des haldes à stériles (Michel Aubertin et al., 2005; McLemore et al., 2009; Smith et al., 1995). Ces structures sont ainsi exposées aux conditions atmosphériques. L'exposition des sulfures (souvent contenus dans les roches stériles) à l'eau et à l'oxygène peut entraîner la formation de drainage minier acide (DMA, caractérisé par un pH bas et des concentrations élevées de sulfates et de métaux dissous ; Akcil et Koldas 2006) ou de drainage neutre contaminé (DNC, caractérisé par un pH proche de la neutralité, avec des concentrations élevées en métaux et métalloïdes comme As, Co, Ni et Zn ; Plante et al. 2010).

Les approches conventionnelles de gestion et de restauration des haldes à stériles pour empêcher la génération de DMA ou de DNC reposent généralement sur la mise en place de couvertures permettant de contrôler les flux d'oxygène et/ou d'eau (Michel Aubertin et al., 2016). Ces recouvrements, comme les couvertures à effets de barrière capillaire (CEBC; Aubertin et al. 2009) ou la méthode de la nappe surélevée associée à une couverture monocouche (Michel Aubertin et al., 2016; Pabst et al., 2017) peuvent être efficaces pour restaurer des parcs à résidus. Ces approches sont, cependant, peut adaptées à la restauration des haldes à stériles, notamment à cause de la granulométrie et de la faible rétention capillaire des roches stériles, de la taille et de l'hétérogénéité des empilements, des fortes pentes (proches de l'angle de repos des stériles) et des écoulements hydrogéologiques préférentiels (Aubertin et al. 2013, 2015).

Une nouvelle approche de déposition a donc été proposée afin de contrôler la stabilité géochimique et géotechnique des haldes à stériles pendant leur construction et après la fermeture (Michel Aubertin et al., 2016; Broda et al., 2017; Fala et al., 2005). L'objectif de cette méthode est de construire une couverture composée de matériaux fins à la surface des bancs de la halde et qui a pour objectif de dévier l'eau latéralement par les effets de barrière capillaire, diminuant ainsi l'infiltration dans les roches stériles réactives (Michel Aubertin et al., 2016; Broda et al., 2017; B Bussière, 1999; Fala et al., 2005). On parle alors de couche de contrôle des écoulements ou CCE. La CCE est généralement inclinée d'environ 5% afin de créer un effet de pente favorisant la déviation de l'eau d'infiltration vers l'extérieur de la halde (M Aubertin et al., 2013; Broda et al., 2017). Cette méthode répond aux objectifs de « construction pour la fermeture » (ou « Designing for Closure » en anglais), car elle vise à prévenir la contamination et à préparer la restauration progressive de la halde pendant la période d'activité de la mine (M Aubertin et al., 2013, 2015; Michel Aubertin, Bussière, Bernier, et al., 2002). Plus d'informations sur le concept de la CCE sont fournies dans le chapitre 2 de ce mémoire.

Une halde expérimentale a été construite à la mine du Lac Tio (Rio Tinto Fer et Titane, Québec, Canada) afin d'étudier le comportement hydrogéologique d'une CCE proche des conditions réelles de terrain (Bréard Lanoix et al., 2020; Dimech et al., 2019; Dubuc et al., 2017; Martin et al., 2017). Différentes études y ont été menées au cours des dernières années, et en particulier des essais d'infiltration à grandes échelles (Dubuc, 2018). Ces travaux ont permis de mieux comprendre le comportement d'une CCE et d'en optimiser la conception. Les résultats expérimentaux ont ainsi été utilisés notamment pour calibrer des simulations numériques et évaluer l'effet des propriétés des matériaux, de la pente et de l'épaisseur de la CCE.

Les simulations numériques sont utiles pour comprendre un système hydrogéologique, faire varier les propriétés hydrogéologiques et spatiales des matériaux, ainsi que pour étudier l'effet des changements climatiques sur son comportement (Carrera et al., 2005; He et al., 2013). Les simulations numériques doivent, dans un premier temps, être calibrées. La calibration correspond à un problème inverse, ce qui signifie que l'objectif est de retrouver les propriétés hydrogéologiques en place afin de reproduire les observations (Carrera et al., 2005; Zhou et al., 2014). Elle peut aussi être vue comme un problème d'optimisation dont le but est de minimiser l'écart entre les données mesurées et les prédictions en variant la valeur des propriétés recherchées (Carrera et al., 2005). La résolution d'un problème inverse peut s'avérer complexe, car il dépend

de la qualité et de la représentativité des mesures effectuées. De plus, la calibration est un processus bien documenté en hydrogéologie saturée, mais beaucoup moins en hydrogéologie non saturée (Emsellem et De Marsily 1971, Zhou et al. 2014). Plusieurs méthodes de calibration automatique ont été proposées afin de déterminer les propriétés hydrogéologiques non saturées des matériaux (comme la courbe de rétention d'eau et la fonction de perméabilité; Abbaspour et al. 2001, Trinchero et al. 2011) en utilisant l'approche de Monte Carlo, des algorithmes génétiques ou des approches heuristiques (Newton, méthode du gradient). Ces méthodes utilisent généralement un critère subjectif ou objectif (par exemple la racine de la moyenne quadratique) pour calibrer les paramètres hydrogéologiques aux données expérimentales (He et al., 2013; Zhou et al., 2014). Les erreurs aléatoires de mesures peuvent affecter la qualité de la calibration et donc introduire des erreurs sur les propriétés calibrées (Carrera et al., 2005; He et al., 2013). De plus, la nature stochastique de certaines calibrations (Monte Carlo notamment), ou la nécessité de la dérivée pour d'autres utilisant la méthode du gradient, requièrent un nombre important d'évaluations de fonction, se traduisant alors par des temps de calcul parfois très longs.

1.2 Objectifs

L'objectif principal de ce projet était donc de proposer une nouvelle méthode de calibration automatisée des propriétés hydrogéologiques d'un système de restauration en conditions non saturées et de l'appliquer au cas de la halde à stériles expérimentale de la mine du Lac Tio. La méthode proposée devait notamment pouvoir traiter des données de calibration bruitées et maintenir un nombre d'itérations raisonnable afin de pouvoir réaliser les simulations, réalisées par le logiciel HydroGeoSpere (Aquanty), dans un temps réaliste en utilisant un logiciel d'optimisation de boîte noire (Nomad).

Les objectifs spécifiques étaient ainsi de :

- Extraire à partir des données mesurées trois paramètres caractéristiques de la réponse du système qui soient peu sensibles aux bruits et aux autres perturbations et facilement calculables.
- Calibrer les simulations numériques sur une courte période de temps (deux essais d'infiltrations à grandes échelles contrôlés) et les valider sur une période de 17 mois.

- Développer un code de communication entre HydroGeoSphere et Nomad.
- Appliquer une approche d'optimisation par boîte noire afin de minimiser l'écart entre le comportement hydrogéologique simulé et les résultats mesurés.
- Appliquer la nouvelle approche automatisée développée à la détermination des propriétés hydrogéologiques optimales afin de maximiser l'efficacité d'une CCE à la mine du Lac Tio.

1.3 Contenu du mémoire

Ce mémoire comporte 5 chapitres. La revue de littérature (chapitre 2) aborde les concepts théoriques en lien avec l'hydrogéologie saturée et non saturée, les méthodes de restauration des haldes à stériles et le concept de CCE ainsi que les méthodes inverses de calibration. Le chapitre 3 (méthodologie) présente les simulations numériques utilisées dans cette étude, le traitement des données et la méthode de calibration développée. Le chapitre suivant présente l'article intitulé « An automated approach to calibrate numerical simulations and optimize cover design: application to a flow control layer constructed on an experimental waste rock pile. » et soumis à la revue Vadose Zone Journal. Les principaux résultats y sont détaillés et discutés. Enfin, ce mémoire se conclut par un chapitre de synthèse, conclusions et recommandations.

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

2.1 Haldes à stériles

2.1.1 Propriétés des roches stériles

Les roches stériles sont extraites lors de l'exploitation minière afin d'accéder aux zones minéralisées à valeur économique, et représentent jusqu'à 60% des volumes extraits dans une exploitation à ciel ouvert (Michel Aubertin et al., 2005; Michel Aubertin, Bussière, Bernier, et al., 2002).

Les roches stériles sont des matériaux hétérogènes avec une granulométrie étalée allant de la taille du silt aux blocs (M Aubertin et al., 2013; Lahmira et al., 2016; Anna Peregoedova, 2012). Elles sont généralement caractérisées par un D_{10} (diamètre des grains du 10% passant sur la courbe granulométrique) compris entre 0,2 mm et 80 mm (Anna Peregoedova, 2012) et un coefficient d'uniformité C_u ($= D_{60}/D_{10}$) pouvant dépasser 30 (Gamache-Rochette, 2004; Smith et al., 1995). La conductivité hydraulique des roches stériles est influencée par leur granulométrie étalée (Gamache-Rochette, 2004; Anna Peregoedova et al., 2013; Smith et al., 1995) et est généralement comprise entre 1×10^{-1} m/s et 1×10^{-3} m/s (Martin et al., 2005; Anna Peregoedova, 2012; Smith et al., 1995). La composition minéralogique des roches stériles est fonction de la zone d'exploitation. La densité relative des grains solides est aussi variable et généralement comprise entre 2,5 et 4,5 (M Aubertin et al., 2013; Michel Aubertin et al., 2005; Martin et al., 2005; Anna Peregoedova, 2012).

2.1.2 Haldes à stériles

Les roches stériles sont généralement entreposées en surface et à proximité des opérations de production, dans des haldes (Michel Aubertin, Bussière, Bernier, et al., 2002). Ces haldes peuvent couvrir une surface importante (dépassant parfois une centaine d'hectares) autour des sites d'extraction minière et atteindre des hauteurs de plus de 100 m (McCarter 1990, Hawley et Cuning 2017). La topographie du site, les écoulements hydrogéologiques régionaux, les contraintes opérationnelles et le climat local influencent la méthode d'entreposage, la hauteur et la

pente des haldes à stériles (Hawley et Cuning 2017). Quatre méthodes de construction des haldes sont principalement utilisées dans l'industrie minière (M Aubertin et al., 2015). Le déversement à la benne (*end-dumping*) et l'épandage au butoir (*push-dumping*) consistent à déverser les roches stériles dans les pentes (Figure 2.1). Ces deux méthodes entraînent un granoclassement important (Michel Aubertin, Fala, et al., 2002; Fala et al., 2003) : les blocs et matériaux grossiers tendent à s'accumuler en bas de pente, tandis que les particules plus fines restent en haut de pente, près du point de déposition (Smith et al. 1995, Hawley et Cuning 2017). Le déversement à la benne avec régalage (*free dumping*) favorise une meilleure uniformité des roches stériles dans les haldes. Les camions-bennes déversent les roches stériles à la surface de la halde afin de former une couche uniforme par nivellement et compaction. Cette méthode permet également d'augmenter la densité en place. La mise en place par pelle à benne trainante (*drag-line*) entraîne une faible ségrégation avec une faible densité en place à l'intérieur des haldes à stériles (Michel Aubertin, Fala, et al., 2002; Brawner, 1986; Fala et al., 2005), mais est principalement utilisées dans les mines de charbon et de très grandes tailles (Brawner, 1986).



Figure 2.1 : (a) Déversement à la benne (*end-dumping*), et (b) épandage au butoir (*push dumping*) (tiré de de Bussière et al, 2015)

Le passage répété des véhicules miniers à la surface des haldes entraîne la formation de couches de matériaux fins compactés (Aubertin 2013; Figure 2.2). Cette structure interne influence le comportement hydrogéologique et la stabilité géotechnique et géochimique des haldes à stériles (Martin 2003, Aubertin 2015). Le contraste des propriétés hydrogéologiques entre les roches

stériles grossières et lâches ainsi que les couches de matériaux fins compactés peuvent ainsi contribuer à créer des effets de barrières capillaires (Figure 2.2) favorisant les écoulements préférentiels (Broda et al., 2014; Fala, 2003).

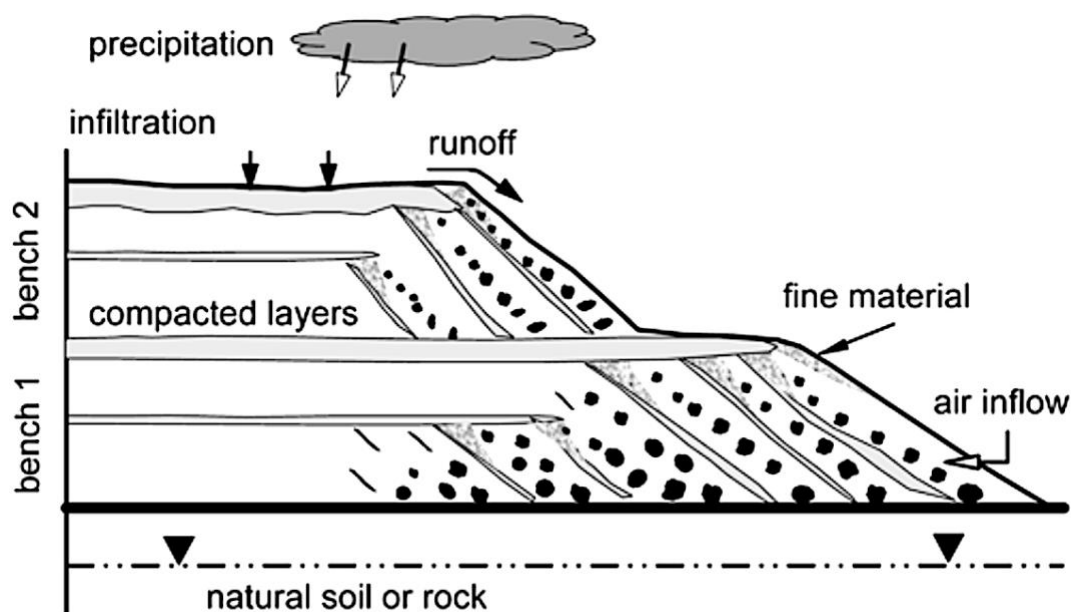
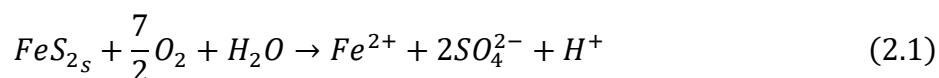


Figure 2.2 : Coupe conceptuelle d'une halde à stériles. Les passages répétés de la machinerie lourde à la surface des bancs entraînent la formation de couches de matériaux fins compactés représentées en gris sur la figure. Le granoclasement dans les pentes (particules noires dans la figure) dépend de la méthode de déposition (voir texte pour détails) (tiré de Fala et al., 2005).

2.2 Drainage minier contaminé

Les roches stériles exposées aux conditions atmosphériques sont soumises à l'infiltration de l'eau et de l'oxygène (Lefebvre et Gélinais 1995, Aubertin et al. 2005). Certains sulfures comme la pyrite ou la pyrrhotite souvent présente dans les roches stériles, peuvent s'oxyder et générer du drainage minier acide ou DMA (Aubertin et al. 2002a; Blowes et al., 2013). Le DMA est caractérisé par des concentrations élevées en métaux et métalloïdes et un pH faible (< 5) (Aubertin et al. 2002b, Johnson et Hallberg 2005, Akcil et Koldas 2006, Amos et al. 2015).

L'équation d'oxydation directe de la pyrite par l'oxygène est la suivante (Johnson et Hallberg 2005, Akcil et Koldas 2006):



En présence de minéraux neutralisants, comme les carbonates, l'acide produit peut-être tamponné et le pH rester proche de la neutralité. Les concentrations de certains métaux mobiles à pH neutre peuvent cependant rester élevées et on parle alors de drainage neutre contaminé (DNC) (Benzaazoua et al., 2013; Plante et al., 2010).

L'équation de neutralisation de l'acide sulfurique par les carbonates peut s'écrire (Blowes et al., 2003) :



Le DNC peut aussi être produit lors de l'oxydation de certains minéraux sulfureux non générateurs d'acide, tel que la sphalérite, galène (Plante et al., 2011).

La génération de DMA et de DNC constitue encore aujourd'hui l'un des principaux défis environnementaux pour l'industrie minière (Michel Aubertin et al., 2016).

2.3 Restauration minière

La restauration minière consiste à limiter les réactions d'oxydation des minéraux sulfureux dans le but de diminuer l'impact des drainages miniers (DMA ou DNC) sur l'environnement à long terme (M Aubertin et al., 2015; Michel Aubertin, Bussière, Bernier, et al., 2002). Plusieurs méthodes ont ainsi été développées ces dernières années dans le but d'améliorer la gestion des rejets miniers pendant les cycles d'opérations minières (« designing for closure ») (Michel Aubertin, Bussière, Bernier, et al., 2002). Les méthodes de restauration minière se basent sur la limitation des flux d'oxygène et/ou d'eau dont le but est de réduire les réactions d'oxydations dans les rejets miniers. Différentes méthodes de recouvrement sont utilisées pour limiter l'infiltration de l'eau et/ou de l'air par l'installation de barrière à l'oxygène et/ou barrière à l'eau ou en contrôlant la consommation d'oxygène par des interactions chimiques. Par exemple, la couverture à effet de barrière capillaire (CEBC) et la méthode de la nappe surélevée sont fréquemment utilisées afin de limiter le drainage minier acide à l'intérieur des résidus miniers (Bruno Bussière et al., 2003; Pabst

et al., 2017; Rey et al., 2020). Ces deux approches ont montré leurs efficacités au cours du temps et sont bien documentées dans la littérature scientifique. Cependant, la restauration minière reste complexe pour les roches stériles. Plusieurs méthodes sont en développement mais les roches à stériles représentent un volume important limitant l'utilisation d'une seule et unique méthode (Demers et al., 2013; Fala et al., 2005). Le choix d'une méthode de restauration est soumis à différentes contraintes reposant sur le type de climat, les propriétés chimiques et géotechniques des roches à stériles, les matériaux disponibles, les coûts et les conditions géologiques et hydrogéologiques (Michel Aubertin et al., 2016). Les bilans d'eau et les comportements hydrogéologiques sont importants afin d'appliquer une méthode de restauration minière dans les roches stériles.

2.4 Écoulement en milieux poreux

2.4.1 Écoulement saturé

L'écoulement d'un fluide entre deux points correspond à un transfert d'énergie entre un point de charge élevée et un point de charge plus faible. Si le fluide est incompressible et non visqueux, alors le bilan d'énergie du fluide, dans un régime laminaire, peut être décrit par l'équation de Bernouilli (Hillel, 1998):

$$h(x, y, z) = z + \frac{P}{\rho g} + \frac{v^2}{2g} \quad (2.3)$$

Où h est la charge hydraulique $[L]$, z est l'élévation relative $[L]$, P est la pression $[M.L^{-1}.T^{-2}]$, ρ est la masse volumique du fluide $[M.L^{-3}]$, g est l'accélération gravitationnelle $[L.T^{-2}]$, v est la vitesse d'écoulement du fluide $[L.T^{-1}]$.

L'écoulement laminaire d'un fluide incompressible non visqueux en une dimension dans un milieu poreux saturé, incompressible et isotrope peut être décrit par la loi de Darcy (Hillel, 1998):

$$\vec{q} = -k_{sat} \vec{i} \quad (2.4)$$

Où q est la vitesse de Darcy $[L.T^{-1}]$, $k_{w,sat}$ est la conductivité hydraulique saturée $[L.T^{-1}]$, i est le gradient hydraulique $[-]$.

La loi de Darcy peut être généralisée en trois dimensions :

$$Q = -k_{sat} \nabla h \quad (2.5)$$

Avec $k_{sat} = \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{yx} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{zx} & k_{zy} & k_{zz} \end{bmatrix}$, et $\nabla h = \begin{bmatrix} \frac{\partial h}{\partial x} \\ \frac{\partial h}{\partial y} \\ \frac{\partial h}{\partial z} \end{bmatrix}$, où Q est le débit $[L^3.T^{-1}]$.

La matrice k_{sat} est définie positive et symétrique (Hillel, 1998). Dans le cas d'un matériau poreux isotrope et homogène, la matrice k_{sat} est diagonale et $k_{xx}=k_{yy}=k_{zz}$.

2.5 Écoulement non saturé dans un milieu poreux

2.5.1 Équation de Richards

La loi de Darcy peut être généralisée pour les milieux non saturés et la conductivité hydraulique devient alors fonction de la succion ψ (Hillel, 1980) :

$$q = -k(\psi) \nabla h \quad (2.6)$$

Où q est la vitesse de Darcy $[L.T^{-1}]$, $k(\psi)$ est la conductivité hydraulique (non saturée) à la succion ψ $[L.T^{-1}]$.

L'introduction de l'équation de Darcy généralisée à l'intérieur de l'équation de conservation de la masse permet d'obtenir la loi de Richards (Hillel, 1980; Warrick, 2003):

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla(k \nabla h) \quad (2.7)$$

La forme développée de l'équation 2.7 dans un référentiel cartésien et pour un milieu poreux non saturé peut s'écrire (Hillel, 1998).

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_x(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + \frac{\partial k_z(\psi)}{\partial z} \quad (2.8)$$

La résolution de l'équation de Richards nécessite la détermination de la fonction de perméabilité $k(\psi)$ qui est généralement obtenue à partir de la courbe de rétention d'eau (CRE).

2.5.2 Courbe de rétention d'eau

La courbe de rétention d'eau est la fonction qui décrit l'évolution de la teneur en eau volumique (θ [-]) en fonction de la succion (ψ [L]) (Figure 2.3). L'AEV ou ψ_a (pour Air Entry Value, ou pression d'entrée d'air) correspond à la succion à laquelle un matériau commence à se désaturer. La pression d'entrée d'eau ψ_r (ou WEV pour Water Entry Value, lorsque les effets d'hystérésis sont négligés) (Figure 2.3) correspond à la succion à laquelle le matériau atteint sa teneur en eau volumique résiduelle (Fredlund et Anqing 1994). Ces deux valeurs sont généralement obtenues par la méthode graphique des tangentes (Hillel, 1998). La courbe de rétention d'eau dépend du type de matériaux et de la distribution de la taille des pores (M. Aubertin et al., 2003; D G Fredlund et al., 1994).

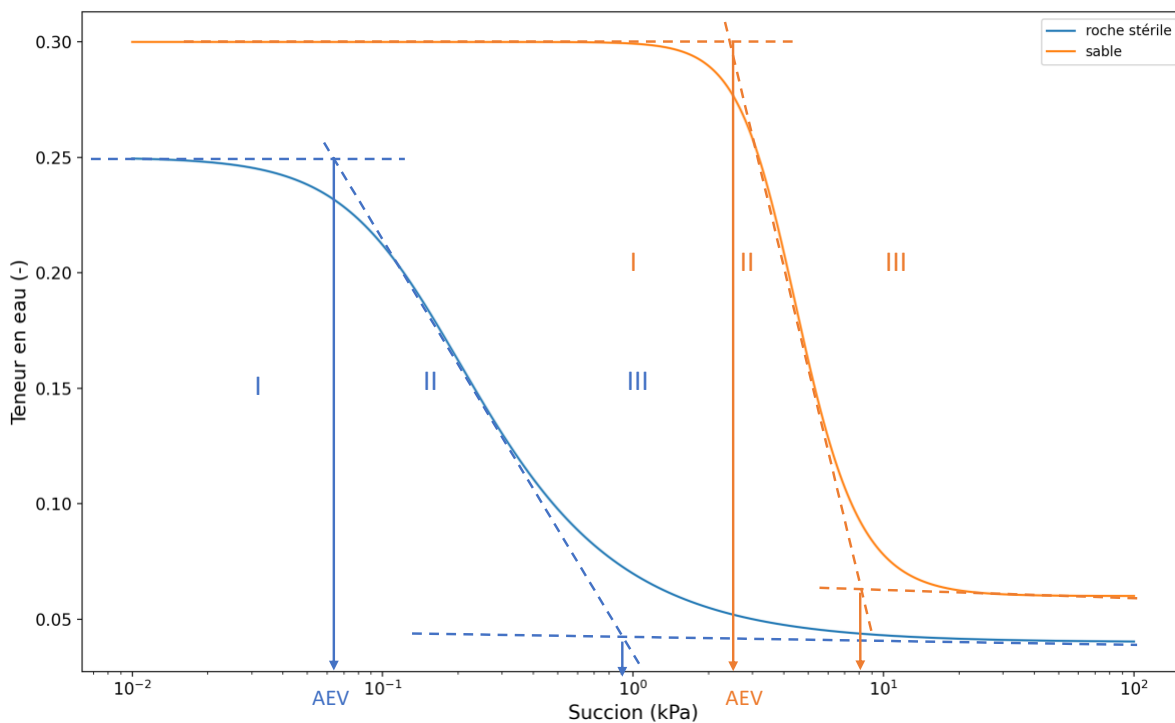


Figure 2.3 : Courbe de rétention d'eau typique d'une roche stérile (bleu) et d'un sable (orange) (Bréard Lanoix et al., 2020; L-Bolduc, 2012). Les valeurs d'AEV et de ψ_r ont été déterminées ici au moyen de la méthode des tangentes. La zone I correspond à la zone saturée. La zone II est la zone de transition et la zone III correspond à la zone désaturée.

Plusieurs modèles analytiques ont été proposés afin de décrire la courbe de rétention d'eau d'un matériau granulaire (van Genuchten 1980, Fredlund et Xing 1994). Le modèle le plus souvent employé est celui de van Genuchten (1980) :

$$\theta = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{(1 + (\alpha_{VG}\psi)^{n_{VG}})^{m_{VG}}} \quad (2.9)$$

Avec $\alpha_{VG} [L^{-1}]$, n_{VG} et m_{VG} les constantes d'ajustement du modèle descriptif, θ_s est la teneur en eau volumique à saturation et θ_r est la teneur en eau volumique résiduelle.

Des modèles prédictifs basés sur les propriétés granulométriques ont été aussi développés afin de prédire la courbe de rétention d'eau des matériaux non saturés (Fetter, 2018; Pham et al., 2005), comme le modèle Kovacs-modifié (MK) (M. Aubertin et al., 2003) ou le modèle de Fredlund (M. D. Fredlund et al., 2002, 1997).

2.5.3 Fonction de la conductivité hydraulique

La conductivité hydraulique non saturée est fonction de la succion à l'intérieur d'un matériau poreux. La fonction de conductivité hydraulique peut être mesurée (Naseri et al., 2019; A Peregoedova et al., 2014) mais est le plus souvent déterminée par des modèles empiriques ou statistiques. Les modèles empiriques sont généralement peu représentatifs de la réalité. Les fonctions utilisées sont simples et se basent généralement sur peu de paramètres (nombre de sorption, ou paramètre d'ajustement) (Hollenbeck et Jensen 1998, Abbaspour et al. 2001, Moosavi et Sepaskhah 2013). Les modèles statistiques permettent d'obtenir la courbe de conductivité hydraulique à partir de la courbe de rétention d'eau. Les modèles sont basés sur les hypothèses de Child et Collis-George (Fredlund et Rahardjo 1993): (1) l'écoulement suit les pores interconnectés, (2) les pores suivent une distribution aléatoire, (3) l'écoulement suit la loi de Hagen-Poiseuille. Le modèle le plus fréquemment utilisé est le modèle de Van Genuchten (1980) – Mualem (1976) définie à partir de la courbe de rétention d'eau (Fredlund et al. 1994, Chapuis et Aubertin 2003):

$$k_u = k_{sat} \theta_e^{\frac{1}{2}} \left[1 - \left(1 - \theta_e^{\frac{1}{m_{VG}}} \right)^{m_{VG}} \right]^2 \quad (2.10)$$

$$\theta_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad (2.11)$$

Où θ_e est la teneur en eau volumique réduite [-].

2.5.4 Effets de barrière capillaire

Un effet de barrière capillaire peut se créer lorsqu'un matériau fin est placé au-dessus d'un sol matériau grossier (Morel-Seytoux 1992, Bussière 1999, Aubertin et al. 2009). L'effet de barrière capillaire sera plus ou moins prononcé selon le contraste de propriétés hydriques entre les deux matériaux (Figure 2.3). À saturation, le matériau grossier possède une conductivité hydraulique saturée supérieure que celle du matériau granulaire fin. La conductivité hydraulique du matériau granulaire fin devient ensuite supérieure jusqu'à atteindre la fin de la zone de transition du matériau granulaire fin (Figure 2.4). L'eau est alors retenue dans le matériau fin jusqu'à l'atteinte de la pression d'entrée d'air du matériau grossier sous-jacent, appelé effet de bris capillaire. L'eau s'infiltre ensuite verticalement lorsque la pression devient supérieure à la valeur de WEV du matériau grossier.

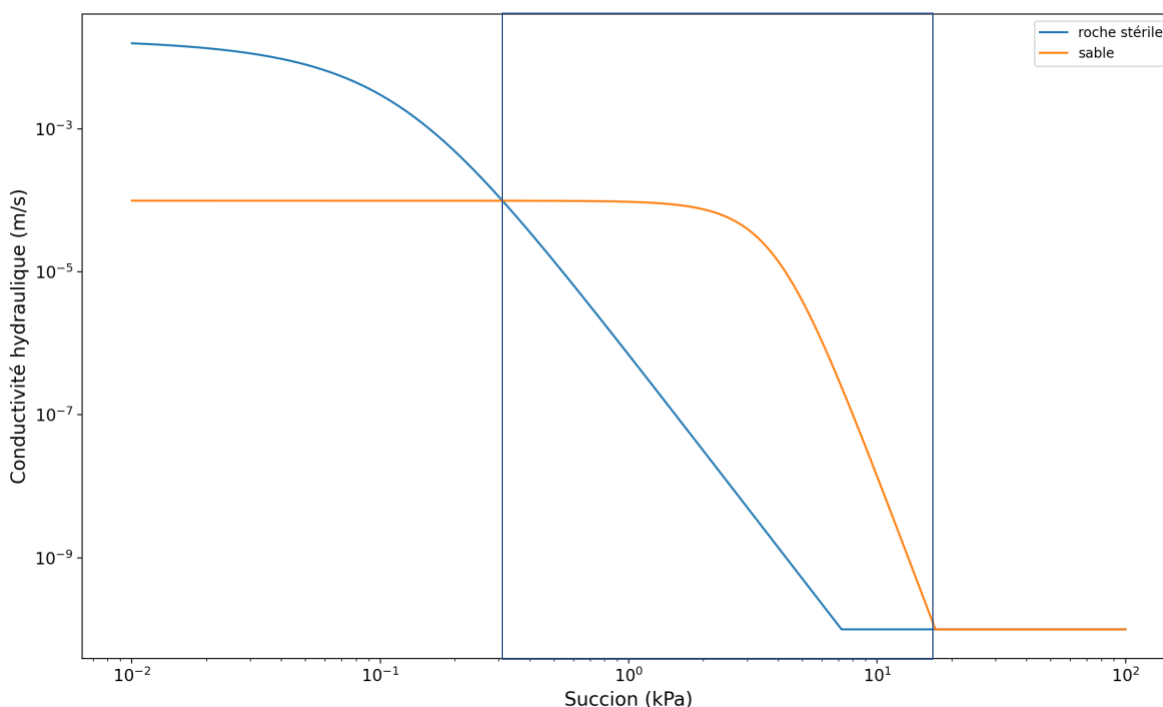


Figure 2.4 : Courbe de conductivité hydraulique typique d'une roche stérile (bleu) et d'un sable (orange) (Bréard Lanoix et al., 2020; L-Bolduc, 2012). La zone rouge indique la plage de succion pour laquelle la conductivité hydraulique du matériau grossier est plus faible que la conductivité hydraulique saturée du matériau fin.

2.5.5 Méthode de la couche de contrôle des écoulements (CCE)

Une nouvelle méthode pour contrôler l'infiltration de l'eau a été proposée afin d'améliorer la stabilité géochimique et géotechnique des haldes à stériles pendant leur construction et après la fermeture de la mine (Aubertin et al. 2002a; 2013; Fala et al. 2005). Cette approche consiste à construire une couche de contrôle des écoulements (CCE) au sommet des bancs composant la halde à stériles (Figure 2.5). Cette CCE est généralement constituée de matériaux granulaires fins relativement compactés, comme du sable ou des stériles concassés, afin de développer un effet de barrière capillaire avec les stériles sous-jacent (Figure 2.5; voir aussi section 2.5.6) et ainsi limiter l'infiltration vers le bas (Ross 1990; Bussière 1999; Dawood et Aubertin 2014). La CCE doit avoir une certaine inclinaison (généralement autour de 5%; (Broda et al., 2014; B Bussière, 1999) vers l'extérieur de la halde afin de dévier latéralement l'eau, et l'empêcher de rentrer en contact avec les

roches stériles potentiellement génératrices de DMA/DNC (Michel Aubertin et al., 2016; Michel Aubertin, Bussière, & Berner, 2002).

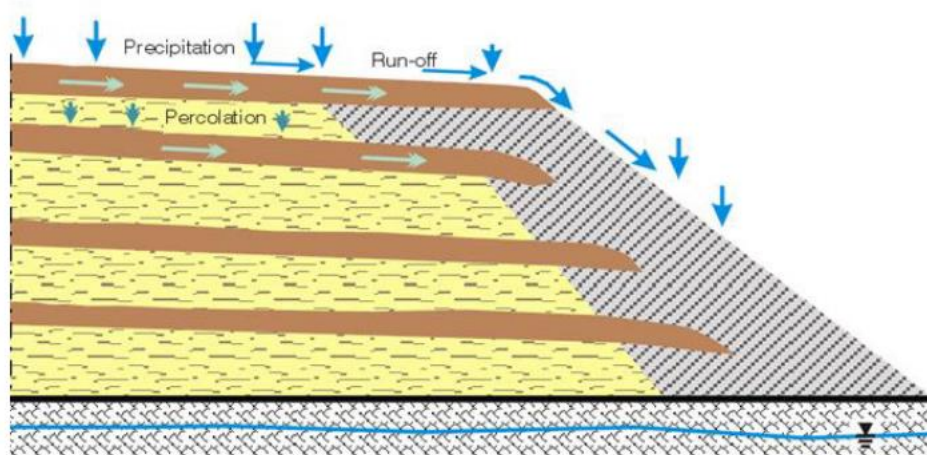


Figure 2.5: Roches stériles réactives (jaune) avec des CCE (marrons) intercalées déviant l'eau vers l'extérieur de la halde où des stériles non réactifs ont été placés (gris) (Michel Aubertin et al., 2005).

2.5.6 Effet de pente

Un effet de barrière capillaire à l'interface entre deux matériaux en pente peut contribuer à dévier latéralement l'eau d'infiltration (Bruno Bussière, 2001; Fala et al., 2005; Ross, 1990). La vitesse et la quantité d'eau déviée dépendent de l'angle d'inclinaison, des propriétés des matériaux, de l'épaisseur et des précipitations. L'eau déviée s'accumule progressivement vers le bas de la pente, augmentant ainsi la pression à l'interface. Lorsque la pression atteint le WEV du matériau sous-jacents, l'eau commence à s'infiltrer verticalement (Bussière 1999, Aubertin et al. 2009, Dawood et Aubertin 2014). Ce point est appelé le « Down Dip Limit » (DDL) (Figure 2.6) et la distance entre le sommet de la pente et le DDL est appelée longueur de déviation (ou L_D). En pratique, le point DDL se définit plutôt comme une zone de transition correspondant à l'augmentation de la pression jusqu'au dépassement du WEV dans le matériau grossier (Dawood et Aubertin 2014, Broda et al. 2017).

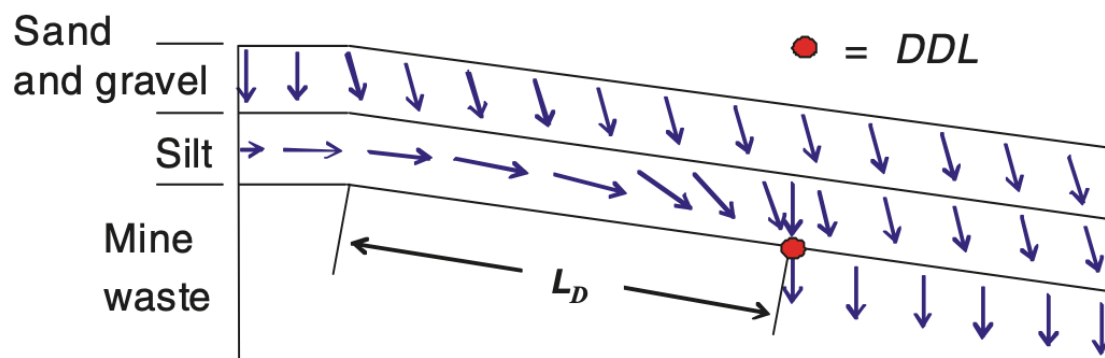
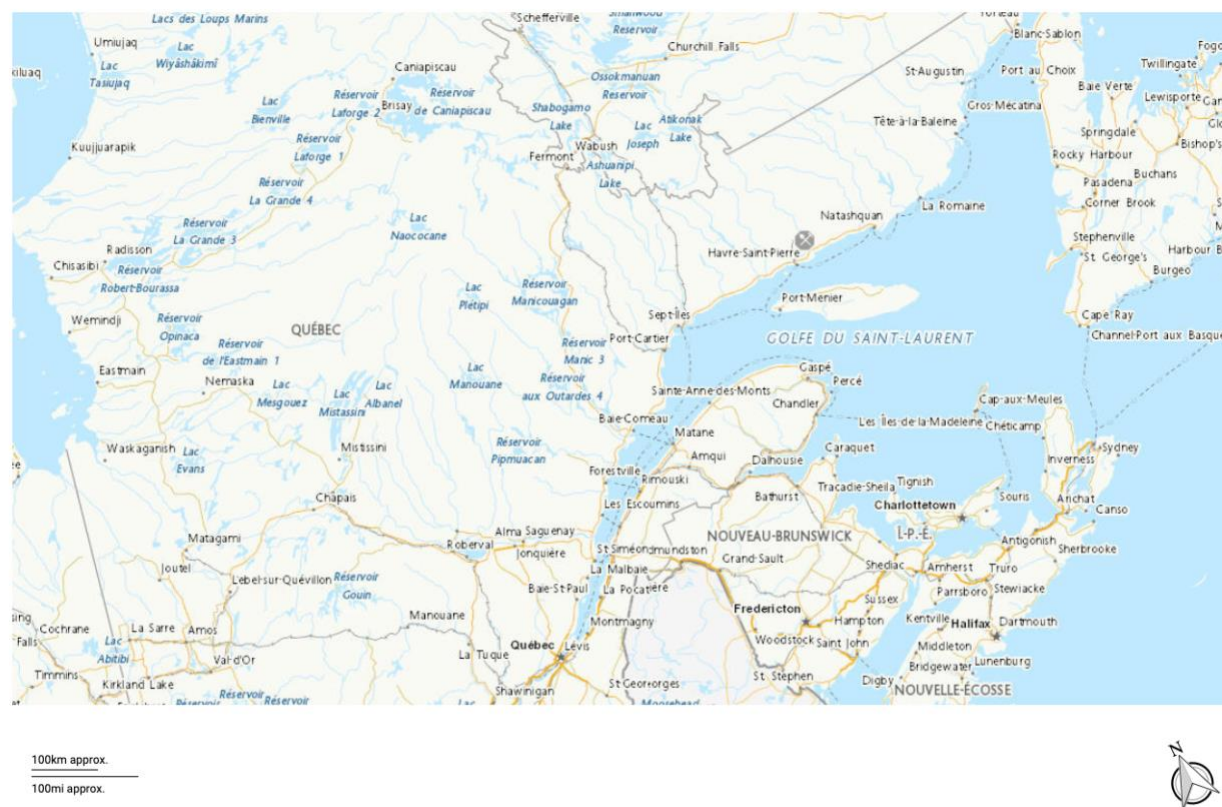


Figure 2.6: Représentation schématique d'un recouvrement à effet de barrière capillaire avec une inclinaison. La longueur de déviation est la longueur L_D . Le point DDL est représenté en rouge (tirée de Aubertin et al. (2009)).

2.6 Halde expérimentale de la mine du Lac Tio

2.6.1 Contexte

Une halde expérimentale a été construite et instrumentée à la mine du Lac Tio (Rio Tinto Fer et Titane, Québec, Canada) pour évaluer la performance de la CCE à grande échelle et en conditions réelles (Martin et al., 2017, 2019). La mine du Lac Tio est située à 43 km au nord-est de la ville de Havre-Saint-Pierre, Québec (Figure 2.7). L'exploitation minière est en activité depuis les années 1950 sur le gisement d'hémo-ilménite massif le plus important au monde (Rio Tinto, 2017). Les roches stériles de la mine Tio sont riches en hémo-ilménites (Benzaazoua et al., 2013; Lessard, 2011; Plante et al., 2010) et ont été caractérisées comme génératrices de DNC (Plante et al., 2010). Une partie des roches stériles sont toutefois non réactives provenant des roches composées d'anorthosite. Les propriétés hydrogéologiques des roches stériles ont été étudiées *in situ* (Benzaazoua et al., 2013; Lessard, 2011) et au laboratoire (A Peregoedova et al., 2014; Anna Peregoedova et al., 2013).



L'Atlas du Canada - © Sa Majesté la Reine du chef du Canada, représentée par le ministre de Ressources naturelles Canada

Figure 2.7 : Localisation géographique de la mine du Lac Tio (Rio Tinto Fer et Titane), représenté en gris sur l'atlas (crédit RNCAN).

La halde expérimentale a une longueur de 70 m et une largeur comprise entre 10 à 12 m (Dubuc et al., 2017; Martin et al., 2017) (Figure 2.8). La hauteur maximale est de 7 m en haut de pente. L'inclinaison de la CCE est de 5%. La CCE est constituée d'une couche de sable compacté de 0,6 m recouverte par une couche d'anorthosite concassée de 0,3 m (Bréard Lanoix, 2017; Dubuc et al., 2017; Martin et al., 2017). Les roches stériles composant la halde expérimentale sont riches en hémioilménite et génératrices de DNC. Des roches stériles constituées d'anorthosites non réactives composent les derniers mètres de la halde ($x = 55$ à 70 m) (Plante et al., 2010) (Figure 2.9).



Figure 2.8 : Halde expérimentale de la mine du lac Tio (crédit IRME). Les roches stériles sont recouvertes de matériaux fins dont le sable formant la couche de contrôle des écoulements et l'anorthosite concassée visible en gris clair. La pente est de 5%. La surface de la halde possède une berme sur le pourtour.

Des sondes de teneurs en eau volumique et des capteurs de pression d'eau ont été installés dans les différentes couches de la halde (Figure 2.9) (Broda et al., 2017; Martin et al., 2017, 2019). Les sondes de teneurs en eau volumique (GS3 ; Decagon Devices Inc., 2017) installées au bas de la couche d'anorthosite concassée (0,25 m de profondeur), dans la couche de sable CCE (à 0,5 m et 0,8 m de profondeur) et dans les roches stériles (0,1 m et 0,3 m sous l'interface avec la CCE) (Martin et al., 2017) ont permis de suivre les variations de teneurs en eau volumique pendant les essais et tout au long de l'année. Le suivi des débits et de la qualité de l'eau sortant à la base de la halde a été suivi par six lysimètres de 10 m de côtés (Dubuc, 2018; Martin et al., 2017).

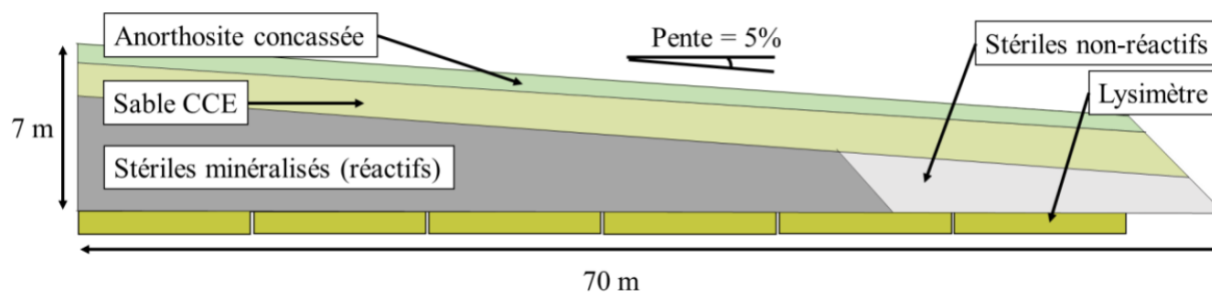


Figure 2.9 : Coupe transversale de la halde à stériles expérimentale de la mine du Lac Tio. Les stériles non réactifs sont représentés en bas de pente (tirée de Dubuc, 2018).

2.6.2 Propriétés hydrogéologiques des matériaux de la halde à stérile expérimentale

Des études à l'infiltromètre à simple anneau, à l'infiltromètre à double anneau et au perméamètre de Guelph ont permis d'évaluer les propriétés hydrogéologiques de la CCE en place (Bréard Lanoix, 2017). Des essais d'infiltration à grande échelle (voir plus bas) ont également été réalisés. Le sable de la CCE est classé comme SW-SP (USCS; ASTM D2487-11). Il est uniforme et est caractérisé par une densité relative moyenne des grains solides $D_r = 2,68$. La conductivité hydraulique saturée mesurée en place est comprise entre 9×10^{-6} et 2×10^{-4} m/s. Les essais réalisés *in situ* et au laboratoire indiquent un AEV d'environ 3 kPa et un WEV proche de 11 kPa pour le sable (Bréard Lanoix, 2017; Bréard Lanoix et al., 2020).

Les roches stériles concassées utilisées au sommet de la CCE ont une conductivité hydraulique saturée proche de celle du sable de la CCE ($k_{sat} = 5 \times 10^{-6}$ m/s ; (Bréard Lanoix, 2017; Dubuc, 2018). Leur AEV de 0.5 kPa et leur WEV de 2 kPa sont sensiblement inférieurs au sable.

Enfin, la conductivité hydraulique saturée des roches à stériles est d'environ de 10^{-3} m/s (Dubuc, 2018; Anna Peregoedova, 2012). Elles possèdent un AEV faible compris entre 0.2 kPa et 0.7 kPa, et un WEV proche de 2 kPa (Dubuc, 2018; Anna Peregoedova, 2012).

2.6.3 Essais d'infiltration à grande échelle

Cinq essais d'infiltration à grande échelle ont été réalisés sur la halde expérimentale de la mine du lac Tio entre septembre 2016 et septembre 2017 dans le but d'étudier le comportement hydrogéologique d'une halde à stérile avec une CCE (Martin et al., 2017). Les essais d'infiltration ont été réalisés par les passages répétés d'un camion-citerne à la surface de la halde à stériles (Figure 2.10).



Figure 2.10: Camion-citerne utilisé pour les essais d'infiltration à grande échelle sur la halde expérimentale de la mine du lac Tio (crédit IRME).

L'infiltration simulée durant ces essais était comprise entre 6,4 et 28 m³ (Tableau 2.1). Les deux essais les plus importants ont été réalisés pendant le mois de juin 2017. Le test I-C réalisé le 07 juin correspondait à une infiltration de 28 m³ (soit 47 mm) pendant une durée totale de 10 h (Dubuc, 2018). Ce test a été suivi par l'essai I-D réalisé le 14 juin. La halde a alors été arrosée avec 16,8 m³ (28 mm) d'eau sur une durée totale de 9,5 h (Dubuc, 2018). Une couverture imperméable a été installée entre le 16 juin et le 15 septembre 2017 afin de limiter l'infiltration.

Tableau 2.1: Caractéristiques des essais d'infiltration réalisés sur la halde expérimentale (tiré de Dubuc (2018)).

| Essai | Date | Volume d'eau (m ³) | Durée totale de l'essai (h) | Taux d'infiltration (m ³ /h) |
|-------|------------|--------------------------------|-----------------------------|---|
| I-A | 23-09-2016 | 8,60 | 4,00 | 2,15 |
| I-B | 27-09-2016 | 6,40 | 1,00 | 6,40 |
| I-C | 07-06-2017 | 28,00 | 10,00 | 2,80 |
| I-D | 14-06-2017 | 16,80 | 9,50 | 1,77 |
| I-E | 19-09-2017 | 12,80 | 4,25 | 3,01 |

Les résultats des essais d'infiltration ont permis de calibrer des modèles numériques en deux dimensions qui ont servi à évaluer le comportement d'une CCE et de réaliser une étude paramétrique (Dubuc, 2018) (Figure 2.11). Les essais d'infiltration, les suivis de terrain et les simulations numériques auront contribué à valider le concept de CCE et à proposer quelques recommandations (Bréard Lanoix, 2017; Dimech et al., 2019; Dubuc, 2018).

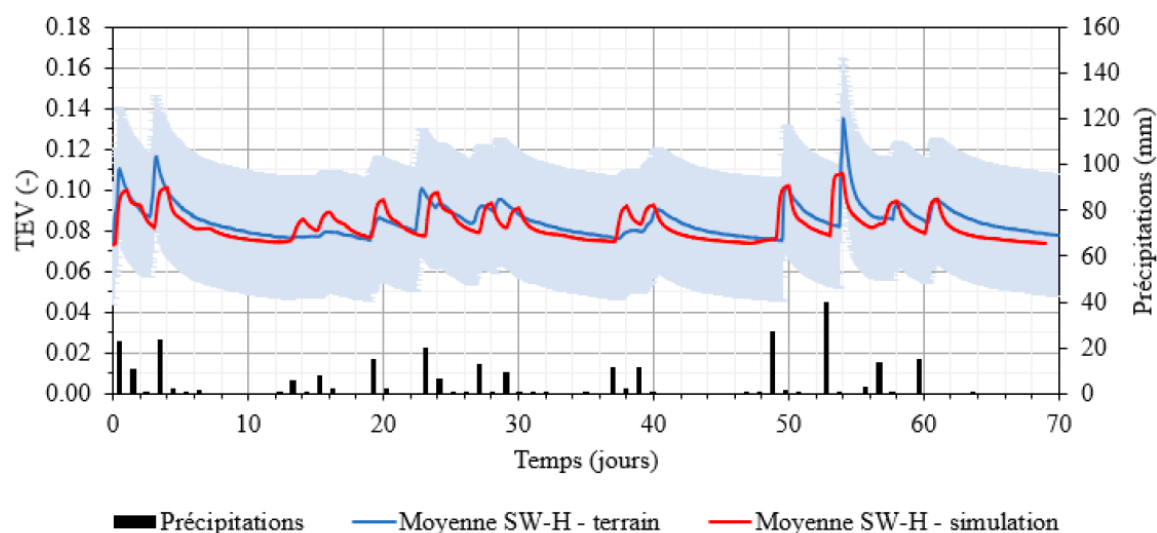


Figure 2.11: Teneurs en eau volumique mesurées (bleu) et simulées (rouge) 50 cm sous la surface de la halde expérimentale pour la période du 6 juin au 9 septembre 2016. La zone bleue correspond à l'incertitude des sondes de teneurs en eau volumique ($\pm 0,03$; Decagon devices inc, 2017). Les précipitations sont également indiquées (tiré de Dubuc, 2018).

2.7 Simulations numériques et optimisation

2.7.1 Simulations numériques

Les écoulements saturés et non saturés sont décrits par l'équation de Richards (1931) qui peut être résolue au moyen de méthodes numériques (Fetter, 2018) (section 2.5.1). L'équation de Richard est résolue sur un maillage utilisant une méthode de discrétisation. Cela permet d'approximer la résolution de l'équation de Richards à chaque point du maillage. Différents logiciels existent afin de réaliser des simulations numériques des écoulements hydrogéologiques. Les logiciels Modflow et Feflow sont généralement utilisés en hydrogéologie saturée afin de caractériser la distribution de la conductivité hydraulique et de la charge hydraulique sur des modèles en 2 dimensions (Diersch, 2013; Niswonger et al., 2011). Les logiciels Hydrus (Šimůnek et al., 2008) et Seep/w (GEO-SLOPE international Ltd., 2016) sont régulièrement utilisés afin de simuler des problèmes en 2 dimensions (et maintenant 3 dimensions) précis et de visualiser des résultats différents comme les pressions et les débits de sortie. En environnement minier, le logiciel Seep/w est le plus fréquemment utilisé (Bahrami et al., 2014; Pabst et al., 2018).

Le logiciel Seep/w (GEO-SLOPE international Ltd., 2016) intègre l'équation de Richards avec une discrétisation spatiale par éléments finis (GEO-SLOPE international Ltd., 2016) et une discrétisation temporelle par méthodes des différences finies par la méthode de Galerkin (Segerlind, 1984). Ce code est fréquemment utilisé dans l'étude des recouvrements (Bruno Bussière et al., 2003; Hotton et al., 2018). Il a été employé pour développer le concept de couche de contrôle des écoulements (Fala et al, 2003; Martin et al, 2005; Aubertin et al, 2009) ainsi que traiter et interpréter les essais d'infiltration *in situ* (Bréard-Lanoix, 2018, Dubuc, 2018).

Le logiciel HydroGeoSphere (Aquanty, 2016) résout l'équation de Richards à 2 et 3 dimensions en utilisant l'approche de discrétisation spatiale par méthode des éléments finis (Brunner et Simmons 2012). La résolution de la simulation numérique repose sur deux étapes : la résolution spatiale et

la résolution temporelle. HydroGeoSphere utilise ainsi la méthode de Newton Raphson qui permet de linéariser l'équation différentielle correspondant à la loi de Richards, ce qui permet de simplifier la résolution temporelle (Brunner et Simmons 2012). Ce logiciel a été utilisé précédemment dans le but de comparer l'écoulement dans les haldes à stériles avec ajout d'un recouvrement de matériaux fin compacté (Broda et al. 2014). L'utilisation d'HydroGeoSphere a aussi permis de comparer la méthode du modèle poreux équivalent avec une approche discrète (Broda et al., 2014).

2.7.2 Calibration et optimisation

2.7.2.1 Méthode directe et méthode inverse

La simulation numérique en hydrogéologie et en hydrologie est utilisée pour résoudre deux types de cas. La méthode directe correspond à la prédiction d'un phénomène naturel à partir des mesures des propriétés hydrogéologiques sur le terrain ou au laboratoire (He et al., 2013; Zhao et al., 2009; Zhou et al., 2014). La méthode indirecte consiste à définir les propriétés hydrogéologiques afin de les faire correspondre avec les observations du terrain ou du laboratoire (Emsellem et De Marsily 1971, Abbaspour et al. 2001, Carrera et al. 2005, Zhou et al. 2014).

2.7.2.2 Calibration

La calibration correspond à un problème inverse (He et al., 2013; Zhou et al., 2014) cherchant à définir les propriétés hydrogéologiques des matériaux (conductivité hydraulique, courbe de rétention d'eau, porosité) à partir d'observations de terrain (teneurs en eau volumique, charge hydraulique, débits, pression, données géochimiques). La méthode inverse la plus utilisée est la méthode d'essais-erreur qui consiste à varier les propriétés hydrogéologiques jusqu'à obtenir un résultat jugé acceptable (Carrera et al., 2005; Neuman, 1973).

Des méthodes plus rigoureuses existent afin de réaliser une calibration. Elles sont majoritairement utilisées en hydrogéologie saturée. Par exemple, les méthodes géostatistiques permettent de résoudre la distribution d'une propriété hydrogéologique par rapport aux observations de terrains (Carrera et al., 2005). Cette méthode s'applique généralement pour déterminer la distribution de la

conductivité hydraulique à partir des résultats d'essais de pompage (Huysmans et Dassargues 2009) et des mesures des charges hydrauliques dans une nappe libre (Gloaguen et al., 2001).

2.7.2.3 Optimisation

L'optimisation est un problème mathématique connu défini comme suit (Audet et Hare 2017). Soit A un ensemble réel, et f une application de A vers \mathbb{R} , alors $\exists! x \in A$, tel que $\inf f(A) = f(x)$. Où $\inf f(A)$ est la valeur « objectif » et l'application f est la fonction « objectif ».

Les problèmes inverses sont résolus selon cette approche avec une valeur d'objectifs qui revient à minimiser l'erreur entre les valeurs observées et les valeurs simulées. Il existe deux types de fonctions pour résoudre un problème inverse : les approches heuristiques et les méthodes métaheuristiques (Carrera et al., 2005).

Les méthodes heuristiques correspondent à des fonctions mathématiques d'obtention de minimum. Ces méthodes sont très rapides et utilisent les dérivées de la fonction à résoudre (Carrera et al., 2005; Zhou et al., 2014). L'approche est utile lorsque les fonctions ont une forme analytique explicite ou implicite permettant des calculs rapides. Les méthodes les plus connues sont la méthode du Gradient et de Gauss Newton (Carrera et al., 2005; Zhou et al., 2014). Elles permettent une résolution mathématique exacte d'un problème d'optimisation. Cependant, les méthodes heuristiques utilisent les formes analytiques du gradient et/ou du Jacobien, ce qui nécessite une fonction objectif continue d'ordre 1 ou supérieure (Carrera et al., 2005). Ces méthodes ont ainsi des utilisations limitées lorsque les fonctions objectifs sont complexes et dont la continuité n'est pas forcément prouvée (Audet et Hare 2017).

Les méthodes métaheuristiques correspondent à des algorithmes de recherche qui reposent sur un nombre important d'itérations afin d'obtenir la solution approchée du problème d'optimisation (Carrera et al., 2005; Zhou et al., 2014). Les méthodes les plus connues sont les méthodes génétiques et l'algorithme de Monte-Carlo. Le grand nombre d'itérations généralement nécessaires limite leur utilisation à des simulations numériques simple ou simplifier par des contraintes (Carrera et al., 2005; Zhou et al., 2014). Par exemple, les méthodes génétiques comme la méthode des colonies de fourmis sont utilisées en hydrogéologie non saturée afin de déterminer la courbe de rétention d'eau d'un matériau granulaire (Abbaspour et al., 2001).

2.7.2.4 Optimisation de Boîte noire

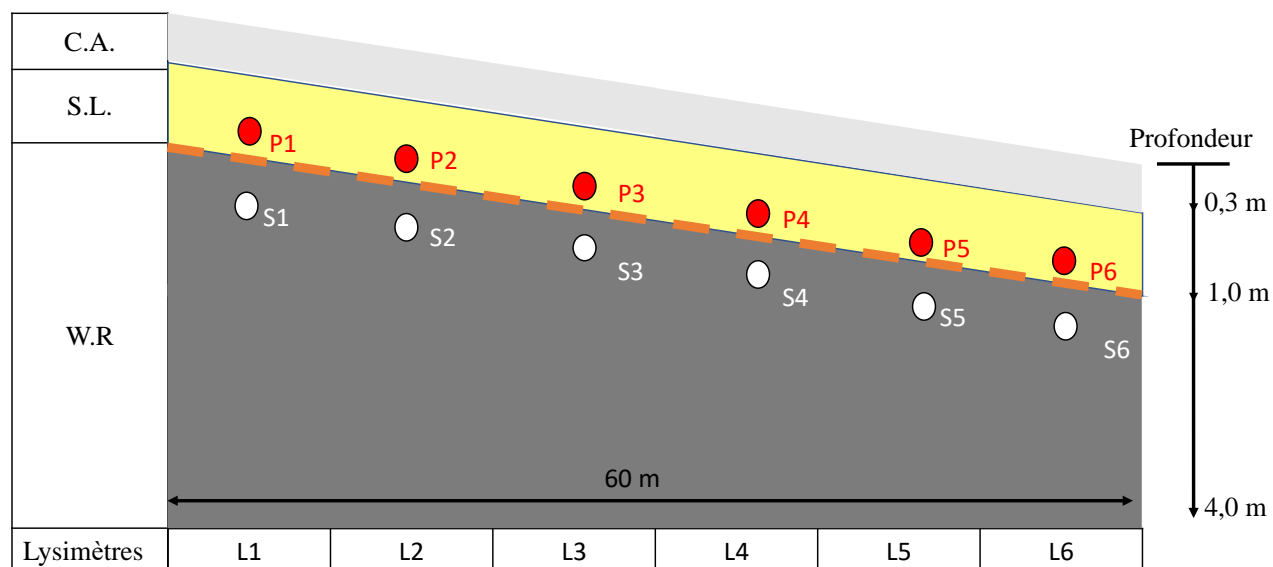
La fonction objective ne possède pas forcément de forme analytique et peut être un algorithme, ce qui est le cas dans les fonctions de boîte noire (Audet et Hare 2017). La fonction de « boîte noire » est définie comme une fonction ne possédant pas d'équation analytique ni implicite ni explicite et n'est donc pas dérivable (Audet et Hare 2017). La fonction objective est définie comme non dérivable. L'optimisation de boîte noire consiste à minimiser une valeur de sortie en variant une variable d'entrée (Audet et Kokkolaras 2016). La boîte noire correspond à la fonction « d'objectif ». Elle est considérée comme non dérivable et non continue ce qui implique donc une résolution par une méthode sans dérivée (Audet et Kokkolaras 2016).

Cette optimisation est réalisée par un solveur permettant la variation de la valeur d'entrée. La fonction « objectif » est alors indépendante du solveur ce qui correspond à une approche de recherche de minimum. Les valeurs de sortie sont générées par itération des valeurs d'entrées permettant de cibler certains voisinages des valeurs d'entrée jusqu'à l'obtention d'une convergence vers une valeur de coupure. Cette méthode est utilisée dans de nombreux domaines de l'ingénierie comme l'optimisation des réducteurs sismique dans les immeubles (Bigdeli et al., 2012) ou en hydrologie afin d'optimiser les sources d'eau dans les modèles de ruissellement (Minville et al., 2014). Une telle approche a été utilisée dans la présente étude afin d'optimiser les propriétés hydrogéologiques des matériaux composant la halde à stériles expérimental du lac Tio.

CHAPITRE 3 MÉTHODOLOGIE

3.1 Halde à stériles expérimentale et mesures de terrain

La halde à stériles expérimentale de la mine du Lac Tio a été présentée à la section 2.5. Le suivi du comportement hydrogéologique et les essais d'infiltration à grande échelle réalisés entre 2016 et 2017 ont permis d'obtenir une grande quantité d'informations utiles à la calibration du modèle de la halde. Des capteurs de conductivité électrique, de succion, de teneurs en eau volumique et de température ont été installés dans la halde à stériles (Martin et al., 2017). La qualité des données obtenues était variable, des données étaient manquantes pendant certaines périodes, certaines valeurs absolues étaient aberrantes et le bruit parasite était parfois trop important, ce qui est fréquemment observé pour une étude *in situ*. Dans cette étude, les mesures obtenues par les sondes de teneurs en eau volumique ont été utilisées pour la calibration, car elles étaient de bonne qualité dans la plupart des cas. Les sondes de teneurs en eau volumique (GS3, Decagon Devices Inc.) ont ainsi permis de suivre les variations de teneurs en eau volumique au cours du temps en fonction des conditions météorologiques et d'infiltration à différentes élévations et à différentes positions dans la halde (Figure 3.1). Les sondes étaient situées à 0,25 m (anorthosite concassée), 0,80 m (sable (CCE)) et 1,30 m (roches stériles) de profondeur et placées tous les 10 mètres (Figure 3.1). Le sable composant les lysimètres a aussi été instrumenté avec des sondes de teneurs en eau volumique et de succion, mais les résultats étaient difficiles à intégrer dans la calibration et la validation (bruits parasites et séries temporelles incomplètes) et n'ont donc pas été considérés par la suite. Seules les mesures manuelles du volume d'eau sortant ont été utilisées pour la validation de la calibration et l'optimisation de la CCE.



C.A : Anorthosite concassée S.L. : Sable (CCE) W.R. : Roches stériles

— : Interface Sable (CCE) / Roches stériles

Figure 3.1 : Coupe transversale simplifiée de la halde à stériles expérimentale. Les positions des sondes de teneurs en eau volumique sont indiquées.

Le comportement hydrogéologique de la halde à stériles expérimentale soumise aux conditions climatiques a été suivi pendant deux ans, entre avril 2016 et septembre 2017 (Figure 3.2). Six tests d'infiltration à grande échelle (I-A à I-E) ont également été menés afin d'évaluer la réponse hydrogéologique de la CCE en conditions contrôlées (voir aussi section 2.5) (Figure 3.2). Les tests I-C et I-D simulaient deux événements de précipitations importants, avec respectivement 28 m^3 (47 mm) et $16,8 \text{ m}^3$ (28 mm) appliqués à la surface de la halde à stériles expérimentale avec un camion-citerne sur une durée de 10 h (Dubuc, 2018). Les précipitations le reste de l'année ont été enregistrées par une station météo située sur le site de la mine du Lac Tio. Les données ont été compilées afin de retenir les précipitations moyennes journalières (Figure 3.2). Deux périodes de précipitations extrêmes ont eu lieu pendant l'année 2016 où plusieurs jours de pluie ont cumulé 53 mm en 72 h le 6 juin 2016 et 177 mm en 96 h le 17 octobre 2016 (respectivement jour 73 et jour 200; Figure 3.2). Les chutes de neige et le couvert neigeux n'ont pas été enregistrés, expliquant l'absence de précipitation majeure pendant l'hiver, mais étaient bien présents comme l'indique l'augmentation importante des teneurs en eau volumique au printemps en raison de la fonte des neiges (Figure 3.2).

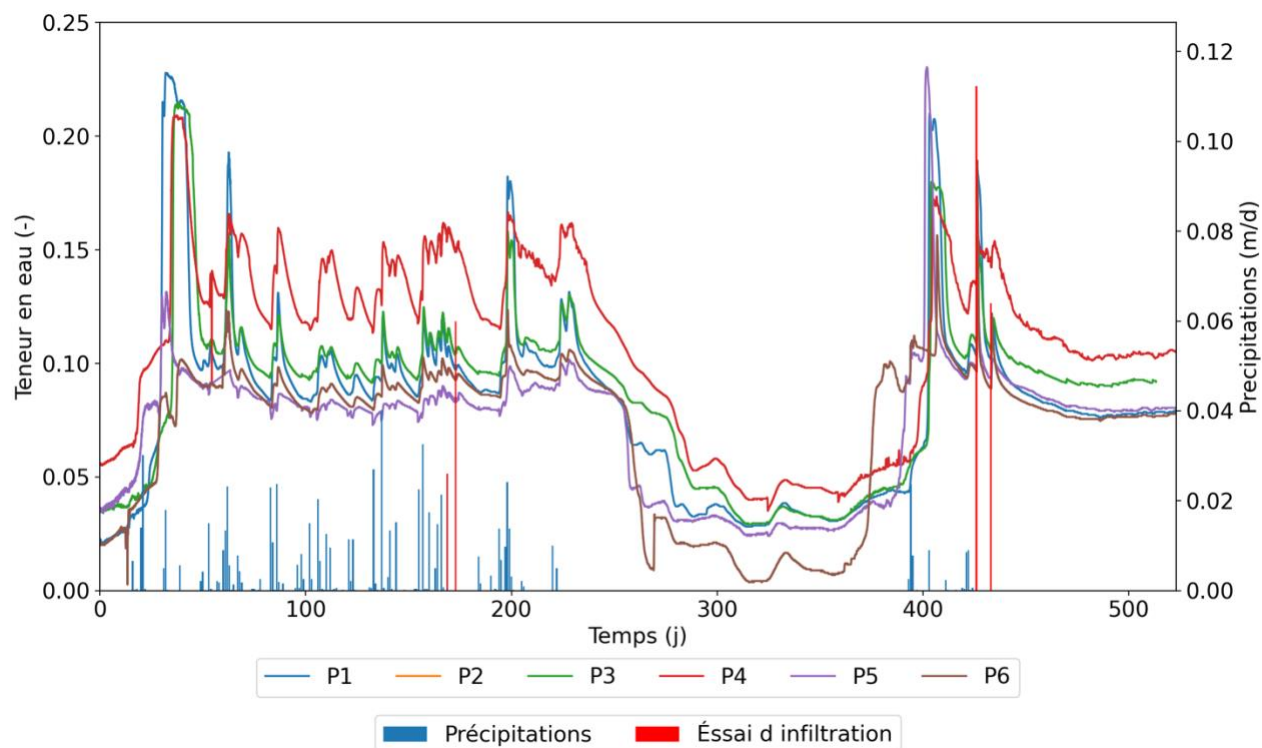


Figure 3.2 : Teneur en eau volumique mesurée à 0,80 m de profondeur entre le 4 avril 2016 et le 13 septembre 2017. Les précipitations sont présentées en bleu et les essais d'infiltration à grande échelle en rouge.

Les mesures enregistrées à 0,80 m de profondeur lors des essais I-C et I-D sont présentées à la figure 3.3 et représentent bien la réponse hydrogéologique du système à un événement de précipitations majeures. Les teneurs en eau volumique étaient initialement proches de 0,10 et ont commencé à augmenter rapidement 4,5 heures après le début du test I-C. La teneur en eau volumique a atteint un pic de 0,17 aux alentours de 10,3 h, puis a diminué lentement pendant plusieurs jours, tendant vers sa valeur initiale. Une précipitation mineure de 0,5 m/j s'est produit 4 jours après le test I-C entraînant une augmentation de 0,05 de la teneur en eau volumique mesurée à la sonde P4 (mais effet moins marqué aux autres sondes). La réponse hydrogéologique de la CCE était similaire pour le test I-D (Figure 3.3), mais l'amplitude de l'augmentation des teneurs en eau volumique était plus faible, car moins d'eau avait été ajoutée au sommet de la halde pour cet essai.

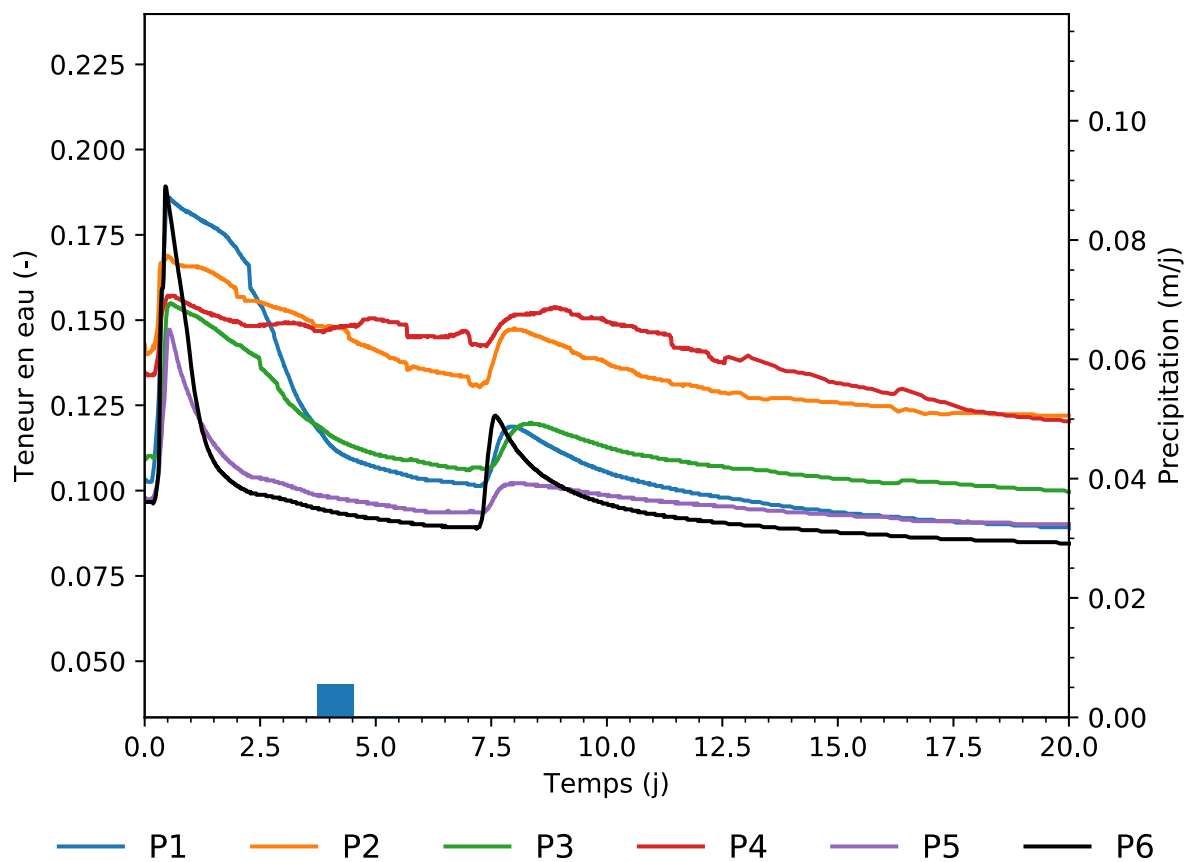


Figure 3.3 : Teneurs en eau volumique mesurées à 0,80 m de profondeur pour les sondes P1 à P6 placées dans le sable. Les précipitations sont représentées en bleu et les essais d'infiltration I-C et I-D en orange. Le test I-C a commencé le 7 juin 2016 à 20h ($t = 0$ j) et le test I-D le 14 juin ($t = 7$ j).

3.2 Simulations numériques

3.2.1 Géométrie et maillage du modèle

Les simulations numériques ont été réalisées au moyen du logiciel HydroGeoSphere (Aquanty; section 2.6.1). Le modèle a été construit en 3D et était constitué d'une base rectangulaire de 10 m de large et 60 m de long, et d'une élévation comprise entre 7 m (haut de pente) et 4 m (bas de pente) (Figure 3.4). La couche de contrôle des écoulements et la couche d'anorthosite concassée avaient une épaisseur de 0,7 m et de 0,3 m, respectivement. La surface du modèle et de toutes les couches intermédiaires étaient inclinées de 5%.

Le maillage a été réalisé par la projection d'un modèle 2D au moyen de la fonction « grid by layer » du logiciel HydroGeoSphere. Le cœur de la halde (roches stériles, ilménite et anorthosite) se composait ainsi de mailles parallélépipédiques de $0,5 \times 0,25 \times 0,20$ m. La couche CCE et la couche d'anorthosite concassée étaient constituées de mailles plus fines de $0,25 \times 0,25 \times 0,06$ m et de $0,25 \times 0,25 \times 0,03$ m, respectivement. Au total, le modèle était constitué de 396 000 éléments (Figure 3.4).

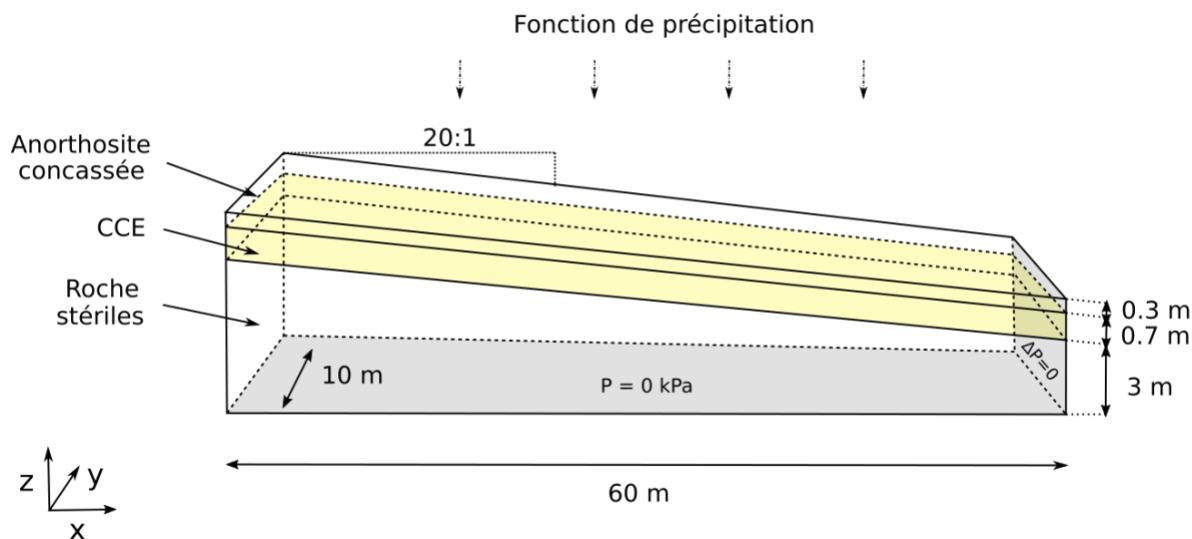


Figure 3.4 : Géométrie et maillage du modèle numérique de la halde expérimentale du Lac Tio réalisé avec le code HydroGeoSphere. Quatre conditions frontières ont été utilisées : (1) une condition de nappe à $z = 0$ m permettait de simuler la rétention d'eau dans les lysimètres; (2) une condition de Neumann à $x = 60$ m simulait la continuité de la pression, (3) une fonction de flux au sommet du modèle permettait de reproduire les précipitations et les essais d'infiltration et (4) une condition frontière imperméable appliquée aux faces $x = 0$ m, $y = 0$ m et $y = 10$ m.

3.2.2 Conditions initiales et conditions aux frontières

Les conditions initiales ont été choisies afin de reproduire la teneur en eau volumique résiduelle de chaque matériau correspondant aux conditions observées sur le terrain à la fin de l'hiver. Cependant, l'application des pressions correspondant aux WEV de chaque matériau représentait un défi de convergence à cause de la rétention de l'eau dans les lysimètres. Une condition initiale

isostatique a donc plutôt été utilisée afin d’obtenir à la première itération des pressions proches du WEV de chaque matériau.

La condition frontière appliquée à la base de la halde correspondait à $P = 0$ kPa, représentant une nappe libre. Cette condition permettait d’approximer le comportement des lysimètres installés à la base de la halde expérimentale (section 3.1) et généralement saturés (Dubuc, 2018). La face $x = 0$ m possédait une condition aux frontières imperméable de même que les faces latérales de la halde ($y = 0$ m et $y = 10$ m). En pratique, ces faces ne sont pas verticales sur le terrain et certains écoulements latéraux pourraient donc se produire en raison de la géométrie des pentes (Dimech et al., 2019). Les écoulements latéraux devraient cependant être relativement limités et ont donc été négligés dans le cadre de la présente étude. Une condition frontière d’écoulement libre (« free drainage ») a été appliquée à la face $x = 60$ m, permettant ainsi une continuité du modèle numérique vers le bas de pente (Broda et al., 2017). En d’autres termes, l’eau était en mesure de quitter le modèle et ne s’accumulait pas à la frontière du modèle. Enfin, une condition frontière de type flux unitaire représentait l’infiltration à la surface de la halde. Les précipitations étaient mesurées de manière journalière et réparties de manière constante et équitable sur l’ensemble de la journée. En général, une partie de l’eau ruisselle et l’infiltration nette ne représente qu’une fraction des précipitations totales (Kresic, 2006). Cependant, en l’absence de données plus précises sur l’intensité horaire des précipitations, le flux d’infiltration a été supposé égal aux précipitations et l’évaporation a été négligée. En revanche, le flux simulé lors des essais d’infiltration à grande échelle était égal au volume d’eau ajouté à la surface de la halde, car celui-ci était contrôlé afin d’éviter le ruissellement (Dubuc, 2018). Enfin, le flux était nul entre le 16 juin 2017 et le 15 septembre 2017 afin de simuler l’installation du recouvrement imperméable à la surface de la halde (voir section 2.5.).

3.2.3 Convergence

La matrice de résolution discrète repose sur la résolution d’un système d’équations correspondant à la discrétisation spatiale du modèle et visant la minimisation de l’erreur sur le bilan de masse. Le critère de convergence a été fixé à 1×10^{-5} avec un nombre d’itérations maximum de 1000. La discrétisation temporelle était résolue au moyen de la méthode de Newton-Raphson sur deux termes à savoir le critère de convergence absolue de Newton et le critère de convergence relatif de

Newton. Ces deux paramètres ont été fixés ici à 1×10^{-3} suivant les recommandations de Huyakorn et Pinder (1983). Le pas de temps initial était de 10^{-3} j, mais était adaptatif et compris entre 5×10^{-4} j et 0,1 j. Le pas de temps était ajusté automatiquement par le code en fonction de la variation des pressions, des degrés de saturation et du nombre d'itérations au cours du temps avec un multiplicateur maximum de 5 (voir recommandations de Zhao et al. 2009).

3.3 Calibration automatisée des simulations numériques

Le but de la calibration automatisée est d'obtenir les propriétés hydrogéologiques des trois matériaux constituant la halde à stériles expérimentale qui permettaient de reproduire les résultats de teneurs en eau volumique mesurée (Figure 3.2). La procédure peut se diviser en deux parties. Premièrement, les mesures de teneurs en eau volumique sont traitées afin d'obtenir les paramètres t_1 , t_2 et t_a qui permettent de quantifier la réponse de la teneur en eau volumique aux fronts de mouillages provoqués par les essais d'infiltration I-C et I-D (Figure 3.5a). Deuxièmement, un ensemble d'algorithmes Python permettaient de résoudre la calibration en interagissant entre le logiciel HydroGeoSphere et le logiciel Nomad (Figure 3.5b).

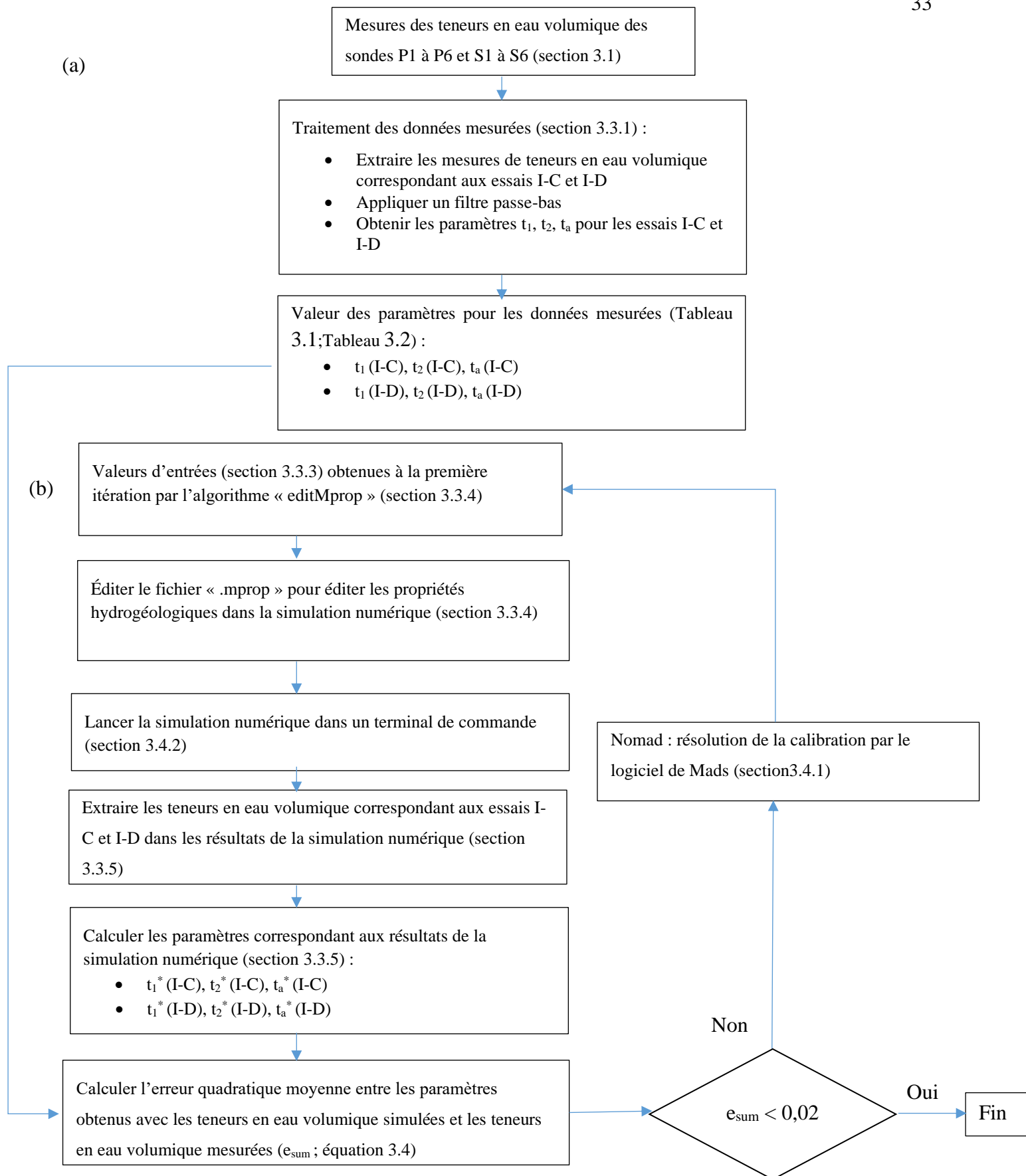


Figure 3.5 : Procédure générale de la méthode de calibration. La méthode comprend deux parties: (a) correspond aux traitements des mesures obtenues avec les sondes GS3. (b) représente la procédure de calibration automatisée et qui interagit entre le logiciel Nomad et le logiciel HydroGeoSphere.

3.3.1 Traitement des données

Les teneurs en eau volumique ont d'abord été filtrées en appliquant un filtre passe-bas (Figure 3.6). L'objectif était d'éliminer les faibles variations de teneurs en eau volumique (oscillations dans la Figure 3.2). Le traitement a été réalisé sur les fréquences correspondant aux variations périodiques de teneurs en eau volumique, obtenue par la transformation de Fourier :

$$\hat{f}(w) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ixw} dx \quad (3.1)$$

Où f est une fonction continue dans \mathbb{R} , i l'unité imaginaire, et w la fréquence normalisée par 2π .

La fréquence de coupure f_c permettait d'obtenir la pulsation de coupure w_c tel que :

$$w_c = 2\pi f_c \quad (3.2)$$

Le filtre passe-bas peut alors être exprimé par sa fonction de transfert H :

$$H(iw) = \frac{1}{1 + i \frac{w}{w_c}} \quad (3.3)$$

Avec w la fréquence normalisée.

La fréquence de coupure était ici de $2,3 \times 10^{-5}$ Hz, ce qui correspondait à une période de 0,5 j.

Algorithme Python de filtration spectrale basée sur la librairie Scipy :

```
#application du filtre passe-bas
b, a = signal.butter(3, 0.08)
zi = signal.lfilter_zi(b, a)
z, _ = signal.lfilter(b, a, amp, zi=zi*amp[0])
z2, _ = signal.lfilter(b, a, z, zi=zi*z[0])
y = signal.filtfilt(b, a, amp)
# y est le résultat filtré de la teneur en eau volumique
```

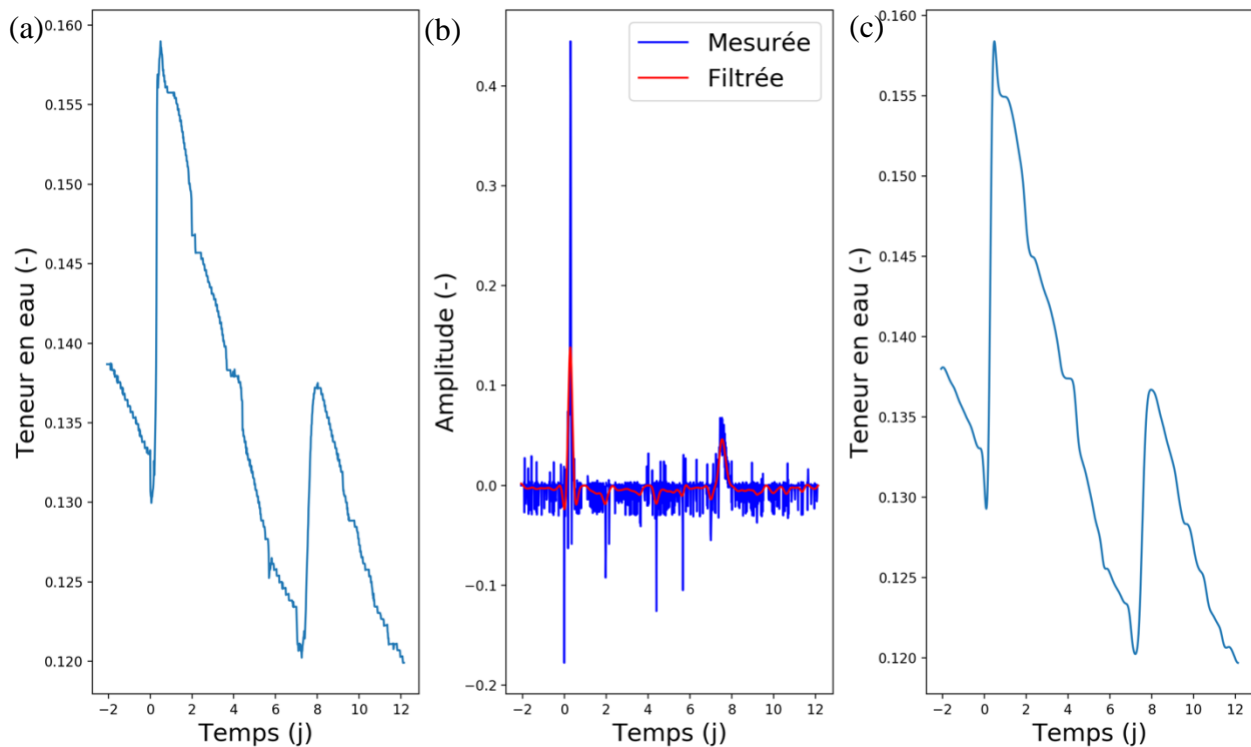



Figure 3.6 : Exemple de l'application du filtre passe-bas sur la courbe de teneurs en eau volumique mesurées par la sonde P2 pendant les essais I-C et I-D : (a) Mesures brutes de teneurs en eau volumique, (b) décomposition fréquentielle et filtration à 0,5 j et (c) teneurs en eau volumique filtrée.

La calibration réalisée dans cette étude était basée sur les données de teneurs en eau volumique. Une série de données avec des oscillations (comme celles observées à la Figure 3.2) peut néanmoins être problématique. La réduction des données à quelques points caractéristiques permet de limiter le risque de sous-ajustement qui peut survenir pour des problèmes de variance élevée et qui aboutit souvent à une solution linéaire et non représentative (Naseri et al., 2019). La présente étude se proposait donc de calibrer le modèle de la halde expérimentale en comparant les teneurs en eau volumique mesurées et simulées sur la base de paramètres correspondants à des points spécifiques des courbes de teneurs en eau volumique au cours des essais I-C et I-D. Le paramètre t_1 correspondait au temps nécessaire pour atteindre 50% de l'augmentation maximale de la teneur en eau volumique induite par l'infiltration (Figure 3.7a). Le temps t_2 correspondait au temps nécessaire pour atteindre 50% de la différence entre la teneur en eau volumique maximale et

minimale lors du drainage (Figure 3.7b). Le paramètre t_a correspondait au temps d'arrivée du front de mouillage dans les stériles, 1,4 m sous la surface.

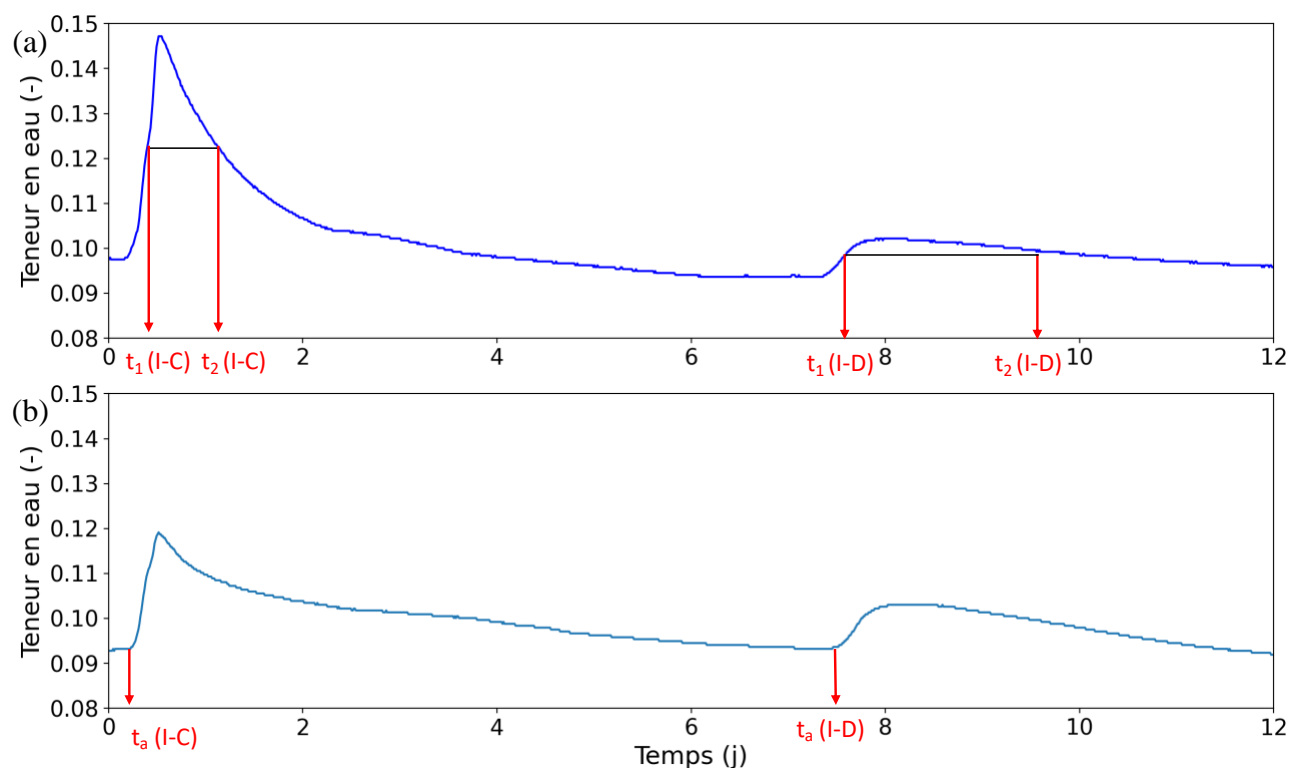


Figure 3.7: (a) Détermination des paramètres t_1 , t_2 appliqués au test I-C et I-D pour le capteur P5 dans le FCL à 0,80 m de profondeur. (b) t_a (heure d'arrivée) 1,30 m de profondeur pour l'essai I-C et I-D pour le capteur S5.

L'algorithme développé pour extraire les temps t_1 et t_2 s'initialisait avec les teneurs en eau volumique mesurées par les sondes GS3. Ces vecteurs avaient préalablement été filtrés au moyen d'un filtre passe-bas décrit précédemment afin d'atténuer les faibles variations et d'augmenter la résolution des amplitudes correspondant à l'arrivée du front de mouillage. La détermination de l'amplitude du front de mouillage permettait de déterminer les temps caractéristiques t_1 et t_2 pour chacun des deux essais d'infiltration. Au total, le code renvoyait donc 4 valeurs de sortie (Tableau 3.1). Les valeurs de t_1 (I-C) augmentaient de la sonde P1 (0,2573 j) à la sonde P3 (0,4103 j) puis diminuaient légèrement pour P5 (0,3963 j) et P6 (0,3393 j). Les valeurs de t_2 (I-C) étaient plus élevées pour les sondes P1 à P3, aux alentours de 2,3 j, que P5 et P6 (environ 1 j). Des tendances similaires ont été observées pour les valeurs t_1 et de t_2 lors de l'essai I-D. Les valeurs t_1 et t_2 pour

les essais I-C et I-D n'ont pas pu être obtenues pour la sonde P4, car la phase de drainage n'était pas clairement identifiable et coïncidait avec un plateau de teneurs en eau volumique (Figure 3.3).

Algorithme Python de détermination des paramètres t_1 et t_2 pour les tests I-C et I-D appliqué aux données mesurées :

```
# tr correspond aux vecteurs temps et amp aux teneurs en eau volumique
def minima(tr,amp): #fonction filtre et extraction t1, t2
    tr2=[i-37.86 for i in tr] # Test I-C commence à 37.86
    #application du filtre passe-bas
    b, a = signal.butter(3, 0.08)
    zi = signal.lfilter_zi(b, a)
    z, _ = signal.lfilter(b, a, amp, zi=zi*amp[0])
    z2, _ = signal.lfilter(b, a, z, zi=zi*z[0])
    y = signal.filtfilt(b, a, amp)
    # y est le résultat filtré de la teneur en eau volumique
    # Lissage des courbes

    # librairie Akima1Dinterpolate
    f = interpolate.Akima1DInterpolator(tr, y)
    F_n = f.antiderivative(1) # construit la n-ième primitive
    y_n = F_n.__call__(tr)
    y_n2=[i+0.138 for i in y_n]
    #extraction des valeurs maximales des teneurs en eau volumique
    A=tr[argrextrema(y_n, np.greater,order=250)]
    A2=y_n[argrextrema(y_n, np.greater,order=250)]
    A=[float(c) for c in A ]
    print(A2)
    A2 = [float(c) for c in A2[0]]
    print((A2))
    # réduction des séries entre arrivée du front de mouillage et phase
    de drainage
    # pour I-C et I-D
    id1=list(tr).index(tr[np.abs( tr- 37.86).argmin()])
    id2=list(tr).index(tr[np.abs( tr- A[0]).argmin()])
    id3=list(tr).index(tr[np.abs( tr- 44.85).argmin()])
    id4=list(tr).index(tr[np.abs( tr- A[1]).argmin()])
    id5=list(tr).index(tr[np.abs( tr- 49.90).argmin()])
    print(y_n[id2],tr[id2])
    tcut1=tr[id1:id2]
    tcut2 = tr[id2:id3]
    tcut3 = tr[id3:id4]
    tcut4 = tr[id4:id5]
    #obtention des paramètres
    tr501 = tcut1[np.abs(y_n[id1:id2]-0.50*A2[0]).argmin()] #t1
    tr502 = tcut2[np.abs(y_n[id2:id3] - 0.50*A2[0]).argmin()] #t2
    tr503 = tcut3[np.abs(y_n[id3:id4]- 0.50*A2[1]).argmin()] #t1
```

```

tr504 = tcut4[np.abs(y_n[id4:id5] - 0.50*A2[1]).argmin()] #t2
res50=[]
res50.append(tr501)
res50.append(tr502)
res50.append(tr503)
res50.append(tr504)
#resultats
return res50

```

Tableau 3.1 : Valeurs des temps t_1 et t_2 pour les essais I-C et I-D à 0,80 m de profondeur (sondes P1 à P6). Les paramètres n'ont pas pu être déterminés pour la sonde P4 (voir texte pour détails).

| Sondes | t_1 (I-C) | t_2 (I-C) | t_1 (I-D) | t_2 (I-D) |
|--------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| | (j) | (j) | (j) | (j) |
| P1 | 0,2573 | 2,3603 | 7,9303 | 9,0093 |
| P2 | 0,3113 | 2,1243 | 7,9583 | 8,9723 |
| P3 | 0,4103 | 2,6133 | 7,8873 | 9,2233 |
| P5 | 0,3963 | 1,0933 | 7,7163 | 8,7823 |
| P6 | 0,3393 | 0,9363 | 7,4323 | 8,1293 |

Le temps d'arrivée (t_a) du front de mouillage dans les stériles à 1,30 m de profondeur a été déterminé d'une manière similaire. Le filtre passe-bas a également été appliqué sur les résultats mesurés, ce qui a permis d'atténuer les faibles variations, le bruit et d'exagérer le contraste de teneurs en eau volumique lors du passage des fronts de mouillage. Les données filtrées étaient ensuite dérivées deux fois. Le maximum à l'intérieur des dérivés secondes correspondait au temps d'arrivée des fronts de mouillages lors des essais I-C et I-D (Tableau 3.2). Les temps d'arrivées des fronts de mouillage étaient supérieurs pour les sondes S3 et S4 pour les essais I-C et I-D, mais les différences étaient inférieures à 0,1 j entre les paramètres t_a de chacune des sondes. Les paramètres t_a (I-C) et t_a (I-D) n'ont pas pu être obtenus pour les sondes S1 et S6. La sonde S1 avait

une valeur de teneur en eau volumique constante pendant le mois de juin 2016. La sonde S6 n'a pas enregistré de valeur pendant le mois de juin 2016.

Algorithme Python pour l'obtention par la méthode des dérivées secondes des temps d'arrivés du front de mouillage dans les stériles lors des tests I-C et I-D :

```
def minima(tr,amp): #extraire le temps d'arriver à partir des teneurs en
eau volumique "amp" sur la série "tr"
    Ne = len(amp)
    Te = tr[1]-tr[0]
    #filtre passe-bas
    b, a = signal.butter(3, 0.080)
    zi = signal.lfilter_zi(b, a)
    z, _ = signal.lfilter(b, a, amp, zi=zi*amp[0])
    z2, _ = signal.lfilter(b, a, z, zi=zi*z[0])
    #fonction obtenue
    y = signal.filtfilt(b, a, amp)
    # calcul de la dérivée première
    f = interpolate.Akima1DInterpolator(tr, y)
    #calcul de la dérivée deuxième
    f2= interpolate.Akima1DInterpolator(tr, f)
    y_n = f.__call__(tr)
    y_2n=f2.__call__(tr)
    #extraire maximum de la dérivé seconde
    A=tr[argrelextrema(f2, np.greater,order=100)]
    #création de la sortie correspondante au temps d'arrivé du front de
mouillage
    res=[]
    for i in [0,1]:
        res.append(A[i])
    return res
```

Tableau 3.2 : Valeurs des temps t_a pour les essais I-C et I-D à 1,30 m de profondeur.

| Sondes | t_a (I-C) | t_a (I-D) |
|--------|-------------|-------------|
| | (j) | (j) |
| S2 | 0,241 | 7,505 |
| S3 | 0,275 | 7,609 |
| S4 | 0,263 | 7,650 |
| S5 | 0,243 | 7,603 |

3.3.2 Fonction de précipitation

La simulation numérique utilisée dans le processus de calibration a commencé le 1 mai 2017 (soit 37 jours avant le début de l'essai I-C) et comportait 60 jours de précipitations. L'objectif était d'établir des conditions initiales proches des mesures de terrain avant les essais d'infiltrations I-C et I-D (section 3.1). Les essais d'infiltrations étaient simulés le 7 juin 2017 ($t = 37,86$ j dans la figure 3.8) et le 14 juin 2017 (44,85 j) pour un volume respectif de 28 m^3 et de $16,5 \text{ m}^3$. La fonction de précipitation possédait un faible événement de pluies entre les essais I-C et I-D correspondants à une précipitation de 5 mm en 24 heures observée ce jour-là. Un changement de repère a été appliqué aux résultats présentés dans le reste du mémoire afin que le temps $t = 0$ j corresponde au 7 juin 2017, soit le début de l'essai I-C.

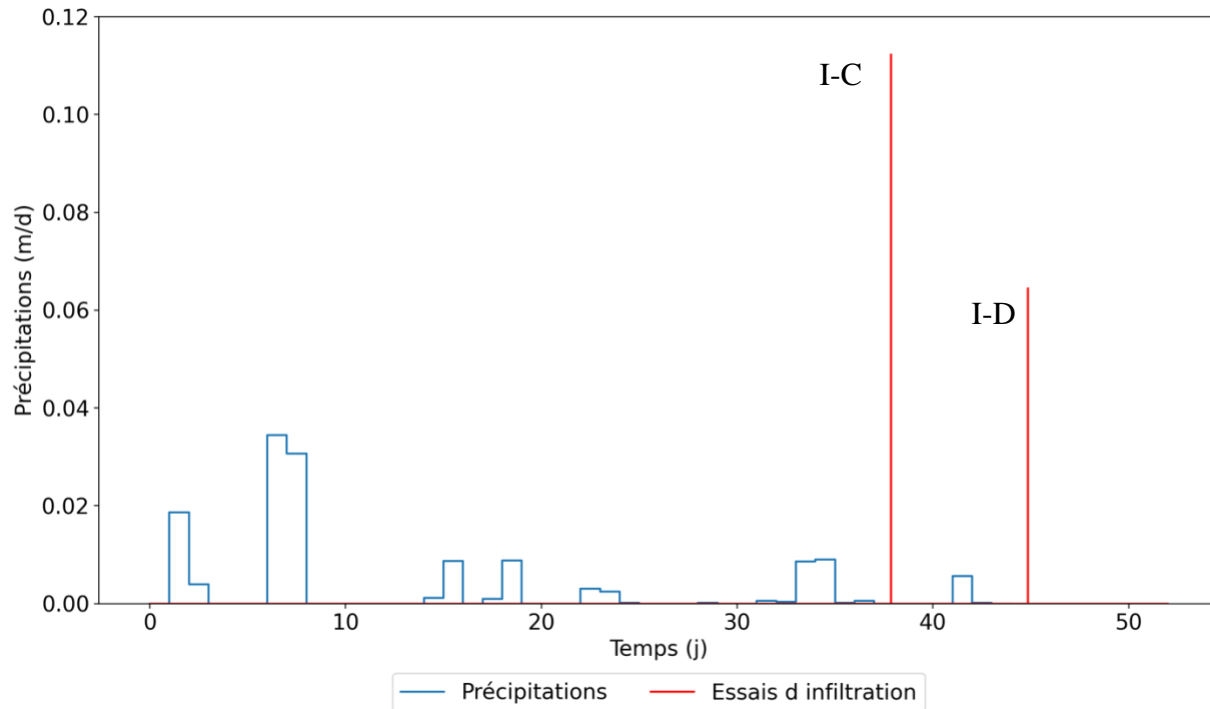


Figure 3.8 : Fonction de précipitations utilisées lors de la calibration du modèle numérique de la halde expérimentale. Le temps 0 correspond au 1er mai 2017. Les essais d'infiltrations I-C et I-D ont débuté respectivement le 7 juin 2017 et le 14 juin 2017.

3.3.3 Valeurs d'entrées

Les variables d'entrées, sur lesquelles était basée l'optimisation, étaient au nombre de 9, soit 3 paramètres par matériaux simulés : la conductivité hydraulique saturée et les paramètres d'ajustement α_{VG} et n_{VG} de l'équation de van Genuchten (1980) (voir section 2.4.2) (Tableau 3.3). Les valeurs initiales de ces paramètres (Tableau 3.3) ont été définies sur la base d'études antérieures réalisées au moyen d'essais de laboratoire et *in situ* (Bréard Lanoix, 2017; Dubuc, 2018).

Tableau 3.3 : Valeurs initiales utilisées pour la calibration des simulations numériques de la halde expérimentale. k_{sat} : conductivité hydraulique saturée, α_{vG} , n : paramètres d'ajustement de van Genuchten (1980).

| Matériaux | | Anorthosite concassée ⁽¹⁾ | Sable (CCE) ⁽²⁾ | Roches stériles ⁽¹⁾ |
|----------------------|-----------------------|---|----------------------------|--------------------------------|
| k_{sat} | (m.s^{-1}) | 5×10^{-4} | 9×10^{-5} | 5×10^{-3} |
| α_{vG} | (m^{-1}) | 3,98 | 1,25 | 7,75 |
| n_{vG} | (-) | 2,16 | 6,00 | 2,34 |

(1) Dubuc, 2018 (2) Bréard-Lanoix, 2017

3.3.4 Fonction de communication entre la boîte noire et le fichier des propriétés hydrogéologiques du logiciel HydroGeoSphere.

Le logiciel HydroGeoSphere utilise un système de pseudo-code. Le fichier principal « .grok » détermine les commandes attribuées au logiciel afin de réaliser la simulation numérique. Dans ce fichier, les propriétés des matériaux utilisés sont déterminées par un appel de fichier extérieur le fichier « .mprop ». Des algorithmes ont été développés dans cette étude afin d'automatiser les échanges d'informations entre l'algorithme de boîte noire (voir plus bas) et le logiciel HydroGeoSphere. Dans un premier temps, les propriétés ont été extraites à partir du fichier « .mprop ». Le chemin du dossier contenant ce fichier est l'entrée de la fonction. Les lignes du dossier ont été copiées puis triées afin d'extraire uniquement les propriétés hydrogéologiques d'intérêt (la conductivité hydraulique et les paramètres α_{vG} et n_{vG} de l'équation de van Genuchten (1980) sous la forme d'une matrice carrée d'ordre 5).

Algorithme Python permettant l'écriture des propriétés hydrogéologiques à l'intérieur du fichier « .grok » :


```

# edit lines and properties
def editMprops(folder, params):
    src = open(folder + 'mat.mprops', 'r')
    src_lines = src.readlines()
    src.close()
    src_lines[6] = str(params[0][0]) + '\n' # Conductivité hydraulique
des stériles
    src_lines[38] = str(params[0][1]) + '\n' # Conductivité hydraulique
de la roche stérile concassée
    src_lines[69] = str(params[0][2]) + '\n' # Conductivité hydraulique
du sable CCE
    src_lines[17] = str(params[1][0]) + '\n' # Paramètre  $\alpha$  VG des roches
stériles
    src_lines[49] = str(params[1][1]) + '\n' # Paramètre  $\alpha$  VG des roches
stériles concassées
    src_lines[81] = str(params[1][2]) + '\n' # Paramètre  $\alpha$  VG du sable CCE
    src_lines[20] = str(params[2][0]) + '\n' # Paramètre  $n$  VG des roches
stériles
    src_lines[52] = str(params[2][1]) + '\n' # Paramètre  $n$  VG des roches
stériles concassées
    src_lines[84] = str(params[2][2]) + '\n' # Paramètre  $n$  VG du sable
CCE
    # Ecrire les lignes
    src = open(folder + 'mat.mprops', 'w')
    src.writelines(src_lines)
    src.close()
    return

```

Un deuxième algorithme permettait ensuite l'envoi des propriétés hydrogéologiques des trois matériaux depuis le logiciel Nomad (qui variait ces propriétés à chaque itération) vers le fichier « .mprop ». L'entrée correspondait aux propriétés hydrogéologiques des trois matériaux.

Algorithme Python permettant l'écriture des propriétés à l'intérieur du fichier propriété utilisé par le logiciel HydroGeoSphere :

```

def extrairemprops(folder):
    src = open(folder + 'mat.mprops', 'r') # Ouvrir le fichier des
propriétés hydrogéologiques de HGS
    src_lines = src.readlines()
    src.close()
    # sterile

```

```

ksat1 = float(src_lines[6].strip())
alpha1 = float(src_lines[17].strip())
beta1 = float(src_lines[20].strip())
ts1 = float(src_lines[9].strip())
tr1 = float(src_lines[14].strip()) * ts1
# anor
ksat2 = float(src_lines[38].strip())
alpha2 = float(src_lines[49].strip())
beta2 = float(src_lines[52].strip())
ts2 = float(src_lines[41].strip())
tr2 = float(src_lines[46].strip()) * ts2
# cce
ksat3 = float(src_lines[69].strip())
alpha3 = float(src_lines[81].strip())
beta3 = float(src_lines[84].strip())
ts3 = float(src_lines[73].strip())
tr3 = float(src_lines[78].strip()) * ts3
# Vecteur des conductivités hydrauliques saturées
k = [ksat1, ksat2, ksat3]
# Vecteur des paramètres  $\alpha$  de Van Genuchten
alpha = [alpha1, alpha2, alpha3]
# Vecteur des paramètres  $n$  de Van Genuchten
beta = [beta1, beta2, beta3]
# Vecteur utilisé comme argument dans le cas du traçage de la courbe
de rétention d'eau
ts = [ts1, ts2, ts3]
tr = [tr1, tr2, tr3]
# Matrice des propriétés hydrogéologiques
prop = [k, alpha, beta, ts, tr]
print(prop)
return prop

```

3.3.5 Fonction d'extraction des teneurs en eau volumique simulées

Les teneurs en eau volumique simulées étaient contenues dans plusieurs fichiers de type « .dat ».

La fonction getData (voir ci-dessous) permettait d'extraire les pas de temps et les teneurs en eau

volumique correspondants à chaque sonde. La fonction renvoyait ainsi deux sorties, à savoir le temps et les teneurs en eau volumique de chaque sonde, sous la forme d'une matrice, permettant ensuite la détermination des paramètres t_1 , t_2 , et t_a pour les résultats des teneurs en eau volumique simulés.

Algorithme permettant l'extraction des résultats de teneurs en eau volumique simulés :

```
# importer les données
def getData(sf):
    #ouvrir le fichier
    f = open(sf, 'r')
    f.readline()
    f.readline()
    f.readline()
    #initialiser les vecteurs
    time = []
    sat = []
    #retirer les espaces
    line = f.readline().split(' ')
    #créer le vecteur ligne avec les différentes valeurs
    line = [x for x in line if x]
    while len(line) > 1:
        time.append(float(line[0])) # extrait le pas de temps
        sat.append(float(line[3]) * 0.30) # 0.30 correspond à la
        #porosité pour le passage de la saturation à la teneur en eau volumique
        line = f.readline().split(' ') #passage à la ligne suivante
        line = [x for x in line if x]
    #fermer le fichier
    f.close()
    #retourne le temps et la saturation
    return time, sat
```

3.3.6 Obtentions des paramètres t_1 , t_2 et t_a simulés

Un algorithme permettait d'obtenir à partir des teneurs en eau volumique simulés les paramètres t_1 et t_2 pour les essais I-C ou I-D. Ces paramètres ont ensuite permis de calculer l'erreur entre les données mesurées et les résultats simulés (voir section suivante).

Algorithme Python permettant de déterminer les paramètres t1 et t2 simulés à 0,80 m de profondeur pour les tests I-C et I-D :

```
def GetHGSValue2bot(sim_path):
    # extraire résultat à 0.80m
    names = ['/moiso.observation_well_flow.x_%sbot.dat' % i for i in (5,
15, 25, 45, 55)]
    y_tot = []
    # extraire les teneurs en eau volumique
    for x in names:
        time, sat = getData(sim_path + x)
        i = t.index(37)
        i2 = t.index(51)
        y_pz = []
        lin2=t[i:i2]
        for t in range(i,i2):
            y_pz.append(sat[t])
        y_tot.append(y_pz)
    Res=[]
    for x in range(len(y_tot)):

        # extraire la teneur en eau volumique maximale
        A = lin2 [argrelextrema(x, np.greater, order=200)]
        A2 = x[argrelextrema(x, np.greater, order=200)]
        # séparer la courbe entre passage des fronts de mouillage et
phase de drainage
        A = [float(c) for c in A]
        A2 = [float(c) for c in A2]
        id1 = list(lin2).index(lin2[np.abs(lin2 - 37.86).argmin()])
        id2 = list(lin2).index(lin2[np.abs(lin2 - A[0]).argmin()])
        id3 = list(lin2).index(lin2[np.abs(lin2 - 44.85).argmin()])
        id4 = list(lin2).index(lin2[np.abs(lin2 - A[1]).argmin()])
        id5 = list(lin2).index(lin2[np.abs(lin2 - 52.00).argmin()])
        tcut1 = lin2[id1:id2]
        tcut2 = lin2[id2:id3]
        tcut3 = lin2[id3:id4]
        tcut4 = lin2[id4:id5]
        #obtenir les paramètres
        tr501 = tcut1[np.abs(x[id1:id2] - 0.50 * A2[0]).argmin()] #tc1
        tr502 = tcut2[np.abs(x[id2:id3] - 0.50 * A2[0]).argmin()] #tc2
        tr503 = tcut3[np.abs(x[id3:id4] - 0.50 * A2[1]).argmin()] #td1
        tr504 = tcut4[np.abs(x[id4:id5] - 0.50 * A2[1]).argmin()] #td2
        res50 = []
        #enregistrer le résultat
        res50.append(tr501)
        res50.append(tr502)
        res50.append(tr503)
        res50.append(tr504)
        # concaténer les résultats de chaque sonde
```

```

Res.append(res50)
#donne les paramètres à chaque sonde
return Res

```

Algorithme Python permettant de déterminer les temps d'arrivée simulés du front de mouillage dans les stériles à 1,30 m de profondeur pour les tests I-C et I-D :

```

def GetHGSValue2(sim_path):
    # extraire à 1.30m
    names = ['/moiso.observation_well_flow.x_%ssttop.dat' % i for i in (
25, 35, 45, 55)]
    y_tot = []
    # obtention des teneurs en eau volumique aux pas de temps
    # extraire les teneurs en eau volumique
    for x in names:
        time, sat = getData(sim_path + x)
        i = t.index(37)
        i2 = t.index(51)
        y_pz = []
        tr = t[i:i2]
        for t in range(i, i2):
            y_pz.append(sat[t])
        y_tot.append(y_pz)
    Res = []
    for x in range(len(y_tot)):
        f = interpolate.Akima1DInterpolator(tr, x)
        # calcul de la dérivé deuxième
        f2 = interpolate.Akima1DInterpolator(tr, f)
        y_n = f.__call__(tr)
        y_2n = f2.__call__(tr)
        plt.subplot(1, 3, 3).set(xlabel='time (j)')
        plt.plot(tr, y_n)
        # extraire maximum de la dérivé seconde
        A = tr[argrelextrema(f2, np.greater, order=100)]
        # création de la sortie correspondant au temps d'arrivé du front
de mouillage

```

```

    res = []
    for i in [0, 1]:
        res.append(A[i])
    return res
Res.append(res)
return Res

```

Les résultats mesurés et simulés ont ensuite été comparés en calculant l'erreur quadratique moyenne pour les paramètres t_1 , t_2 et t_a :

$$e_{\text{sum}} = \frac{\sum_{i=0}^n (p_i - p_i^*)^2}{n} \quad (3.4)$$

Où p_i les paramètres représentant les données mesurées (i.e. t_1 , t_2 et t_a), p_i^* les paramètres résultant de la simulation numérique, et n le nombre de paramètres comparés ($n = 28$ ici, soit 20 paramètres représentant la CCE à 0,80 m et 8 représentants les roches stériles à 1,30 m).

3.4 Fonction de boîte noire

Un vecteur de dimension 9 était ainsi composé des conductivités hydrauliques saturées, des valeurs de α_{VG} , et des valeurs de n_{VG} des trois matériaux (Tableau 3.1). L'algorithme utilisait ce vecteur dans le but de compléter le fichier « .mprop » représentant les propriétés des matériaux à l'intérieur du logiciel HydroGeoSphere. Le logiciel était lancé à l'intérieur d'un terminal de calcul par la fonction « subprocess.Popen() » permettant de compiler le fichier « .grok » puis de lancer les calculs numériques avec la commande « ./phgs.exe ». Le résultat de la simulation numérique subissait les traitements de données décrits plus haut (sections 3.3.1) afin de comparer les teneurs en eau volumique simulées avec les données mesurées. Le calcul de l'erreur (équation 3.4) correspondait à la valeur d'objectif du problème d'optimisation. Cet algorithme correspondait à la boîte noire du problème de calibration. Le logiciel Nomad a été utilisé dans cette étude afin de

résoudre l'optimisation de boîte noire. Nomad utilise un algorithme de « Mesh adaptative direct search » afin de résoudre une optimisation de boîte noire (Audet et Dennis 2006) (voir aussi section 2.6.2.4.).

Algorithme Python utilisé comme fonction « objectif » dans le logiciel Nomad afin de minimiser la valeur « objectif » (section 3.3.6) permettant la résolution de la calibration des propriétés hydrogéologiques du modèle numérique :

```
def HGSMModel(params, args):
    # params correspond aux 9 propriétés hydrogéologiques
    #Ksat,  $\alpha$  VG, n VG
    #args correspond à la porosité et à la teneur en eau volumique
    résiduelle
    #paramètres entrés sous forme de log
    #transformation des paramètres d'entrés
    params = [10 ** x for x in params]
    #enregistrer les propriétés dans un fichier texte
    folder = '/TOM/tom0618/optimisationt50' + '/'
    src = open(folder + 'suivi.txt', 'a+')
    src.write('#' + ' ' + str(params) + '\n')
    src.close()
    #mettre les propriétés hydrogéologiques dans le bon format
    #pour la fonction d'édition de .mprop
    params = np.reshape(params, (3, 3))
    params = [list(row) for row in params]
    print(params)
    params.append(args[0][:])
    params.append(args[1][:])
    print(params, args)
    print(params)
    #déterminer le dossier de la calibration
    path = '/TOM/tom0618/optimisationt50'
    #éditer le fichier .mprop
    editMprops(path + '/', params)
    #ouvrir le terminal de commande
    os.chdir(path)
```

```

#exécuter la compilation du dossier .grok
p = subprocess.Popen('./grok.exe')
p.wait()
# réaliser la simulation numérique
p = subprocess.Popen('./phgs.exe')
p.wait()
#extraction des résultats
#obtention des paramètres
#calcul de l'erreur quadratique
etot = comparaison(path)
#écrire le résultat dans un fichier de suivi
src = open(folder + 'suivi2.txt', 'a+')
src.write('#' + ' ' + str(etot) + '\n')
src.close()
os.chdir(path)
# donne l'erreur quadratique moyenne en sortie
return etot

```

3.4.1 Algorithme de Mads

L'algorithme de « mesh adaptatives direct search » est un processus itératif permettant la résolution d'un problème d'optimisation tel que défini à la section 2.6.2.3. Soit X un vecteur linéaire appartenant à l'ensemble Ω tel que :

$$\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n : x_l < x < x_u\} \quad (3.5)$$

Avec x_u est la frontière supérieure et x_l est la frontière inférieure.

Chaque itération (notée k) définit deux paramètres de recherche de valeurs d'essais qui sont définis par le paramètre de taille de la grille Δ_k^m (« mesh size ») et par le paramètre de taille du sondage Δ_k^p . (“poll size”) (Audet, 2014). Le paramètre de la taille de la grille définit la qualité de la grille notée M_k , tel que :

$$M_k = \{x + \Delta_k^m D_z \mid x \in V_k, z \in \mathbb{N}^{n_D}\} \subset \mathbb{R}^n \quad (3.6)$$

Avec V_k un ensemble de solutions à l'itération k appartenant à Ω , D_z correspond à la direction de la recherche et appartient à l'ensemble des directions possibles \mathbb{N}^{n_D} .

Des vecteurs d'entrée sont définis à l'intérieur de cette grille comme des vecteurs d'essai définis par l'ensemble P_k qui correspond à

$$P_k \subseteq \{x \in M_k : \|x - x_k\| \leq \Delta_k^p\} \quad (3.7)$$

: x_k est le vecteur d'entrée à l'itération k , $\| \cdot \|$ est la norme infinie (Audet, 2014).

Cet algorithme permet de définir mathématiquement un ensemble de vecteurs tests à chaque itération afin de conserver la solution optimale et ainsi de suite jusqu'à l'obtention du résultat au problème d'optimisation.

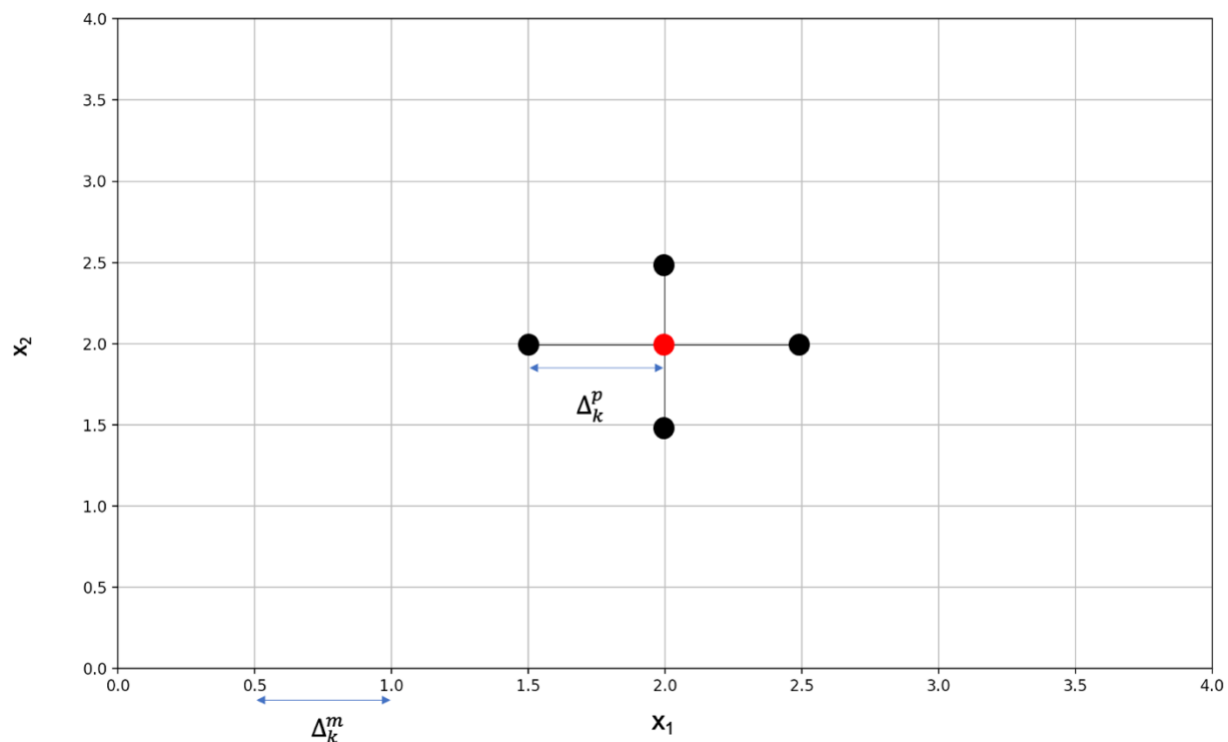


Figure 3.9 : Illustration de la génération des points d'essais lors d'une itération de l'algorithme de Mads dans le cas où $\Delta_k^m = \Delta_k^p = 0,5$. Le point rouge correspond à la valeur d'entrée itérée à l'itération k pour un problème d'itération dans \mathbb{R}^2 . Les points noirs correspondent aux valeurs d'essais proposés appartenant à l'ensemble P_k .

3.4.2 Utilisation du logiciel d'optimisation Nomad

La fonction « objectif » était l'algorithme Python de boîte noire (section 3.4). La valeur d'entrée correspondait aux propriétés hydrogéologiques mesurées de chaque matériau (section 3.3.1; Tableau 3.1). Une fonction logarithme en base 10 a été utilisée pour exprimer les propriétés hydrogéologiques afin d'uniformiser à un même ordre de grandeur les variations à chaque itération du logiciel Nomad (Audet et Hare 2017). Le nombre d'itérations était limité à 100 et la valeur d'arrêt était $\min(e_{\text{sum}}) = 0,02$.

Algorithme Nomad sous sa forme PyNomad permettant l'exécution de la calibration automatisée des propriétés hydrogéologiques :

```
# fonction d'appel de Nomad pour réaliser la calibration
def optimum(path):
    #définir les propriétés comme des variables globales
    global prop
    global params
    # extraire les propriétés hydrogéologiques initiales du fichier
    .mprop
    prop = extrairemprops(path)
    prop = np.array(prop)
    print(prop, 'ok')
    # linéarisation du vecteur d'entrée
    params = np.ravel(np.array([prop[0, :], prop[1, :], prop[2, :]]))
    # transformation en log base 10 des propriétés hydrogéologiques
    params = [log(x, 10) for x in params]
    #rappel des arguments: porosité et teneur en eau volumique résiduel
    args = [prop[3, :], prop[4, :]]
    args = [list(row) for row in args]
    #fonction de boîte noire
    #initialisation vecteur initial xo et options surrogate
    def bb(xo, sgte_eval):
        print(xo)
        #définir la dimension du vecteur linéaire 9 dans ce cas
        dim = xo.get_n()
        #f correspond aux formatages du vecteur xo pour correspondre au
        format numérique du logiciel
        f = [xo.get_coord(i) for i in range(dim)]
        print(f)
        #définir le test lors de l'itération du surrogate
        if (sgte_eval):
            # appel de la fonction surrogate
            g = HGSMODELSGT(f, args)
        else:
            #appel de la boîte noire
```

```

        g = HGSMModel(f, args)
        #définir le nombre de sortie, si contrainte plusieurs sortie
        xo.set_bb_output(0, g)
        return 1 # 1: success 0: failed evaluation
#initialisation des fichiers de suivis
        src = open(os.getcwd() + '/' + 'suivi.txt', 'w')
        src.close()
        src = open(os.getcwd() + '/' + 'suivi2.txt', 'w')
        src.close()
        # limite de l'ensemble Omega
        #limite basse
        lb = [1.2, -0.1, -0.218244625, -1.5, -1.5, -1.5, 0.002, 0.002, 0.002]
        #limite haute
        ub = [3.839478047, 2.635483747, 1, 1.8, 1.8, 1.8, 1.6, 1.6, 1.6]
        # définition des options du logiciel Nomad respectivement:
        #fichier de suivi
        #Taille du paramètre de sondage initial
        #limite de la taille du paramètre de sondage
        #sorti de la boîte noire, ici 1 correspondant à la valeur de sortie
        esum => définis OBJ
        #maximum d'itération autorisé 100
        #valeurs d'arrêt 0.02
        #activé options surrogate
        #affichées les informations à chaque itération
        #suivies pour chaque itération
        #générer un fichier cache
        paramet = ['STATS_FILE stats.txt  BBE BBO CONS_H MESH_SIZE SGTE
STAT_AVG STAT_SUM TIME SOL  f=%.2EOBJ',
                  'INITIAL_POLL_SIZE (0.5 0.5 0.5 0.01 0.01 0.01 0.03 0.03
0.03)',
                  'MIN_POLL_SIZE (0.1 0.1 0.1 0.005 0.005 0.005 0.01 0.01
0.01)', 'BB_OUTPUT_TYPE OBJ',
                  'MAX_BB_EVAL 100', 'F_TARGET 0.1', 'HAS_SGTE yes',
'DISPLAY_STATS BBE THREAD_NUM OBJ',
                  'DISPLAY_ALL_EVAL yes', 'CACHE_FILE cache.txt']
        #lancer le logiciel black box
        [x_return, f_return, h_return, nb_evals, nb_iters, stopflag] =
PyNomad.optimize(bb, params, lb, ub, paramet)
        #visualisation du résultat final dans le terminal
        print('\n NOMAD outputs \n X_sol={} \n F_sol={} \n H_sol={} \n
NB_evals={} \n NB_iters={} \n'.format(x_return, f_return, h_return,
nb_evals, nb_iters))
        #retourne valeur d'entrée optimale
        return x_return

```

La présélection des valeurs d'entrées était contrainte par la fonction « Initial Pole Size » permettant de rester dans des variations représentatives à l'échelle du système d'étude (Tableau 3.4). Les

valeurs d'entrées ont été transformées par la fonction logarithme de base 10 afin de contraindre les variations dans un même ordre de grandeur (Tableau 3.4). Des conditions aux limites ont aussi été spécifiées afin de contraindre les valeurs itérées par le logiciel lors de sa recherche de minimum de la valeur objective (Tableau 3.4).

Tableau 3.4 : Valeurs d'entrées, conditions aux limites et tailles de sondage (« poll size ») utilisées avec Nomad. Les données sont exprimées avec leur forme logarithmique (voir texte pour détails).

| Paramètres | Vecteurs |
|--------------------------------------|---|
| Valeurs d'entrée | [2.64, 1.64, 0.89, 0.89, 0.60, 0.10, 0.37, 0.33, 0.78] |
| Condition frontière inférieure | [1.2, -0.1, -0.22, -1.5, -1.5, -1.5, 0.002, 0.002, 0.002] |
| Condition frontière supérieure | [3.8, 2.6, 1, 1.8, 1.8, 1.8, 1.6, 1.6, 1.6] |
| Taille de sondage initiale | [0.5, 0.5, 0.5, 0.01, 0.01, 0.01, 0.03, 0.03, 0.03] |
| Taille de sondage minimale | [0.1, 0.1, 0.1, 0.005, 0.005, 0.005, 0.01, 0.01, 0.01] |

3.4.3 Fonction « surrogate »

La fonction « surrogate » a été utilisée afin d'accélérer le processus de calibration. Cette fonction est décrite, dans la littérature, comme une fonction simplifiée de la fonction « objectif » utilisée lors de la résolution d'un problème d'optimisation (Audet et Hare 2017). Cette fonction doit répondre à deux critères : (1) être similaire à la fonction « objectif », et (2) avoir un temps de calcul inférieur à la fonction « objectif ». Dans le cas présent, la fonction « surrogate » utilisée

correspondait à une simulation de 10 jours sans précipitations à l'exception de l'essai I-C qui se produisait le deuxième jour de simulation. Le maillage était aussi plus grossier avec des mailles parallélépipédiques de $0,5 \times 0,25 \times 0,50$ m pour le cœur de la halde (roches stériles). La couche CCE et la couche d'anorthosite concassée étaient constituées de mailles de $0,25 \times 0,25 \times 0,18$ m et de $0,25 \times 0,25 \times 0,08$ m, respectivement. Le modèle était constitué de 274 000 éléments. Les conditions initiales et les conditions aux frontières restaient similaires à celles présentées précédemment (section 3.2.2). Ces simplifications ont permis d'obtenir un temps de calcul de 15 min, ce qui était plus de 13 fois plus rapide que la simulation numérique principale. La fonction « surrogate » permettait d'effectuer une présélection rapide des propriétés hydrogéologiques lors d'une itération de l'algorithme de Mads. Les propriétés hydrogéologiques sélectionnées par la fonction « surrogate » étaient par la suite utilisées à l'intérieur de la simulation principale. Cette approche permettait de réduire significativement le temps de calibration par l'approche présentée dans ce mémoire.

3.4.4 Validations des propriétés hydrogéologiques calibrées

Les propriétés hydrogéologiques calibrées ont été utilisées pour simuler la réponse hydrogéologique de la halde à stériles expérimentale pendant une période d'environ 17 mois (du 4 avril 2016 au 13 septembre 2017), comportant les étés 2016 et 2017. Cette simulation numérique incluait les précipitations et les essais d'infiltrations I-A à I-D (Figure 3.2). Les teneurs en eau volumique à 0,80 m de profondeur obtenues par la simulation numérique ont été comparées aux mesures des teneurs en eau volumique par les différentes sondes (Figure 3.1) afin de valider la capacité du modèle calibré à représenter le comportement de la halde pour des conditions climatiques variées et réelles. La fonction de précipitations comportait notamment deux événements extrêmes de précipitation (section 3.1.). Les périodes de gel et de fontes des neiges n'ont pas été simulées.

3.4.5 Analyse paramétrique

Différents paramètres ont par la suite été testés afin de comparer leur influence sur les résultats de la calibration.

3.4.5.1 Réduction du nombre de sondes

Les algorithmes python présentés précédemment (section 3.3; section 3.4) ont été uniquement appliqués sur les teneurs en eau volumique mesurées et simulées correspondant aux sondes P1 et P6. Les paramètres t_1 et t_2 ainsi obtenus à ces deux positions ont été utilisés afin d'effectuer une nouvelle calibration automatisée de la simulation numérique. La méthode de calibration restait similaire à la précédente calibration et utilisait les mêmes paramètres utilisés dans le logiciel nomade (section 3.4).

3.4.5.2 Calibration sur la base des débits de sortie pendant l'essai I-C

L'optimisation a aussi été basée sur les débits de sorties, plus spécifiquement sur le temps d'arrivée du front de mouillage dans chaque lysimètre. Les débits de sortie ont été mesurés manuellement au cours du suivi de l'essai I-C. La calibration a nécessité la création d'une fonction permettant l'extraction de cette information dans le fichier « water_balance » obtenu après chaque simulation numérique du logiciel HydroGeoSphere. L'algorithme permettait d'extraire les flux traversant les six lysimètres, puis le volume d'eau cumulatif était calculé au cours des 7 jours suivant l'essai I-C. Enfin, la méthode de la valeur maximale sur la dérivée seconde permettait d'obtenir le temps d'arrivée du front de mouillage dans les lysimètres.

Algorithme permettant l'extraction des flux simulés. Les flux y sont traités puis transformés en volume d'eau cumulé afin d'extraire le temps d'arrivée du front de mouillage dans les lysimètres suite à l'essai I-C.

```
def comparaison2(path):
    #extraire flux du fichier "water_balance"
    def volume(input_file):...
        return P, L

    #l correspond aux flux des 6 lysimètres selon t
    t, l = volume(path)
    #restreindre à I-C
    t0 = t.index(t[np.abs(np.array(t) - 37.86).argmin()])
    t1 = t.index(t[np.abs(np.array(t) - 42.86).argmin()])
    T = [t[i] for i in range(t0, t1)]
    L2 = []
    for e in range(6):
```

```

        L = [l[e][i] for i in range(t0, t1)]
        L2.append(L)
    V=[]
    #calculer le volume cumulé
    for e in range(6):
        v=[-L2[e][i - 1] * (T[i] - T[i - 1]) for i in range(1, len(T))]
        sv=[sum(v[0:i]) for i in range(1, len(T))]
        V.append(sv)
    #obtenir ta avec la dérivé seconde
    def interpol(t, z):
        lin = np.linspace(38, 44.9, 1000)
        f = interpolate.interpld(t, z, kind='slinear')(lin)
        fp = np.gradient(f, lin)
        fpp = np.gradient(fp, lin)
        i = lin[argrelextrema(fpp, np.greater, order=1000)]
        return i
    ta=[]
    for e in range(6):
        i=interpol(T,V[e])
        ta.append(i)

    return

```

3.5 Optimisation de la conception de la CCE

Un problème d’optimisation de la méthode de la couche de contrôle des écoulements a également été résolu en modifiant l’algorithme de calibration automatisée présenté plus haut. Le vecteur d’entrée se composait de l’épaisseur et des propriétés hydrogéologiques (conductivité hydraulique saturée et paramètres de van Genuchten) de la CCE.

Le problème d’optimisation a ici été simplifié en retirant la couche de protection en roches stériles concassées. La CCE possédait une épaisseur initiale de 0,7 m et un algorithme permettait à chaque itération de modifier le fichier « .grok » afin de modifier la géométrie du modèle numérique. L’épaisseur était contrainte entre 0,4 et 1,4 m. Les autres valeurs d’entrées restaient les propriétés hydrogéologiques correspondant aux fonctions précédentes d’écriture et de lecture des fichiers « .mprop ».

Algorithme d’écriture de l’épaisseur dans le modèle numérique :

```

# Modifier l'épaisseur de la CCE
def editgrok(folder, params):
    # params[0]=e Params[1]=theta

```

```

src = open(folder + 'mois.grok', 'r')
src_lines = src.readlines()
src.close()
#extraire les lignes
l36 = src_lines[36].split()
l26 = src_lines[26].split()
#modifier l'épaisseur de la CCE
l36[0] = str(params[0] + float(l26[0])) # e
src_lines[36] = '\t' + " ".join(l36) + '\n'
src = open(folder + 'mois.grok', 'w')
src.writelines(src_lines)
src.close()
return

```

Une fonction a été ajoutée à l’algorithme (section 3.4) permettant le calcul du débit sortant cumulé dans chaque lysimètre. Le volume d’eau cumulé était calculé 7 jours après l’essai I-C dans les lysimètres 1 à 5 (Figure 3.1). La valeur « objectif » à minimiser lors de l’optimisation correspondait à la somme des volumes récupérés dans ces lysimètres. La fonction « objectif » était similaire au problème de calibration précédent, à la différence près que la valeur « objectif » qui correspondait à la somme des volumes d’eau cumulée 1 à 5 après 7 jours suivant l’essai I-C. L’algorithme a ainsi été adapté pour évaluer les propriétés hydrogéologiques et l’épaisseur de la couche de contrôle des écoulements dans le but de minimiser l’infiltration d’eau dans les roches stériles réactives. En d’autres termes, les volumes d’eau cumulés devaient être minimaux dans les lysimètres L1 à L6.

Algorithme Python permettant l’obtention de la valeur cible de l’algorithme de boîte noire pour l’optimisation de la conception de la CCE :

```

def comparaison2(path):
    #extraire flux du fichier "water_balance"
    def volume(input_file):...
        return P, L
    #l correspond aux flux des 6 lysimètres selon t
    t, l = volume(path)
    #restreindre à I-C
    t0 = t.index(t[np.abs(np.array(t) - 37.86).argmin()])
    t1 = t.index(t[np.abs(np.array(t) - 42.86).argmin()])
    T = [t[i] for i in range(t0, t1)]
    L2 = []
    for e in range(6):
        L = [l[e][i] for i in range(t0, t1)]
        L2.append(L)

```



```

V=[]
#calculer le volume cumulé
for e in range(6):
    v=[-L2[e][i - 1] * (T[i] - T[i - 1]) for i in range(1, len(T))]
    sv=[sum(v[0:i]) for i in range(1, len(T))]
    V.append(sv)
#obtenir le volume sortant à 7 jours
V7=[]
for e in range(6):
    v7=V[e][t1]
    V7.append(v7)
# somme des 5 premiers lysimètres
dV = sum(V7[0:4])
# valeur à minimiser
return dV

```

Les propriétés du sable de la CCE étaient limitées dans des plages de valeurs correspondant aux propriétés hydrogéologiques typiques d'un tel matériau (Hillel, 1998) (Tableau 3.5). Le logiciel a ainsi itéré différentes conceptions et réalisé les simulations numériques permettant de tendre vers la solution (i.e. le design) permettant la plus grande déviation capillaire.

Tableau 3.5 : Valeurs d'entrées utilisées dans le processus d'optimisation de la CCE. Les limites supérieures et inférieures utilisées dans le logiciel Nomad sont aussi présentées.

| | Épaisseur (m) | Conductivité hydraulique saturée (m/s) | α_{VG} (m) | n_{VG} (-) | Porosité (-) |
|------------------------|------------------|---|----------------------|-----------------|-----------------|
| Limites inférieures | 0,50 | $2,20 \times 10^{-5}$ | 0,10 | 1,05 | 0,20 |
| Valeurs initiales | 0,70 | $9,00 \times 10^{-5}$ | 1,25 | 6,00 | 0,30 |
| Limites supérieures | 1,12 | $1,00 \times 10^{-3}$ | 56,23 | 25,12 | 0,40 |

CHAPITRE 4 ARTICLE 1 : AN AUTOMATED APPROACH TO CALIBRATE NUMERICAL SIMULATIONS AND OPTIMIZE COVER DESIGN : APPLICATION TO A FLOW CONTROL LAYER CONSTRUCTED ON AN EXPERIMENTAL WASTE ROCK PILE

Tom Crouzal^{1,2} & Thomas Pabst^{1,2}.

¹*Polytechnique Montreal, Qc, Canada*

²*Research Institute of Mines and Environment (RIME)*

Submitted to Vadose Zone Journal

Abstract

Mining operations often produce large volumes of waste rock to access economically valuable mineralized zones. Waste rock is usually stored in surface piles, which construction and reclamation represent a challenge for the industry. A flow control layer (FCL), made of crushed waste rock or sand, and constructed on top of each waste rock bench, could contribute to control water infiltration, thus improving waste rock pile stability and limiting contamination. An experimental waste rock pile was built and instrumented at the Tio mine (Rio Tinto Fer et Titane, Canada) to evaluate the performance of an FCL in field conditions. Large infiltration tests and rainfall monitoring were carried out, and measured outflow and volumetric water contents were used to calibrate numerical simulations. However, data were noisy and sometimes incomplete, and the models were difficult to calibrate. A new automated calibration approach was therefore proposed. An algorithm was developed to automate the numerical simulation calibration, using a black box method which involves solving an optimization problem on a function without an analytic form. The approach was applied on measurements obtained from large scale infiltration tests and validated using two years of field monitoring data. The robustness of the technique was also evaluated by varying input parameters. Finally, the automated approach was adapted to optimize the design of the FCL, and an optimal construction design (material properties and layer thickness) was recommended based on local climate conditions. The proposed automated method could contribute to reduce the bias induced by manual calibration and allows for rapid multi-variable calibration and optimization for a broad spectrum of mine waste cover system applications.

Keywords:

Waste rock, Waste rock pile, Numerical simulation, Calibration, Optimisation, Unsaturated Hydrogeology

4.1 Introduction

Mining operations produce large volumes of waste rock to access economically valuable mineralized zones. Waste rock is characterized by a wide range of particle sizes, from metric blocs to clay size particles (Michel Aubertin, Bussière, & Berner, 2002; Trudinger & Spitz, 2008), and is usually stored in surface piles, which height can exceed hundreds of meters and which surface can cover dozens of hectares (Hawley & Cuning, 2017; McCarter, 1990). Waste rock piles are usually built on the surface and therefore exposed to atmospheric conditions. The exposition of sulfide minerals (often contained in waste rock) to water and oxygen can result in acid mine drainage (AMD, characterized by low pH and high concentrations of sulfates and dissolved metals (Akcil & Koldas, 2006; Molson et al., 2005). Some sulfide minerals may also oxidize without producing acid, or acidity may be neutralized by carbonate minerals. In this case, the release of metals and metalloids such as As, Co, Ni, and Zn could contribute to generate contaminated neutral drainage or CND (Benzaazoua et al., 2013; Plante et al., 2010). Reclamation approaches to prevent AMD or CND generation usually involve cover systems that aim to control oxygen and/or water flux (Michel Aubertin et al., 2016). Such techniques, including covers with capillary barrier effects (M Aubertin et al., 2009) and elevated water table combined with monolayer covers (Michel Aubertin et al., 2016; Pabst et al., 2017) were proven efficient to reclaim tailings storage facilities. However, reclamation of waste rock piles remains challenging, because of the size of the structures, the steep slopes (close to waste rock repose angle) and the deep-water table (Aubertin et al., 2013).

A new method was, therefore, recently proposed to improve geochemical and geotechnical stability of waste rock piles during construction (progressive reclamation) and after closure (M Aubertin et al., 2013; Michel Aubertin, Bussière, Bernier, et al., 2002; Fala et al., 2005). This approach consists in building a flow control layer (FCL) on top of each bench of the pile. This FCL is made of compacted fine-grained materials, such as sand or crushed waste rock, and is inclined by around 5% towards the exterior of the waste rock pile. Fine grained materials create a capillary barrier effect with the underlying coarse waste rock, therefore preventing downwards infiltration. FCL slope enhances lateral diversion of water, thus preventing contacts with potential AMD/CND generating waste rock. More details about the FCL concept can be found in Aubertin et al. (2002b) and Broda et al. (2014). The method was validated at a

large scale using an experimental waste rock pile built at the Tio mine (Rio Tinto Fer et Titane, Quebec, Canada). More details about the construction, properties, and monitoring of the experimental pile are given below.

Field data recorded *in situ* during a two-year monitoring period were then used to calibrate hydrogeological numerical simulations. The objective of numerical simulations was to extrapolate field results and optimize the FCL design, for this site and other mine sites with different climatic conditions.

4.2 Background on calibration approaches

Calibration, sometimes also referred to as inverse problem (He et al., 2013; Zhou et al., 2014), aims to determine unknown or uncertain model parameters (e.g. material hydrogeological properties such as porosity, hydraulic conductivity, or air entry value) based on experimental measurements (typically volumetric water contents, suctions or water flow) to simulate as accurately as possible observed behavior (here hydrogeological flow). A trial and error approach is often used, where model parameters are manually changed after each simulation run until the results of the numerical simulation correspond well to the data measured in the field (Neuman 1973). However, this approach often requires testing numerous combinations of parameters and can be time-consuming (Carrera et al., 2005). Also, calibration can be contradictory, while some parameter modifications may improve some results but alter the quality of others (Zhou et al., 2014). Several improvements have therefore been proposed since, following the development of calculation tools.

Inverse problems are nowadays often automatized using algorithms to solve various types of calibration problems (Carrera et al., 2005; He et al., 2013; Zhou et al., 2014). The quality of data used for calibration remains of uttermost importance (Carrera et al., 2005; He et al., 2013). However, these are often deteriorated by time (sensors tend to have a limited service life) and by natural heterogeneity. Moreover, the scale effect can also impact the quality of the calibration. Data are often obtained from local and punctual measurements such as boreholes, small lysimeters, and probes, but are used to describe large scale hydrogeological behavior and resolve continuous models (Emsellem & De Marsily, 1971; He et al., 2013; Zhou et al., 2014). The impact of local variations on the whole numerical model can therefore sometimes be exaggerated. The numerical model discretization needs to be adapted to those constraints which often results in a significant increase in the computational time. Parallelization (Tavakoli et al.,

2013) and surrogate models (Awotunde & Horne, 2011) can reduce the calibration time and are included in many different hydrogeological calibration problems such as geostatistical inversion and geological inversion (Carrera et al., 2005; Zhou et al., 2014).

Using inverse approaches and optimization methods in unsaturated hydrogeology remains, however, complex because of the non-linearity of the material hydrogeological properties (such as the water retention curve or the permeability function) required to solve Richards' equation (Hollenbeck and Jensen 1998). However, recent developments in similar domains have proposed several approaches to tackle these challenges (Carrera et al., 2005; He et al., 2013; Zhou et al., 2014). For example, the approaches used in geophysics directly resolves the inversion on the equation that links electrical resistivity and volumetric water content (Carrera et al., 2005; Dimech et al., 2019), and spectral analysis can be used to determine transfer functions between inflow and outflow to represent the hydrogeologic behavior of a waste rock pile (Trinchero et al., 2011). These methods work well to represent the heterogeneity of a hydrogeologic system, but they are dependent of an analytic form between those measurements and the properties of the materials (Turunen et al., 2020). Various studies also proposed to use metaheuristics optimization methods to resolve inverse problems without a direct analytic objective function (Abbaspour et al. 2001). Metaheuristic algorithms are mathematical functions that search for the best neighborhood solution. Monte Carlo and Ant-Colony algorithms are among the most common metaheuristics approaches (Abbaspour et al., 2001; Zhou et al., 2014). An Ant-Colony algorithm was for example used to calibrate the water retention curve in an experimental soil cover based on field measurements of the pressure head (Abbaspour et al., 2001). The convergence of metaheuristics methods is not mathematically proven and requires a large number of iterations to obtain an optimal solution. Such approach may therefore not be adapted when the objective function is based on time consuming numerical simulations. To solve this issue, a derivative free algorithm was created by Gerad (Groupe d'Études et de Recherche en Analyse des Décisions, Polytechnique Montreal) to resolve black box optimization and shorten the number of iterations (Audet & Hare, 2017).

Black box optimization aims to resolve a non-derivative and non-continuous function with no analytical equation (Audet & Kokkolaras, 2016). The solver is based on derivative free mathematics and mesh algorithm (Audet and Kokkolaras 2016; Audet and Hare 2017). The mesh adaptative direct search (Mads) algorithm used in the black box optimization is an iterative algorithm generating trial points on a mesh that represents the entry variable discretization space to resolve the black box functions. The step size between each iteration in the Mads algorithm is defined by two parameters: the mesh size parameter

Δ_k^m and the poll size parameter Δ_k^p (Audet, 2014). The mesh size parameter defines the coarseness or fineness of the mesh M^k as:

$$M_k = \{x + \Delta_k^m D_z x \in V_k, z \in \mathbb{N}^{n_D}\} \subset \mathbb{R}^n \quad (4.1)$$

where V_k is the current iteration, $\Delta_k^m \in \mathbb{R}^+$ is the mesh size, n is the number of directions, and D is a fixed set of n_D directions in \mathbb{R} .

The poll set P_k defines the trial points inside the mesh M_k corresponding to mesh points distant from x_k using a bound set by a constant $c > 0$ applied on the pole size parameter Δ_k^p (Audet, 2014):

$$P_k \subseteq x \in M_k \parallel x - x_k \parallel \leq c \Delta_k^p \quad (4.2)$$

The iterations process starts with a user-defined starting point $x_0 \in \mathbb{R}^n$ with $f(x_0) < \infty$, and initial mesh and poll size parameters (typically $\Delta_0^m = \Delta_0^p = 1$) (Audet, 2014). The algorithm iterates the functions SEARCH and POLL to evaluate trial points and determine the most feasible one. The algorithm updates a new starting point V_{k+1} and the mesh and poll size parameters Δ_{k+1}^m and Δ_{k+1}^p until the stopping criteria is met.

The black box optimization approach was successfully used in several projects in civil engineering for example to optimize seismic dumper (Bigdeli et al., 2012), to calibrate a source and sinks numerical model (Guay et al., 2015; Minville et al., 2014), and to optimize well design (Isebor et al., 2014).

In this study, a black box optimization approach was used to calibrate the numerical simulations of the experimental waste rock pile at Lac Tio mine. Waste rock and cover materials hydrogeological properties (i.e. water retention curve, saturated hydraulic conductivity) were calibrated to simulate the volumetric water content variations measured in the waste rock pile. Calibration was carried out on data collected during large scale infiltration tests (see below) and validated using 17 months of field monitoring.

4.3 Methodology

4.3.1 Experimental waste rock pile and field monitoring data

An experimental pile was built and instrumented at the Tio mine (Rio Tinto Fer et Titane, Quebec, Canada) to evaluate the performance of a FCL at a large scale and in real field conditions (Figure 4.1) (Martin et al., 2017, 2019).

The experimental waste rock pile was 70 m long and around 10 m wide (Figure 4.1). The maximum height was 7 m and the surface of the pile was inclined with a 5 % slope. The FCL was made of a 0.7 m compacted sand layer covered by a 0.3 m layer made of crushed anorthosite. The core of the experimental waste rock pile was made of CND-generating ilmenite waste rock. Non-reactive anorthosite (i.e. non contaminating) waste rock was placed in the last ten meters ($x = 60\text{--}70\text{ m}$), where water was expected to infiltrate after deviation. FCL and waste rock hydrogeological properties were evaluated *in situ* and the laboratory. The FCL sand was characterized by a saturated hydraulic conductivity between 2×10^{-5} and $5 \times 10^{-3}\text{ m/s}$, an air entry value of 2 kPa, and a water entry value of 11 kPa (Bréard Lanoix et al., 2020). The crushed anorthosite had a hydraulic conductivity around $5 \times 10^{-4}\text{ m/s}$, with an air entry value of 1 kPa and a water entry value around 13 kPa (Dubuc et al., 2017). The saturated hydraulic conductivity of both ilmenite and anorthosite waste rock was approximately $1 \times 10^{-3}\text{ m/s}$ (Dubuc et al., 2017; Anna Peregoedova et al., 2013), with an air entry value between 0.2 kPa and 0.7 kPa, and a water entry value around 6 kPa (Dubuc et al., 2017; A Peregoedova et al., 2014).

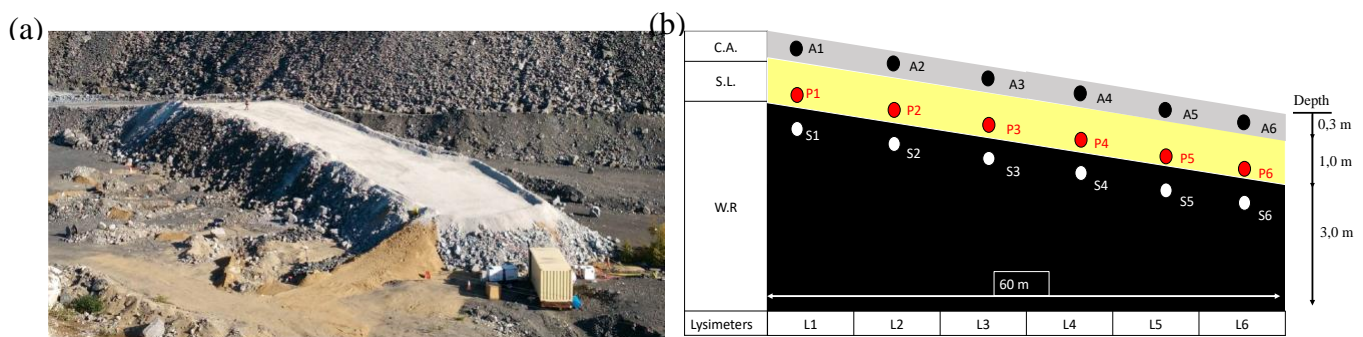


Figure 4.1 : (a) Experimental waste rock pile at Lac Tio mine (credits: RIME) and (b) simplified cross section of the waste rock pile with instrumentation. The experimental pile was 70 m long and 10 m wide, with a maximal height of 7 m and a 5% slope (towards the bottom right of the picture). Waste rock (WR) was covered by a 0.7 m thick sand layer (SL) and a 0.3 m thick crushed anorthosite layer

(CA). Locations of GS3 probes are shown with color points. A1-A6 sensors, (Black), P1-P6 sensors (red), and S1-S6 sensors (white) were placed 0.25 m, 0.80 m, and 1.30 m below the surface, respectively. Lysimeter positions (L1-L6; see text for details) are also shown.

Hydrogeological response of the system to climatic conditions was monitored for two years, between April 2016 and September 2017. Six large scale infiltration tests (I-A to I-E) were also conducted to evaluate the pile hydrogeological response under controlled conditions (Dubuc et al., 2017). Tests I-C and I-D reproduced large precipitation events, with 28 m³ (47 mm) and 16.8 m³ (28 mm), respectively, sprayed at the surface of the experimental waste rock pile with a water truck over 10 h (Dubuc et al., 2017; Martin et al., 2019). An impermeable cover was installed 6 days after test I-D occurred to prevent the infiltration of the precipitation.

Six lysimeters were built at the bottom of the pile (Figure 4.1b) to collect and measure water outflow and characterize water quality (not discussed here; see Poaty et al. 2018). Volumetric water content probes (GS3; Decagon Devices Inc.) were installed at 0.80 m (sand) and 1.40 m (waste rock) below the surface every ten meters along the centerline of the waste rock pile (Figure 4.1b) (Broda et al., 2017; Martin et al., 2017). Volumetric water contents were recorded every 15 minutes for all the monitoring period. Measures recorded at 0.80 m depth during tests I-C and I-D (from June 7 to June 21, 2017) are presented in Figure 4.2 and are typical of the hydrogeological response of the system to infiltration. Volumetric water contents were initially low around 0.10 and rapidly started to increase around 4.5 hours after test I-C started. Volumetric water content reached a peak (0.17) around 10.3 hours after the beginning of the infiltration test, and then started to decrease again, but more slowly, towards its initial value. The hydrogeological response of the FCL was similar for test I-D (Figure 4.2) and other precipitation events, but the amplitude of the peak depended on the precipitation magnitude.

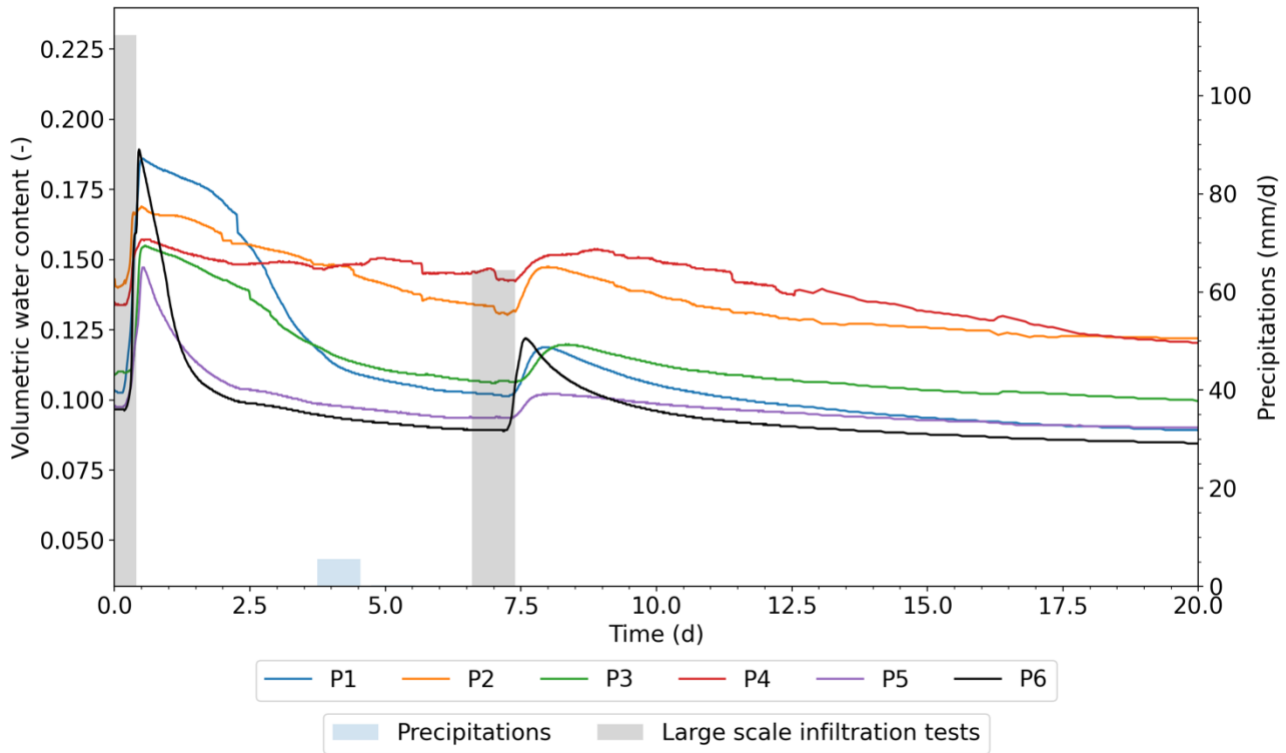


Figure 4.2 : Measured volumetric water content 0.80 m below the surface and for different positions inside the experimental pile (see Figure 4.1 for the position of probes P1 to P6). Precipitations are represented in blue and the large infiltration tests I-C and I-D in grey. Time $t = 0$ d corresponds to the start of test I-C, i.e. June 7, 2017. Test I-D started at day 7, i.e. June 14, 2017.

4.3.2 Data treatment

Volumetric water content data were noisy and difficult to integrate directly into a calibration process (Figure 4.2). Data were therefore treated to facilitate the automation of the calibration. First, the noise was filtered by applying a spectral low pass filter on the volumetric water content time series (Figure 4.3). The objective was to damp small volumetric water content variations and to increase the precision of the computation of the wetting front arrival time. The spectral filter cut the frequency higher than 2.3×10^{-5} Hz, which corresponded to a periodic variation of 0.5 d (Figure 4.3b). Filtered volumetric water contents were very close to raw measurements, but some variations were exaggerated which were beneficial to automatically determine arrival time (Figure 4.3c).

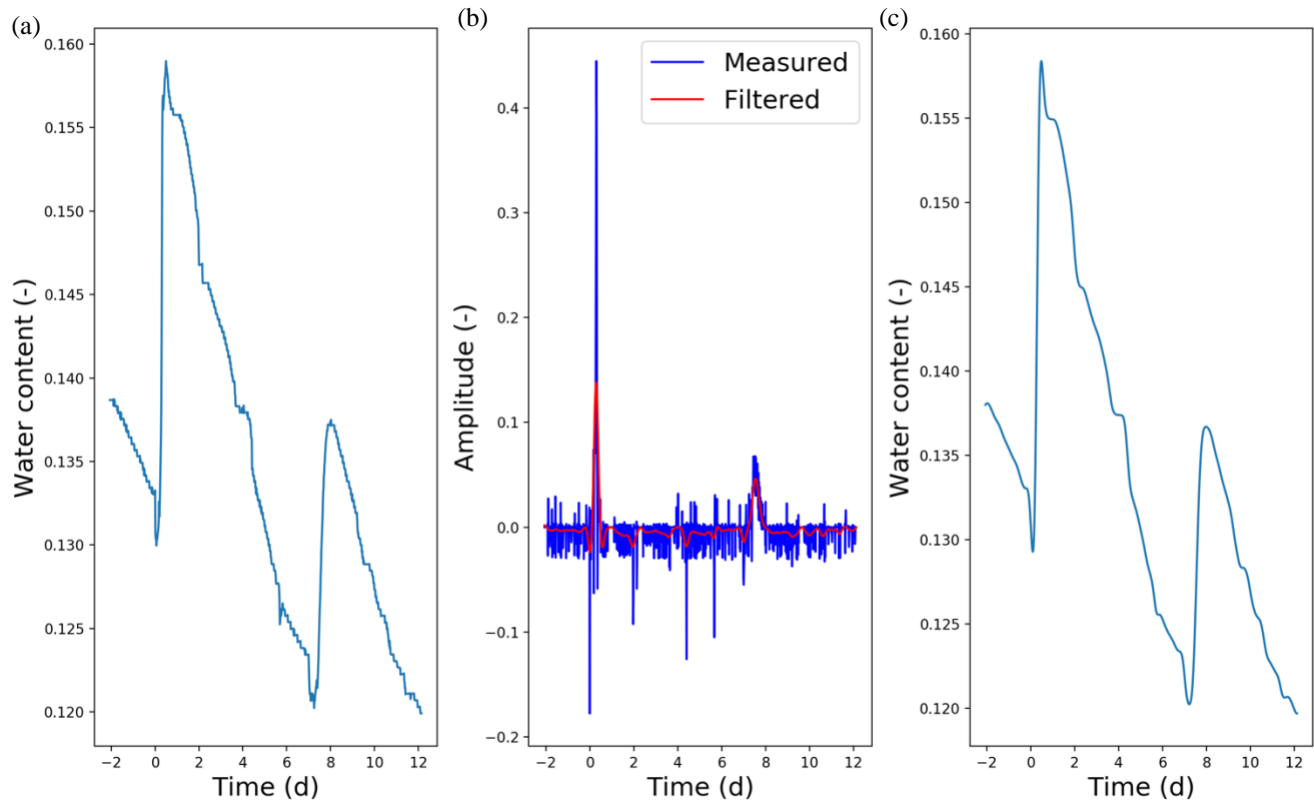


Figure 4.3: (a) Volumetric water content variations measured at P2 (0.80 m below the surface; see Figure 4.1b for sensor location) during tests I-C and I-D (b) variation frequency with low pass spectral filtration to remove periodic variation below 0.5 d (see text for details) and (c) filtered volumetric water content variations used to determine the arrival time of the wetting front. The same filter was applied to the other measurements.

Three characteristic parameters were then chosen to represent the variations of the volumetric water content in the FCL and waste rock. Time t_1 corresponded to the time required to reach 50% of the maximum increase (peak) of the volumetric water content induced by the infiltration (Figure 4.4). Time t_2 corresponded to the time necessary to reach 50% of the difference between the maximum and minimum volumetric water content during drainage. Time t_a corresponded to the arrival time of the wetting front in the waste rock, 1.4 m below the surface. Parameters t_1 , t_2 , and t_a were determined for each probe and both tests I-C and I-D.

These parameters were chosen to limit the number of comparison points and accelerate the automated calibration process, and to normalize the comparison of less biased data to reproduce the volumetric water content variations. Times t_1 and t_2 were directly linked with the wetting front passage and the

drainage velocity. Wetting front arrival time t_a in the waste rock was a useful indication of the water behavior at the interface between the FCL and the waste rock. The reduction of comparison parameters (instead of using the whole volumetric water content time series), also permitted to limit the risk for underfitting that may occur for high variance problems and which often results in a linear and non-representative solution (Fienen et al., 2009; Poeter & Anderson, 2005). Finally, the chosen calibration parameters were not mathematically derived from Richard's law, thus allowing for a more flexible optimization algorithm that could be more easily reused in the optimization objective function (see below).

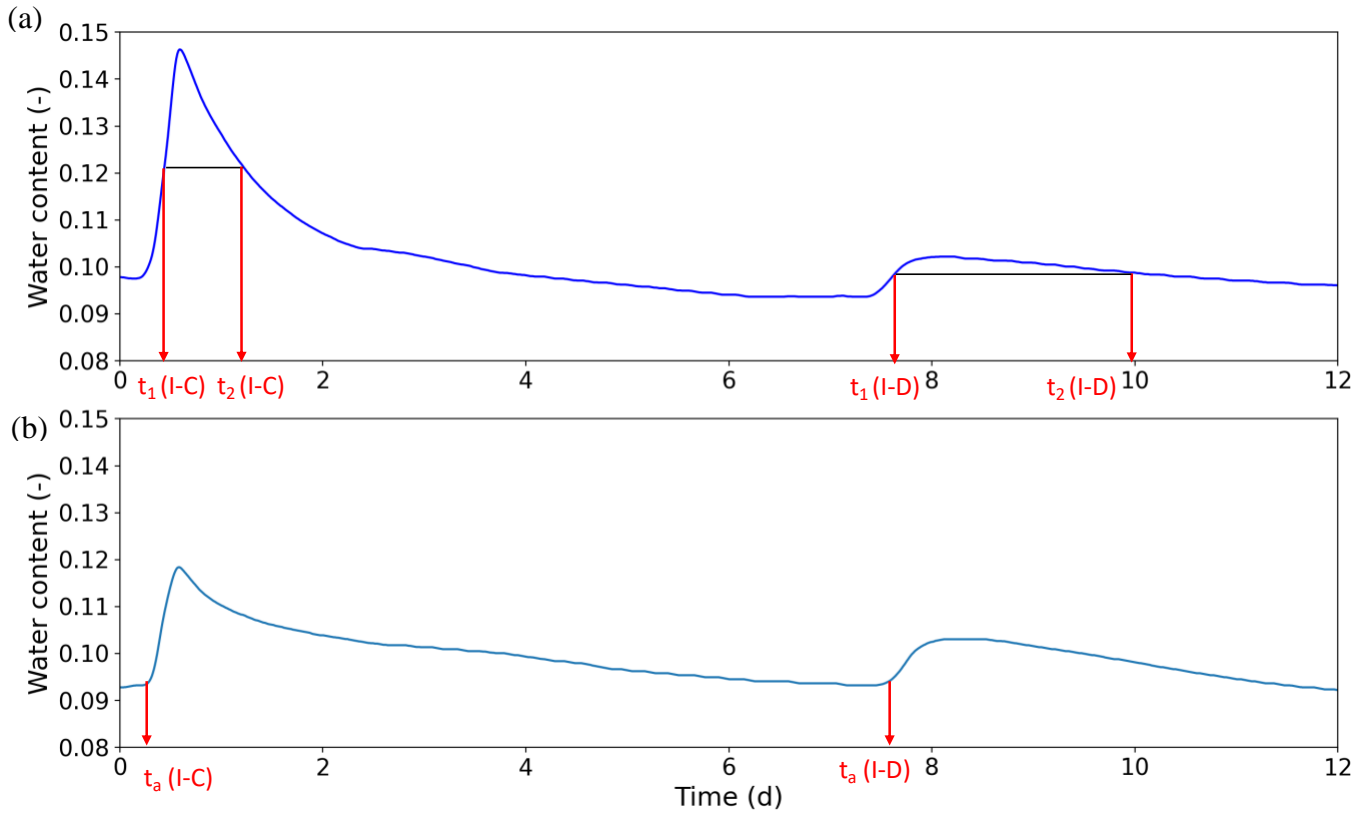


Figure 4.4 : (a) Determination of parameters t_1 , t_2 for sensor P5 (0.80 m below the surface, in the FCL) during tests I-C and I-D; (b) determination of t_a (arrival time) for sensor S5 (1.40 m below the surface) during tests I-C and I-D.

4.3.3 Numerical simulations

In this study, the equivalent porous method was used to simulate water flow in the experimental waste rock pile implicitly assuming that waste rock, sand, and crushed waste rock were homogeneous. The

numerical simulations were carried out using the software HydroGeoSphere (HGS, Aquanty). HGS resolves the 3D Richards' equation for subsurface flow using the control volume finite element approach (Brunner & Simmons, 2012).

The geometry of the waste rock pile was simulated as a 60 m by 10 m trapezoid, with a maximal height of 7 m and a surface slope of 5%, mimicking the experimental waste rock pile in the field (Figure 4.5). The mesh was formed of hexahedral structured blocks of $0.25\text{ m} \times 0.25\text{ m} \times 0.20\text{ m}$. Mesh was refined to $0.25\text{ m} \times 0.25\text{ m} \times 0.06\text{ m}$ in the FCL. Material properties included the saturated hydraulic conductivity and van Genuchten (1980) parameters to describe the water retention curve (Tableau 4.1). Initial properties were obtained based on laboratory and field measurements (Bréard Lanoix et al., 2020; Dubuc et al., 2017). Initial conditions were defined as isostatic conditions. The simulations then computed the 38 days before the start of test I-C to simulate more realistic initial conditions before the large infiltration tests. The boundary condition at the bottom of the waste rock pile was a fixed pressure head of 0 m to simulate the position of the water table in the lysimeters (Figure 4.5). At $x = 60\text{ m}$, a vertical seepage face simulated a Neumann boundary to ensure the continuity of the water flow towards the exterior of the waste rock pile (Figure 4.5). Infiltration tests and precipitations were simulated by applying a unit flux condition on the top boundary (Figure 4.5).

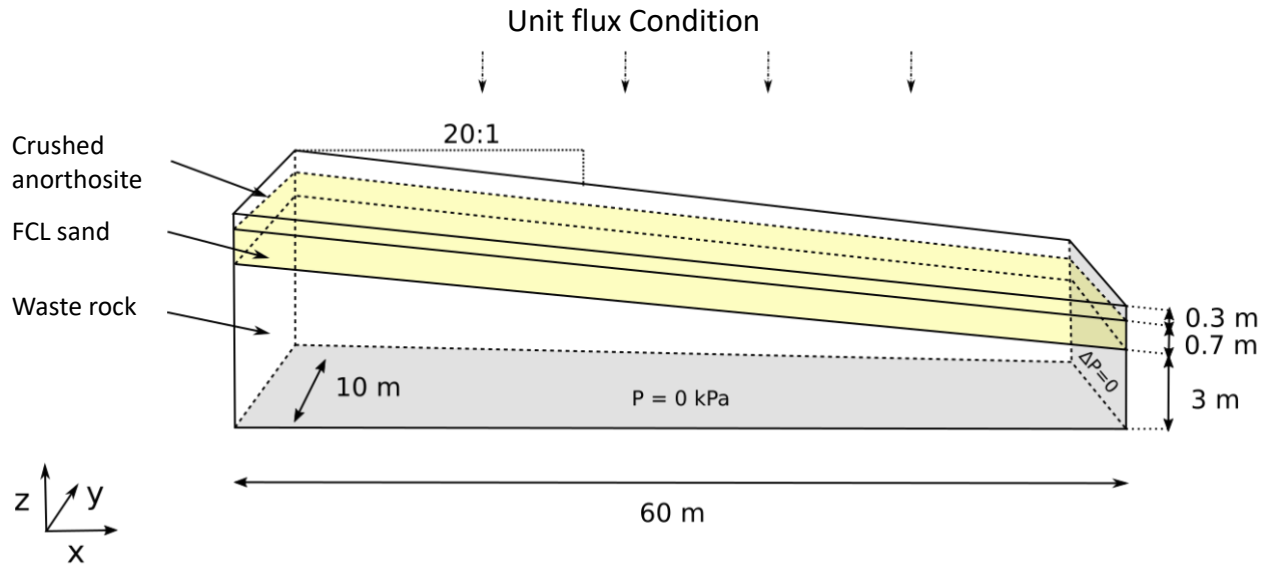


Figure 4.5 : The geometry of the conceptual model of the Lac Tio experimental waste rock pile used inside HydroGeoSphere. Four boundary conditions were used: (1) a water table condition at $z = 0$ m simulated water retention in the lysimeters; (2) a Neumann condition at $x = 60$ m simulated the continuity of the water flux, (3) a flux function at the top of the model reproduced the precipitations and the infiltration tests, and (4) an impermeable boundary condition applied to face $x = 0$ m, $y = 0$ m and $y = 10$ m.

4.3.4 Automated calibration approach

Numerical simulation results were extracted, and simulated and measured t_1 , t_2 , and t_a were compared by calculating the mean value of the quadratic error:

$$e_{\text{sum}} = \frac{\sum_{i=1}^n (p_i - p_i^*)^2}{n} \quad (4.3)$$

Where p_i is a measured parameter, p_i^* is a simulated parameter, n is the number of parameters. Parameters p_i in equation (4.3) corresponded to t_1 , t_2 , and t_a during tests I-C and I-D. A total of 36 parameters were used for the comparison.

The objective of the optimization was to minimize the value of e_{sum} by varying the input properties (i.e. the hydraulic conductivity, α_{VG} , and n_{VG} for each of the 3 materials). The hydrogeological properties were bounded to correspond to a realistic range of properties for the different materials composing the waste rock pile. For example, the minimum and maximum saturated hydraulic conductivity of the FCL sand was 5×10^{-6} m/s and 1×10^{-3} m/s respectively, typical values for such material (Hillel, 1998). The software Nomad (Le Digabel, 2011) was used for the calibration. Nomad is a mesh adaptative detection search (Mads) software developed to resolve black box optimization (Audet & Dennis, 2006). Nomad is a user-friendly software using a pseudo-code that can be embedded in a python code.

A surrogate function (He et al., 2013; Le Digabel, 2011; Minville et al., 2014) was also developed, based on the same algorithm. The objective of the surrogate was to accelerate the optimization process and to find neighbor solutions quicker. In other words, the number of iterations was decreased and the calculations were faster, using the parallelization option in HGS software (He et al., 2013; Le Digabel, 2011). The numerical simulations running time was reduced during the surrogate iterations by applying a simulated precipitation function of only 12 days instead of 60 days.

4.4 Results

4.4.1 Calibration results

The black box algorithm iterated an important number of possible hydrogeologic properties until it converged (i.e. before the value of e_{sum} was minimum). The solution obtained had an error $e_{\text{sum}} = 0.019$. The calibrated saturated hydraulic conductivities for the sand of the FCL and the waste rock were somewhat greater than measured (Tableau 4.1), but differences were limited and smaller than one order of magnitude. The calibrated hydraulic conductivity of the crushed anorthosite was around one order of magnitude smaller than the measured value in the laboratory. This difference could be explained (in part) by the significantly higher density observed *in situ* (Dubuc, 2018).

The calibrated water retention curves for the sand and the waste rock were relatively similar to the curves estimated from previous studies (Figure 4.6). For example, the calibrated water retention curve for waste rock was slightly steeper than the initial curve (indicating a material with a somewhat smaller coefficient of uniformity) but the air entry value was similar and around 1 kPa. The difference between initial and calibrated curves for crushed anorthosite was more marked. The air entry value and the water entry value

decreased to 0,5 kPa and 4 kPa which marked a smoother retention curve for the crushed anorthosite. Also, the porosity of the FCL sand was manually decreased to correspond to *in situ* measurement obtained by a nucleodensimeter (Bréard Lanoix et al., 2020)

Tableau 4.1 : Initial and calibrated material properties in the numerical simulations of the experimental waste rock pile. k_{sat} : *saturated hydraulic conductivity*, α_{vG} , n_{vG} : *van Genuchten (1980) fitting parameters*.

| | | Measured | | | Calibrated ($e_{\text{sum}}=0.019$) | | |
|----------------------|-----------------------|-------------------------------|--------------------|--------------------|---------------------------------------|--------------------|--------------------|
| | | Crushed anorthosite (1) | FCL sand (2) | Waste rock (1) | Crushed anorthosite | FCL sand | Waste rock |
| k_{sat} | (m.s^{-1}) | 5×10^{-4} | 9×10^{-5} | 5×10^{-3} | 9×10^{-6} | 1×10^{-4} | 2×10^{-2} |
| α_{vG} | (m^{-1}) | 3.98 | 1.25 | 7.75 | 13.79 | 2.44 | 6.16 |
| n_{vG} | (-) | 2.16 | 6.00 | 2.34 | 2.34 | 3.89 | 4.13 |

⁽¹⁾ Dubuc, 2018 ⁽²⁾ Bréard-Lanoix, 2017

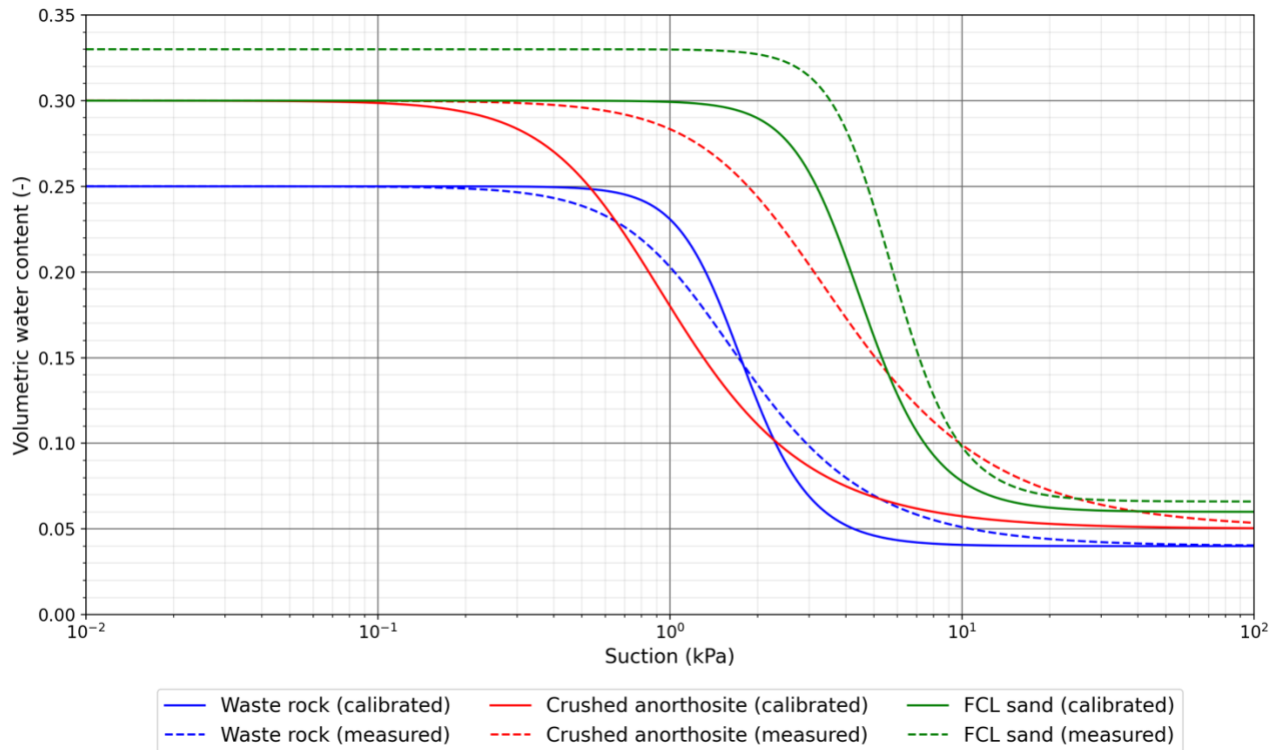


Figure 4.6 : Measured (dashed lines) and calibrated (solid lines) water retention curves of the waste rock (blue), FCL sand (green), and crushed anorthosite (red) in the experimental waste rock pile (Bréard Lanoix et al., 2020; Dubuc, 2018).

In general, calibrated simulations were able to reproduce relatively well the measured variations of volumetric water content in the FCL: a quick and sharp increase of the volumetric water content a few hours after the beginning of the infiltration test, followed by a slow decrease of the volumetric water content towards its initial value (Figure 4.7).

Simulated arrival times in the FCL (sensors P1 to P6) were generally slightly greater than the measured ones, with a mean delay of 1.8 h for test I-C and 2.1 hours for test I-D (Tableau 4.2). The simulated maximum (peak) volumetric water content was also reached later in the simulations than measured, with a delay of 2.56 h for test I-C and 3.51 hours for test I-D. The arrival time in the waste rock (sensors S1 to S6) was between 5.79 h and 6.60 h after the beginning of test I-C corresponding to a mean delay of 3.35 h compared to measured arrival times (Tableau 4.2). The result for test I-D was similar with a mean delay for test I-D around 3.36 h. The delays observed with non-calibrated simulations were 2 to 3 times higher, showing the importance of calibration.

Tableau 4.2 : Arrival times (in hours) after the beginning of test I-C in the FCL (0.8 m below the surface) and in the waste rock (1.4 m below the surface). The peak arrival time at 0.80 m depth is also compared. N/A : *not measured*.

| x (m) | Arrival time at 0.8 m depth (h) | | Time at maximal amplitude at 0.8 m depth (h) | | Arrival time at 1.4 m depth (h) | |
|---------------|------------------------------------|------------|--|------------|------------------------------------|------------|
| | Measured | Calibrated | Measured | Calibrated | Measured | Calibrated |
| 5 | 3.58 | 6.67 | 11.75 | 13.31 | N/A | N/A |
| 15 | 3.91 | 6.69 | 8.18 | 13.39 | 5.79 | 9.60 |
| 25 | 6.00 | 6.82 | 12.10 | 13.58 | 6.60 | 9.63 |
| 35 | N/A | N/A | N/A | N/A | 6.30 | 9.52 |
| 45 | 5.10 | 6.93 | 12.32 | 14.04 | 5.84 | 9.18 |
| 55 | 5.15 | 6.66 | 10.74 | 13.57 | N/A | N/A |
| Mean delay | N/A | 1.81 | N/A | 2.81 | N/A | 3.35 |

The simulated and measured initial volumetric water contents were slightly different depending on the position of the sensors in the experimental waste rock pile and it was therefore deemed more representative to compare the relative increase of volumetric water content than the maximum (peak) values. For most of the sensors, measured trends and variation amplitudes of volumetric water contents were well simulated by the calibrated simulations (Figure 4.7). For example, simulated volumetric water content at P5 during tests I-C and I-D were very similar to measured data, with a maximum difference not exceeding 0.15 (sensor precision is 0.03). The difference between measured and calibrated volumetric water content for P2 and P3 corresponded to a constant offset of 0.04 and 0.015, respectively, but the variations were otherwise almost identical. Larger differences were observed for P1 and P6 but the measured increase of volumetric water content during infiltration test I-C was also significantly

greater than for the other sensors in the FCL. Simulated volumetric water contents for P1 and P6 during test I-D were very similar to measured results.

For P1, P2, and P3, the simulated volumetric water content decreased (after the peak) slightly faster than the measured curve, while for P6 the simulated decrease was slightly slower than the measured one. However, in all cases, the numerical simulations tended to an (almost constant) equilibrium volumetric water content of 0.09 at the end of the drainage phase for test I-C and test I-D which was similar to the initial volumetric water content before the beginning of the infiltration tests. This trend was similar to measured volumetric water contents which also decrease towards the initial value (between 0.13 at P2 and 0.09 at P6), around 6.5 days after test I-C and 5.5 days after test I-D.

Measurements at P4 showed a slightly different behavior from the other sensors. Volumetric water content also increased a few hours after the beginning of both infiltration tests I-C and I-D but decreased significantly more slowly with a lot of small variations (which could not be completely removed by the low pass filter). Results seem therefore to indicate a greater water retention capacity in this zone of the FCL which was not possible to reproduce with the model (materials were assumed homogeneous, see above).

Overall, and despite some limited discrepancies between simulated and measured volumetric water contents, calibrated models were able to simulate well the hydrogeological behavior of the experimental waste rock pile following large infiltration tests. Numerical simulations matched exactly the measured variations for some sensors and periods and represented an acceptable compromise for the others (especially considering the local heterogeneities and the precision of the sensors).

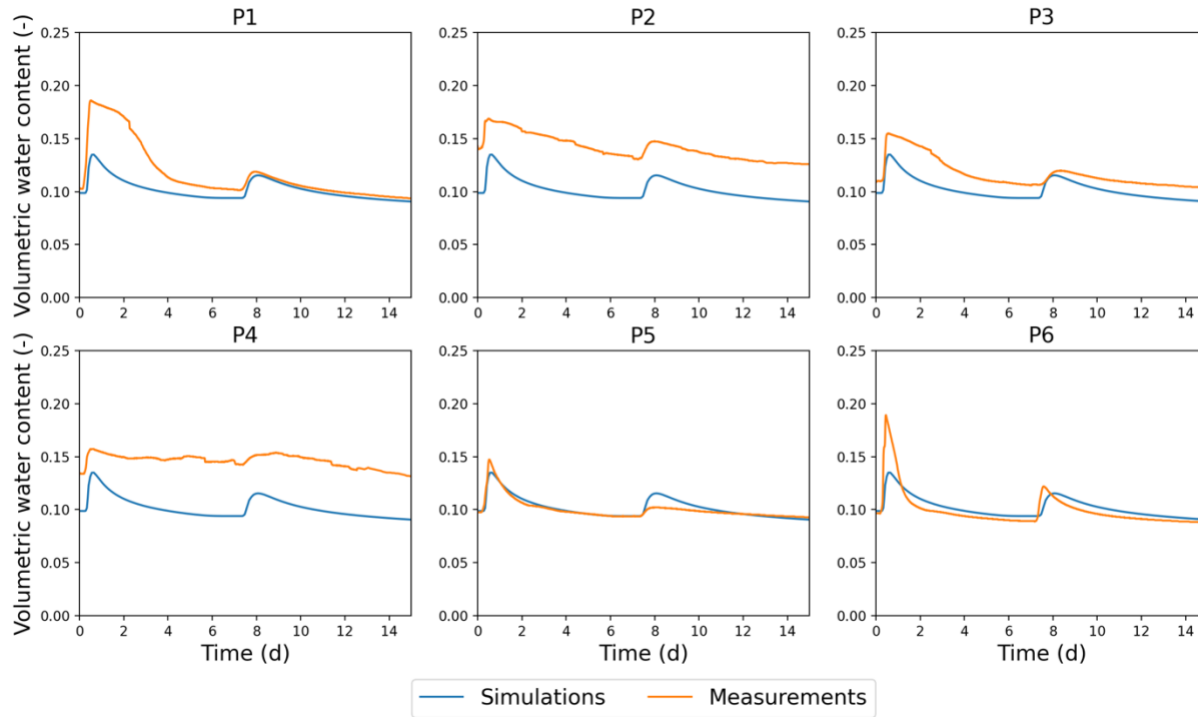


Figure 4.7 : Measured (orange curve) and simulated (blue curve) volumetric water content 0.80 m below the surface after large scale infiltration tests I-C (day = 0) and I-D (day = 7).

Simulated cumulative water fluxes in the lysimeters were compared to field measurements (Figure 4.8). For test I-C, both measured and simulated water fluxes increased progressively with the distance along the experimental waste rock pile and outflow in lysimeter L6 was greater than in lysimeter L5 which was greater than in lysimeter L4 and so on. However, simulated cumulative water volumes in lysimeters L1 to L5 were 4 to 5 times greater than measured ones, with a mean difference of 3.8 m^3 . The difference between lysimeters was also more important in the field. For example, measured water flux was 0.9 m^3 in L1 and 2.2 m^3 in L5 ($+1.3 \text{ m}^3$) but simulated water flux was 4.8 m^3 in L1 and 5.4 m^3 in L5 ($+0.6 \text{ m}^3$). These trends were similar for test I-D. The recovery percentage (i.e. the ratio of water recovered in the lysimeters compared to the amount of water infiltrated at the surface) for test I-C was 110% for the calibrated simulations and only 39% for the measurements. On the contrary, the simulated recovery percentage was smaller for test I-D and around 42% instead but the measured recovery was 67%. The low recovery percentages measured in the field somewhat indicated a delay in the water flow during the tests and an accumulation of water in the lysimeters before the water flew out of the systems and was

collected (which was also confirmed by the high water contents measured in the lysimeters). Simulations did not account for lysimeters and simulated directly the outflow at the base of the waste rock pile.

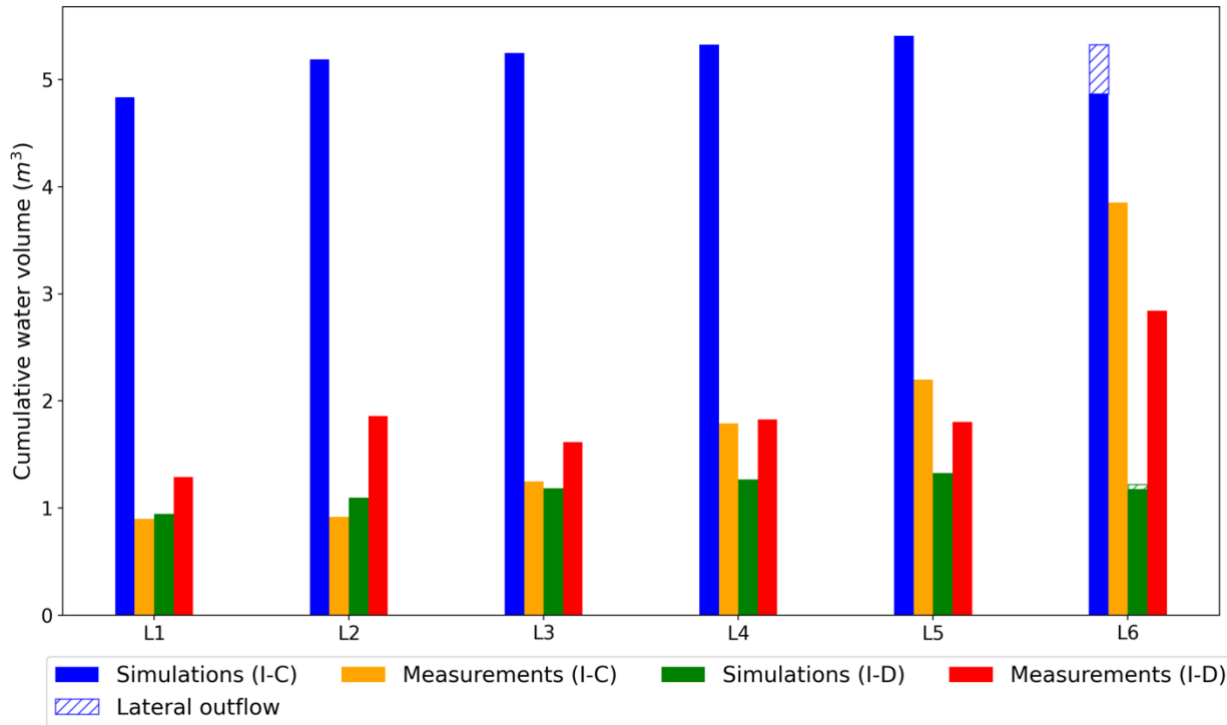


Figure 4.8: Simulated (blue) and measured (orange) cumulative water volumes leached at the bottom of the waste rock 7 days after test I-C. and 7 days after test I-D.

4.4.2 Validation for the 2016-2017 period

The calibrated hydrogeological properties were then used to simulate the hydrogeological response of the experimental waste rock pile for a period of approximately 17 months (April 4, 2016, to September 13, 2017), including two summers (Figure 4.9).

Between day 0 and day 42 (from April 4 to May 16), and between day 400 and day 412 (from May 9 to May 21), the measured volumetric water contents increased significantly because of snowmelt and exceed a degree of saturation $S_r = 70\%$ in some cases (porosity of the FLC = 0.30). Simulations differed significantly during this period because the snow cover was not simulated in the models. However, these large discrepancies lasted only for a few days and measured volumetric water contents decreased rapidly

(within 5 days after the peak) to values around 0.11. During winter (days 245 to 390), measured volumetric water contents decreased continuously because (1) there was no infiltration in the experimental waste rock pile (frozen surface), and (2) volumetric water contents probes only measured liquid water (Guo et al., 2018). Simulated volumetric water contents however remained around 0.07 because frost was not simulated in the models.

During summer 2016 (days 50 to 241) and 2017 (days 418 to 470), numerical simulations reproduced well the measured volumetric water contents variations, especially for P2 and P6, where the difference between the measured and simulated volumetric water contents never exceeded 0.02 (i.e. less than the precision of the GS3 sensors; Figure 4.9). Measured and simulated volumetric water contents variations were also very similar for P1 and P3 with differences generally less than 0.01 between day 67 and day 195 (Figure 4.9d, f). Larger precipitation events (such as the 3 days of precipitations observed on day 195) sometimes induced a significant increase of the volumetric water contents (from 0.12 to 0.18) in the field which was not always very well reproduced by the simulations (from day 195 to day 197). However, such differences were limited to 5 days during summer 2016, and simulated volumetric water contents were otherwise very similar to measured results (< 0.02 difference). The simulated wetting front arrival times at sensors P1 to P6 after each precipitation event were also very close to measured ones, with a maximum delay of 0.7 d. Differences between measured and calibrated volumetric water contents for sensor P4 were larger and around 0.04, which was consequent with the differences observed during calibration (see above). Also, sensor P5 was well reproduced during 2017 (see above) but it was not the case during summer 2016 where measured volumetric water contents had a lower value around 0.07 and the peaks were limited with an amplitude of 0.01. On day 442 (20th June 2017), an impermeable cover was installed. Measured and simulated volumetric water content tended to the same residual volumetric water content value of 0.07 after 60 days. For P3 and P4, the residual value of volumetric water content was higher (0.09) which corresponded to more water retention over those two locations.

Overall, the automated calibration of the numerical simulations based on a few characteristic points (times t_1 , t_2 and t_a at different locations) during large infiltration tests I-C and I-D appeared efficient to simulate the hydrogeological behavior of the experimental waste rock pile.

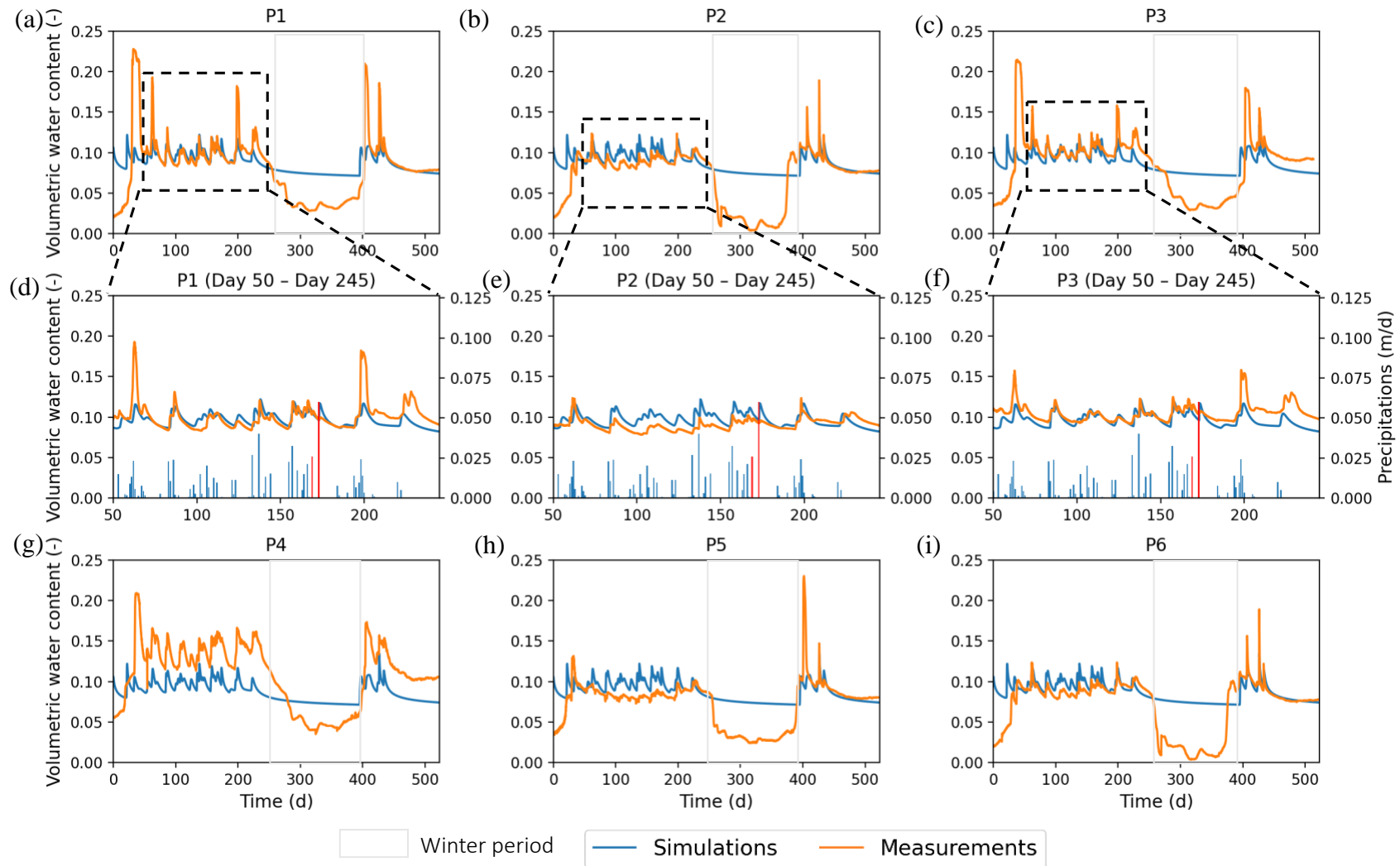


Figure 4.9 : Simulated (blue) and measured (orange) volumetric water contents 0.80 m below the surface of the experimental waste rock pile between April 4, 2016 (day 0) and September 13, 2017 (day 523).

4.5 Sensitivity of calibration to input parameters

Different calibrations were conducted using the same automated black box algorithm as presented above but based on various sets of parameters.

“simulated P1+P6”: the automated calibration process was first applied to probes P1 and P6 only (and the corresponding sensors S1 and S6 in the underlying waste rock) instead of using all the sensors available. The simulated volumetric water contents increase after tests I-C and I-D was 1.5 times greater than with the previous calibration (Figure 4.10). One of the reasons for this overestimation of the volumetric water contents increase was that the measured increases at P1 and P6 were also greater than at the other locations. By using only a few sensors, their response controlled the calibration process, therefore improving the simulations at these particular points, but altering the overall quality of the calibration. Such an approach therefore poorly suits field measurements with significant local variabilities and heterogeneities and for sensors that have a limited volume of influence.

Calibration Water Flow: finally, an automated calibration was carried out based on the arrival time of the water outflow corresponding to test I-C inside the lysimeters (Figure 4.10). The calibration using the arrival time of the water outflow presented a higher amplitude than the other calibration with an initial value of 0.9 and a peak value at 0.14 for test I-C. The water retention was higher during the drainage compared to other calibrated results by tending to the residual value of 0.08 after 6 days. It was more similar to the measured data at P1 P2 and P3. The other calibration results were more similar to the measured data from P5 and P6. It could result from the heterogeneity of the materials in-situ and the possibility of a capillarity effect over P3 and P4 that the water outflow could be a good parameter to optimize this hydrogeological aspect. And the increase of the drainage time for the calibration result “water outflow” may be directly linked with the differential time of the water flow and may explain the result for the output water flow (Figure 4.8).

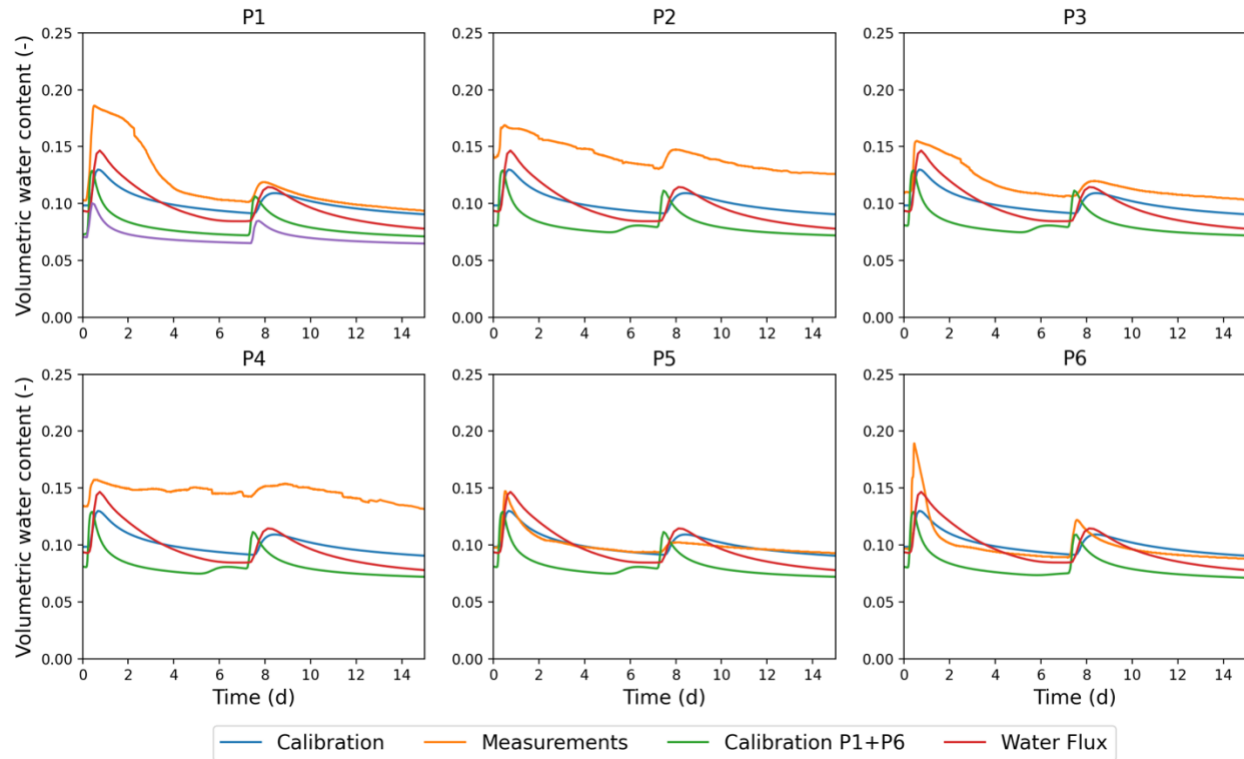


Figure 4.10 : Measured and simulated volumetric water contents 0.80 m below the surface of the experimental waste rock pile during tests I-C and I-D for various calibrations. Calibration: calibration using all available sensors (also see previous sections). Calibration P1 + P6: calibration using sensors located above lysimeters L1 and L6 only. Water Flux: calibration based on the water outflow measured in the lysimeters.

4.6 FCL design optimization using the automated black box approach

The new automated calibration approach proposed here could also be used to optimize FCL design (such as material properties and cover thickness) to improve reclamation efficiency. This time, instead of using measured volumetric water contents to back calculate the in situ hydrogeological properties of the various materials, the algorithm was adapted to evaluate the properties of the FCL that would contribute to maximize the deviation of infiltration and minimize the infiltration of water in the reactive waste rock. In other words, infiltration fluxes should be minimal in lysimeters L1 to L5.

The algorithm was therefore adapted to compute water outflow in each lysimeter (instead of volumetric water contents variations and arrival times in the calibration presented above), and the new objective was to minimize the sum of the outflows in lysimeters 1 to 5 (0 m to 50 m). The cumulative volume was computed during the seven days that followed the large infiltration test I-C. The new parameters adjusted by the black box function were the thickness and the hydrogeological properties (hydraulic conductivity, and van Genuchten (1980) parameters) of the FCL. The porosity of the sand was also added inside the optimization process. Properties were also chosen to respect practical and operation constraints. For example, FCL thickness was bounded between 0.4 and 1.4 m, and the hydrogeological properties bound corresponded to classical range for this kind of material (Hillel, 1998). Input variables remained the same as in the previous simulations, and included the saturated hydraulic conductivity, and the van Genuchten (1980) fitting parameters α and n . The porosity of the sand was also added along the input variable. Waste rock properties were kept constant during optimization and only the properties of the FCL were adjusted. The crushed anorthosite layer was removed to simplify the optimization process. Optimization was carried out for large infiltration tests I-C and I-D and then evaluated for a longer time (April 4, 2016, to September 13, 2017).

Optimization showed that a material with a hydraulic conductivity of 1×10^{-3} m/s would be the most adapted material to build the FCL. The optimal porosity would be 0.265, and the air entry value and water entry value should be 8 kPa and 22 kPa, respectively (Figure 4.11). The air entry value of the optimal material would be greater than the waste rock water entry value (as recommended in previous research on a cover with capillary barrier effects; (Broda et al., 2017; Fala et al., 2005; Ross, 1990). In this case, an optimum FCL thickness would be 0.77 m, which is slightly thicker than the one installed on the experimental waste rock pile.

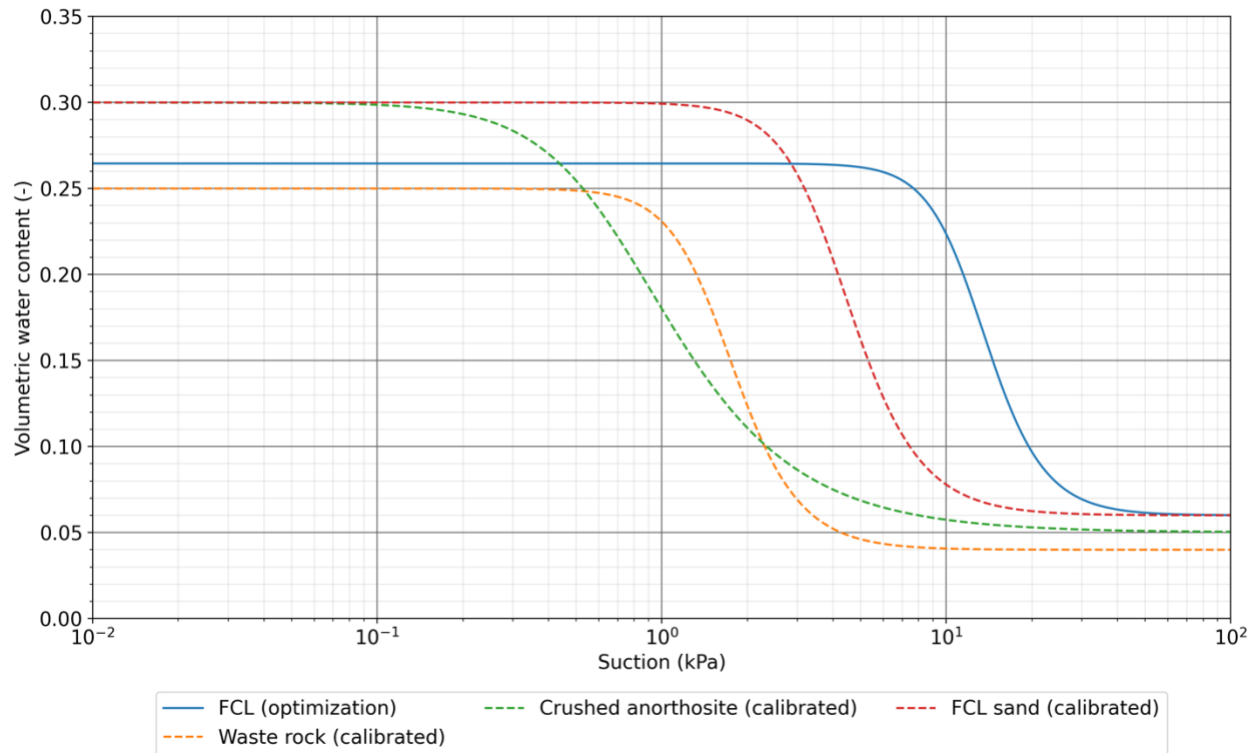


Figure 4.11 : Calibrated and optimized water retention curves of the materials.

The effectiveness of this optimum solution was 100%, corresponding to zero water flow in lysimeters 1 to 5. The cumulative outflow at the drainage face ($x = 60$ m) 7 d after test I-C was 18 m^3 , which corresponded to 67% of the water applied at the surface of the experimental waste rock pile. The maximum suction on the waste rock-FLC interface was 11 kPa which was higher than the water entry value of the waste rock (6 kPa). The wetting front arrival time for test I-C was around 9.84 h which was faster than the measured and calibrated results (Tableau 4.2). The peak value increased along the flow control layer where maximal volumetric water content at P5 (0.22) was greater than in P4 (0.21) which was greater than in P1 (0.18) (Figure 4.12). The drainage was slower than measured and tended to a linear trend towards P6 corresponding to a slow vertical infiltration and important retention of water over the interface with the waste rock. The volumetric water contents were above 0.15 maintaining the hydraulic conductivity of the FCL above $5 \times 10^{-5} \text{ m/s}$ which could explain the high diversion and the large volumes of water leaving the boundary of $x = 60$ m.

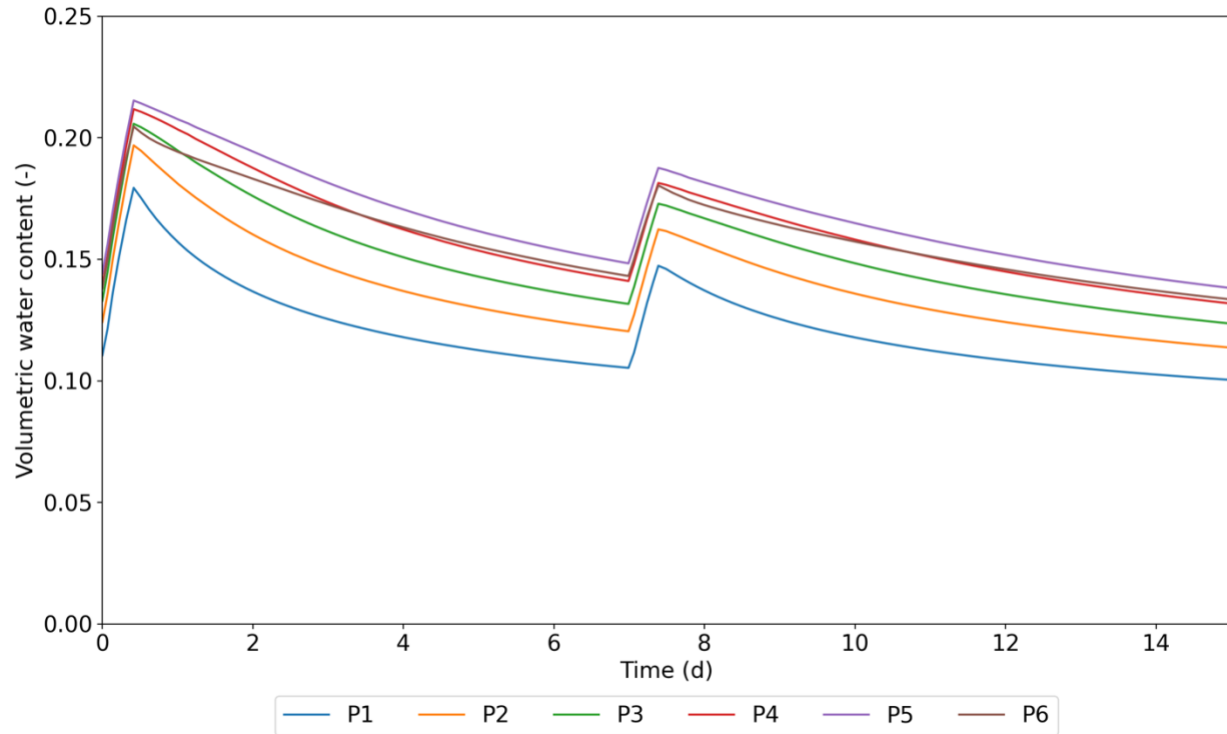


Figure 4.12: Volumetric water contents at 0.8 m obtained for the optimized hydrogeological properties. Time 0 corresponded to the start of test I-C.

The optimization result was evaluated on a long period numerical simulation (Figure 4.13a). The general trends of the volumetric water content were similar to the period of test I-C and I-D where the volumetric water contents are higher along the flow control layer. For example, the location P5 indicated a mean offset of 0.04 with the volumetric water content values at P1. A mean delay was observed for the peak of each precipitation between P1 and P5. For location P6, the peak delay and the volumetric water content general value were slightly inferior (less than 0.1) to P5 because of the boundary condition at $x = 60$ m that allowed outflow. During the simulated 17 months, 609 m^3 of water were applied on the top boundary resulting in a total lateral deviation of 446 m^3 (73%). The remaining volume of water (163 m^3) was stored inside the waste rock pile because only 0.012 m^3 was found in the lysimeters, of which 0.053 in the lysimeter L5 and 0.031 in the lysimeter L6 (Figure 4.13b). Overall, the optimized results were promising by proposing an effective flow controls layer during the 17 months of the numerical simulation.

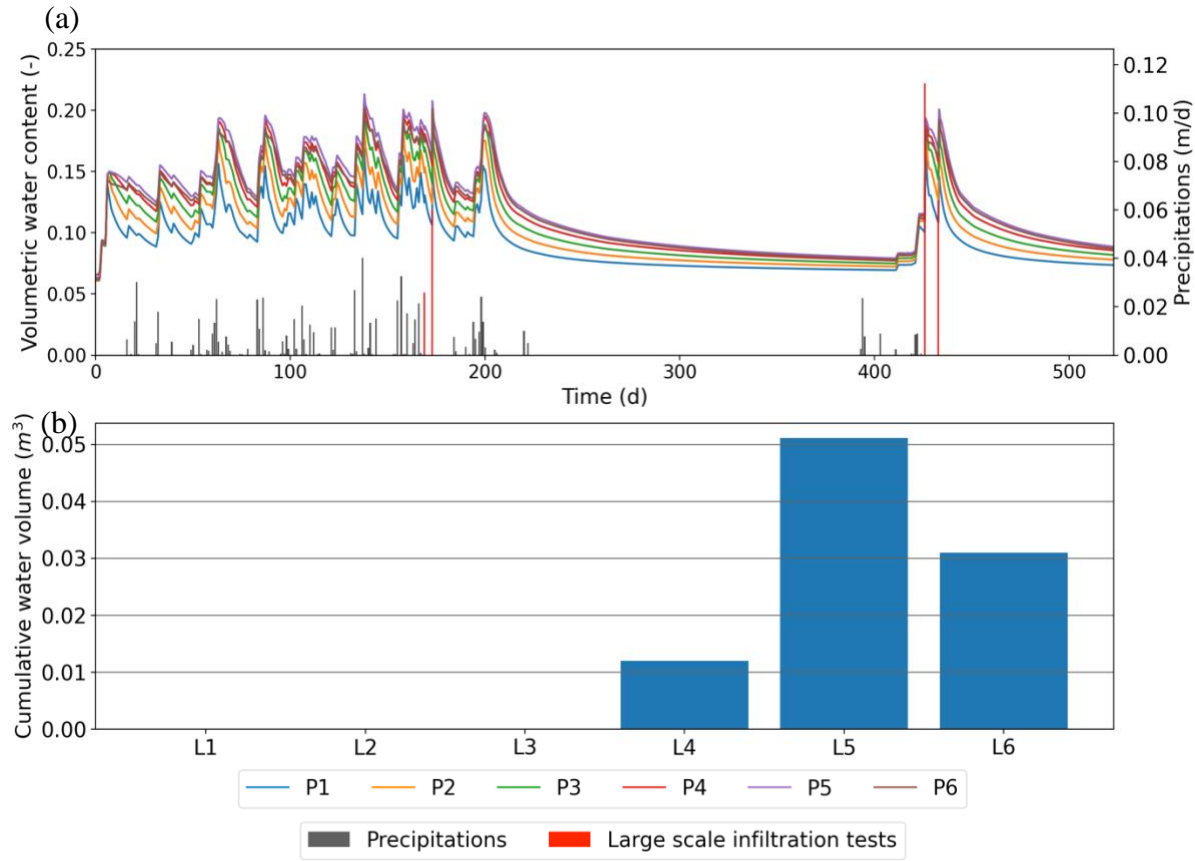


Figure 4.13 : (a) Volumetric water contents at 0.8 m obtained for the optimized hydrogeological properties with the application of the precipitations of April 4, 2016, to September 13, 2017. (b) Cumulative water volume at each lysimeter after 17 months of simulations.

4.7 Discussion

Calibrations of hydrogeological numerical simulations of waste rock piles were typically carried out manually in previous research (Demers et al., 2013; Ramasamy et al., 2018). This approach generally gave good results but was time consuming and subjected to interpretation bias. The automated approach developed in this study could improve and accelerate the calibration process. The calibration algorithm was based on a limited number of sensors (6 volumetric water content probes in the FCL and 6 others in the waste rock), a few characteristic values (2 values per probe in the FCL and one value per probe in the waste rock for each infiltration event) and only two large

infiltration test results. The calibration gave good results and calibrated simulations were able to reproduce volumetric water contents variations well.

The main differences between calibrated and measured volumetric water contents were limited to a few probes and some particular periods. These local discrepancies could be explained by heterogeneities and local variations of the hydrogeological properties (particle size distribution, porosity). Calibration could be improved by approach of numerical modeling with the heterogeneity by dividing each material into subgroups to reproduce local change. Therefore, the equivalent porous model remains a popular approach with a great use for designing by a direct approach this kind of cover and give precise information to choose the best materials. As illustrated, the optimization gave an ideal result to the flow control layer with homogeneous materials which is rarely the case for waste rock materials but could give essential information to designing a FCL.

Calibration considered input parameters (hydraulic conductivity and van Genuchten (1980) fitting parameters α_{VG} , n_{VG}) as independent variables, while in practice they are correlated (M. Aubertin et al., 2003; Hollenbeck & Jensen, 1998). Calibration could therefore have been improved by resolving the black box using particle size distribution properties as entry values or by using analytical solutions to link particle sizes and hydrogeological properties (M. Aubertin et al., 2003; Chapuis & Aubertin, 2003; Hillel, 1998).

Increasing the number of selected characteristic points on the resulted volumetric water content curves could also have contributed to improving the calibration. However, an increase in the characteristics point may increase their variance resulting in underfitting. An underfitting variation could also appear after a poor quality of the spectral filter due to the light variation that could decrease the representativity of the characteristic points. The bound of the input variable could then be a solution to decrease the uncertainties during the calibration process and increase the representativity of the characteristics points (Nearing & Gupta, 2018).

The sensitivity of the data parameters indicated a loss of information when the number of probes was reduced. The main difference resulted in a loss of the drainage information which was attending by losing the spatial distribution of the volumetric water content. However, adding the water flux increased the representation of the drainage inside the volumetric water content curves that followed the previous recommendation of Rozemeijer et al (2010) where the water outflow could be more important than the pressure to reproduce the groundwater flow. The major challenge

of coupling the volumetric water contents and the outflow rates lies in the unequal order of magnitude of this two information, which is a problem during an optimization approach.

Finally, the black box has several other computational options and capacities that were not used in this research. For example, a bi-objective algorithm could be defined as an account for both volumetric water contents variations and water outflows at the same time. A similar approach was used in hydrology to reproduced runoff and water infiltration along with the groundwater behavior, allowing greater benefits on the numerical simulation calibration (Turunen et al., 2020). Also, a sensitivity analysis of the input variable could permit to use of more accurate poll search parameters and mesh size parameters. The computational time and accuracy could then increase the benefits of using the software Nomad (Audet & Kokkolaras, 2016).

4.8 Conclusion

An experimental waste rock pile was built at the Lac Tio mine site to evaluate the performance of an inclined flow control layer (FCL) to control water infiltration and limit contaminated mine drainage generation. Volumetric water contents results were used to calibrate numerical simulations using an automated black box algorithm. Simulations were calibrated using the results from two large infiltration tests and were validated using 523 d of field monitoring. Calibrated simulations were able to reproduce well the hydrogeological behavior of the experimental waste rock pile. The automated calibration approach was also adapted to optimize the FCL design. Results showed that water diversion could be improved to attain 100% efficiency. In a wider context, the optimization process proposed in this article could facilitate the mining plan by obtaining the most adequate flow control layer to apply for the waste rock reclamation.

4.9 Acknowledgments

This research was supported by the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (NSERC) and by the partners of the Research Institute on Mines and Environment (RIME). The authors would like to acknowledge Pr. Charles Audet and his coworker from the GERAD for the software Nomad and their recommendation.

4.10 References

- Abbaspour, K. C., Schulin, R., & van Genuchten, M. T. (2001). Estimating unsaturated soil hydraulic parameters using ant colony optimization. *Advances in Water Resources*, 24(8), 827-841.
- Akcil, A., & Koldas, S. (2006). Acid Mine Drainage (AMD): causes, treatment and case studies. *Journal of cleaner production*, 14(12-13), 1139-1145.
- Amos, R. T., Blowes, D. W., Bailey, B. L., Sego, D. C., Smith, L., & Ritchie, A. I. M. (2015). Waste-rock hydrogeology and geochemistry. *Applied Geochemistry*, 57, 140-156.
- Aubertin, M., Mbonimpa, M., Bussière, B., & Chapuis, R. P. (2003). A model to predict the water retention curve from basic geotechnical properties. *Canadian Geotechnical Journal*, 40(6), 1104-1122.
- Aubertin, M., Cifuentes, E., Apithy, S. A., Bussière, B., Molson, J., & Chapuis, R. P. (2009). Analyses of water diversion along inclined covers with capillary barrier effects. *Canadian Geotechnical Journal*, 46(10), 1146-1164.
- Aubertin, M., James, M., Maknoon, M. & Bussière, B. (2013). *Recommandations pour améliorer le comportement hydrogéotechnique des haldes à stériles*. Proceedings, GeoMontreal 2013 : 66th Canadian Geotechnical Conference, Montréal, Québec (p. 8).
- Aubertin, M, Pabst, T., Bussière, B., James, M., Mbonimpa, M., Benzaazoua, M., & Maqsoud, A. (2015). REVUE DES MEILLEURES PRATIQUES DE RESTAURATION DES SITES D'ENTREPOSAGE DE REJETS MINIERs GÉNÉRATEURS DE DMA. Proceedings, Symposium 2015 sur l'environnement et les mines, Rouyn-Noranda, Québec (67 pages)

- Aubertin, Michel, Bussière, B., & Berner, L. (2002). Environnement et gestion des résidus miniers. Dans *Les Presses Internationales Polytechnique, Montreal, Canada. Manuel sur Cédérom*. Presses Internationales Polytechnique.
- Aubertin, Michel, Bussière, B., Bernier, L., Chapuis, R., Julien, M., Belem, T., Simon, R., Mbonimpa, M., Benzaazoua, M., & Li, L. (2002). La gestion des rejets miniers dans un contexte de développement durable et de protection de l'environnement. *Proceedings, Annual Conference - Canadian Society for Civil Engineering, 2002*, 317-326.
- Aubertin, Michel, Bussière, B., Pabst, T., James, M., & Mbonimpa, M. (2016). Review of the reclamation techniques for acid-generating mine wastes upon closure of disposal sites. *Proceedings, Geo-Chicago 2016: Sustainability, Energy, and the Environment, Chicago, Ill.* (p. 343-358).
- Aubertin, Michel, Fala, O., Bussière, B., Martin, V., Campos, D., Gamache-Rochette, A., Chouteau, M., & Chapuis, R. P. (2002). Analyse des écoulements de l'eau en conditions non saturées dans les haldes à stériles. *Défis et perspectives: Symposium 2002 sur l'environnement et les Mines. Rouyn-Noranda, Canada*.
- Aubertin, Michel, Fala, O., Molson, J., Gamache-Rochette, A., Lahmira, B., Martin, V., Lefebvre, R., Bussière, B., Chapuis, R. P., & Chouteau, M. (2005). Évaluation du comportement hydrogéologique et géochimique des haldes à stériles. *Symposium Rouyn-Noranda: L'Environnement et les Mines*, 15-18.
- Audet, C. (2014). A survey on direct search methods for blackbox optimization and their applications. *Mathematics without boundaries* (p. 31-56). Springer.
- Audet, C., & Dennis, J. E. (2006). Mesh Adaptive Direct Search Algorithms for Constrained

- Optimization. *SIAM Journal on Optimization*, 17(1), 188-217.
- Audet, C., & Hare, W. (2017). Derivative-free and blackbox optimization. Springer International Publishing
- Audet, C., & Kokkolaras, M. (2016). Blackbox and derivative-free optimization: theory, algorithms and applications. Springer International Publishing.
- Awotunde, A. A., & Horne, R. (2011). A multiresolution analysis of the relationship between spatial distribution of reservoir parameters and time distribution of well-test data. *SPE Reservoir Evaluation & Engineering*, 14(03), 345-356.
- Bahrami, S., Ardejani, F. D., Aslani, S., & Baafi, E. (2014). Numerical modelling of the groundwater inflow to an advancing open pit mine: Kolahdarvazeh pit, Central Iran. *Environmental monitoring and assessment*, 186(12), 8573-8585.
- Benzaazoua, M., Bussière, B., Demers, I., Plante, B., Pepin, G., Aubertin, M., Chouteau, M., Dawood, I., Intissar, R., Lessard, G., Monzon, M., Peregoedova, A., Zagury, G. J., Molson, J. W., & Laflamme, D. (2013). Comportement géochimique et hydrogéologique des stériles de la mine Lac Tio. *Déchets, sciences et techniques*, 64.
- Bigdeli, K., Hare, W., & Tesfamariam, S. (2012). Configuration optimization of dampers for adjacent buildings under seismic excitations. *Engineering Optimization*, 44(12), 1491-1509.
- Blowes, D. W., Ptacek, C. J., Jambor, J. L., Weisener, C. G., Paktunc, D., Gould, W. D., & Johnson, D. B. (2003). The geochemistry of acid mine drainage. *Environmental geochemistry*, 9, 149-204.
- Brawner, C. O. (1986). Groundwater and coal mining. *Mining Science and Technology*, 3(3),

187-198.

- Bréard Lanoix, M.-L. (2017). Caractérisation des propriétés hydrogéologiques de la couche de contrôle des écoulements placée sur la halde à stériles expérimentale à la mine du lac Tio. Mémoire de maîtrise en sciences appliquées, *École Polytechnique de Montréal*.
Département des génies civil géologique et des mines.
- Bréard Lanoix, M.-L., Pabst, T., & Aubertin, M. (2020). Field determination of the hydraulic conductivity of a compacted sand layer controlling water flow on an experimental mine waste rock pile. *Hydrogeology Journal*, 1-13.
- Broda, S., Aubertin, M., Blessent, D., Hirthe, E., & Graf, T. (2014). Improving control of contamination from waste rock piles. *Environmental Geotechnics*, 4(4), 274-283.
- Broda, S., Aubertin, M., Blessent, D., Hirthe, E., & Graf, T. (2017). Improving control of contamination from waste rock piles. *Environmental Geotechnics*, 4(4), 274-283.
- Brunner, P., & Simmons, C. T. (2012). HydroGeoSphere: a fully integrated, physically based hydrological model. *Groundwater*, 50(2), 170-176.
- Bussière, B. (1999). Étude du comportement hydrique de couvertures avec effets de barrière capillaire inclinées avec l'aide de modélisations physiques et numériques. Thèse de doctorat, *École Polytechnique de Montréal*. *Département des génies civil géologique et des mines*.
- Bussière, Bruno, Aubertin, M., & Chapuis, R. P. (2003). The behavior of inclined covers used as oxygen barriers. *Canadian Geotechnical Journal*, 40(3), 512-535.
- Carrera, J., Alcolea, A., Medina, A., Hidalgo, J., & Slooten, L. J. (2005). Inverse problem in hydrogeology. *Hydrogeology Journal*, 13(1), 206-222.
- Chapuis, R. P., & Aubertin, M. (2003). On the use of the Kozeny-Carman equation to predict the

- hydraulic conductivity of soils. *Canadian Geotechnical Journal*, 40(3), 616-628.
- Dawood, I., & Aubertin, M. (2014). Effect of dense material layers on unsaturated water flow inside a large waste rock pile: A numerical investigation. *Mine Water and the Environment*, 33, 24-38.
- Demers, I., Molson, J., Bussière, B., & Laflamme, D. (2013). Numerical modeling of contaminated neutral drainage from a waste-rock field test cell. *Applied geochemistry*, 33, 346-356.
- Diersch, H.-J. G. (2013). *FEFLOW: finite element modeling of flow, mass and heat transport in porous and fractured media*. Springer Science & Business Media.
- Dimech, A., Chouteau, M., Aubertin, M., Bussière, B., Martin, V., & Plante, B. (2019). Three-Dimensional Time-Lapse Geoelectrical Monitoring of Water Infiltration in an Experimental Mine Waste Rock Pile. *Vadose Zone Journal*, 18(1), 180098.
- Dubuc, J. (2018). Étude du comportement hydrogéologique d'une couche de contrôle des écoulements placée à la surface d'une halde à stériles expérimentale. Mémoire de maîtrise en sciences appliquées, *École Polytechnique de Montréal. Département des génies civil géologique et des mines*.
- Dubuc, J., Pabst, T., & Aubertin, M. (2017). An assessment of the hydrogeological response of the flow control layer installed on the experimental waste rock pile at the Lac Tio mine. *Proceedings of the 70th Canadian Geotechnical Society Conference*, 70.
- Emsellem, Y., & De Marsily, G. (1971). An automatic solution for the inverse problem. *Water Resources Research*, 7(5), 1264-1283.
- Fala, O. (2003). Etude des écoulements non saturés dans les haldes à stériles à l'aide de

simulations numeriques. Mémoire de maîtrise en sciences appliquées, *École Polytechnique de Montréal. Département des génies civil géologique et des mines.*

- Fala, O., Aubertin, M., Molson, J. W., Bussière, B., Wilson, G. W., Chapuis, R., & Martin, V. (2003). Numerical modelling of unsaturated flow in uniform and heterogeneous waste rock piles. *Sixth International Conference on Acid Rock Drainage (ICARD), Australasian Institute of Mining and Metallurgy, Cairns, Australia, Publication Series, 3*, 895-902.
- Fala, O., Molson, J., Aubertin, M., & Bussière, B. (2005). Numerical modelling of flow and capillary barrier effects in unsaturated waste rock piles. *Mine Water and the Environment*, 24(4), 172-185.
- Fetter, C. W. (2018). *Applied hydrogeology*. Waveland Press.
- Fienen, M. N., Muffels, C. T., & Hunt, R. J. (2009). On constraining pilot point calibration with regularization in PEST. *Groundwater*, 47(6), 835-844.
- Fredlund, D. G., & Xing, A. (1994). Equations for the soil-water characteristic curve. *Canadian Geotechnical Journal*, 31(4), 521-532.
- Fredlund, D G, Xing, A., & Huang, S. (1994). Predicting the permeability function for unsaturated soils using the soil-water characteristic curve. *Canadian Geotechnical Journal*, 31(4), 533-546.
- Fredlund, Delwyn G, & Rahardjo, H. (1993). *Soil mechanics for unsaturated soils*. John Wiley & Sons.
- Fredlund, M. D., Fredlund, D. G., & Wilson, G. W. (1997). Prediction of the soil-water characteristic curve from grain-size distribution and volume-mass properties. *Proc., 3rd Brazilian Symp. on Unsaturated Soils, 1*, 13-23.

- Fredlund, M. D., Wilson, G. W., & Fredlund, D. G. (2002). Use of the grain-size distribution for estimation of the soil-water characteristic curve. *Canadian Geotechnical Journal*, 39(5), 1103-1117.
- Gamache-Rochette, A. (2004). Water flow characterization in unsaturated rock waste piles using in situ hydrogeological tests. Mémoire de maîtrise en sciences appliquées, *École Polytechnique de Montréal. Département des génies civil géologique et des mines*.
- Gloaguen, E., Chouteau, M., Marcotte, D., & Chapuis, R. (2001). Estimation of hydraulic conductivity of an unconfined aquifer using cokriging of GPR and hydrostratigraphic data. *Journal of Applied Geophysics*, 47(2), 135-152.
- Guay, C., Minville, M., & Braun, M. (2015). A global portrait of hydrological changes at the 2050 horizon for the province of Québec. *Canadian Water Resources Journal/Revue canadienne des ressources hydriques*, 40(3), 285-302.
- Guo, Y., Xu, S., & Shan, W. (2018). Development of a frozen soil dielectric constant model and determination of dielectric constant variation during the soil freezing process. *Cold Regions Science and Technology*, 151, 28-33.
- Hawley, M., & Cunning, J. (2017). *Guidelines for mine waste dump and stockpile design*. CSIRO Publishing.
- He, X., Sonnenborg, T. O., Jørgensen, F., Høyer, A.-S., Møller, R. R., & Jensen, K. H. (2013). Analyzing the effects of geological and parameter uncertainty on prediction of groundwater head and travel time. *Hydrology & Earth System Sciences Discussions*, 10(3).
- Hillel, D. (1980). *Fundamentals of soil physics*. Academic press.
- Hillel, D. (1998). *Environmental soil physics: Fundamentals, applications, and environmental*

considerations. Elsevier.

Hollenbeck, K. J., & Jensen, K. H. (1998). Maximum-likelihood estimation of unsaturated hydraulic parameters. *Journal of Hydrology*, 210(1), 192-205.

Hotton, G., Bresson, E., Demers, B. B. I., Thomas, P., & Philippe, R. (2018). Assessment of CCBE Performance with Climate Change: Case Study of the Lorraine Mine Site. *Proceedings Tailings and Mine Waste*.

Huysmans, M., & Dassargues, A. (2009). Application of multiple-point geostatistics on modelling groundwater flow and transport in a cross-bedded aquifer (Belgium). *Hydrogeology Journal*, 17(8), 1901.

Isebor, O. J., Durlofsky, L. J., & Ciaurri, D. E. (2014). A derivative-free methodology with local and global search for the constrained joint optimization of well locations and controls. *Computational Geosciences*, 18(3), 463-482.

Johnson, D. B., & Hallberg, K. B. (2005). Acid mine drainage remediation options: a review. *Science of the total environment*, 338(1-2), 3-14.

Kresic, N. (2006). *Hydrogeology and groundwater modeling*. CRC press.

L-Bolduc, F. (2012). Une étude sur l'utilisation des roches stériles comme inclusions drainantes dans les résidus miniers. Mémoire de maîtrise en sciences appliquées, *École Polytechnique de Montréal. Département des génies civil géologique et des mines*.

Lahmira, B., Lefebvre, R., Aubertin, M., & Bussière, B. (2016). Effect of heterogeneity and anisotropy related to the construction method on transfer processes in waste rock piles. *Journal of Contaminant Hydrology*, 184, 35-49.

Le Digabel, S. (2011). Algorithm 909: NOMAD: Nonlinear optimization with the MADS

- algorithm. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 37(4), 1-15.
- Lefebvre, R., & G  linas, P. J. (1995). Numerical modelling of AMD production in waste rock dumps. *Proceedings Mining and the Environment 1995*, 869-878.
- Lessard, G. (2011). Essais d'infiltration sur la halde    st  riles Petit-Pas de la mine Tio, Havre-St-Pierre. M  moire de ma  trise en sciences appliqu  es, *  cole Polytechnique de Montr  al. D  partement des g  nies civil g  ologique et des mines*.
- Martin, V., Buss  re, B., Plante, B., Pabst, T., Aubertin, M., Medina, F., Lanoix, M.-L. B., Dimech, A., Dubuc, J., & Poaty, B. (2017). Hydrogeophysical monitoring of water infiltration and moisture content to assess the performance of mining reclamation covers. 70th Canadian Geotechnical Conference (GeoOttawa 2017), Ottawa, Ont.
- Martin, V., Chouteau, M., Aubertin, M., Fala, O., Buss  re, B., Campos, D., Gamache-Rochette, A., & Chapuis, R. (2005). Analyse des   coulements de l'eau en conditions non satur  es dans les haldes    st  riles. 2005 SME Annual Meeting: Got Mining, Salt Lake City, UT (p. 885-894)
- McCarter, M. K. (1990). Design and operating considerations for mine waste embankments. *SOC OF MINING ENGINEERS OF AIME, LITTLETON, CO,(USA), 1990.*, 890-899.
- McLemore, V. T., Fakhimi, A., van Zyl, D., Ayakwah, G. F., Anim, K., Boakye, K., Ennin, F., Felli, P., Fredlund, D., & Gutierrez, L. A. F. (2009). Literature review of other rock piles: Characterization, weathering, and stability. *Report OF-517, Questa Rock Pile Weathering Stability Project*.
- Minist  re de l'  nergie et des Ressources Naturelles. (2017). *Le secteur minier du Qu  bec*.

- Minville, M., Cartier, D., Guay, C., Leclaire, L., Audet, C., Le Digabel, S., & Merleau, J. (2014). Improving process representation in conceptual hydrological model calibration using climate simulations. *Water Resources Research*, 50(6), 5044-5073.
- Molson, J. W., Fala, O., Aubertin, M., & Bussière, B. (2005). Numerical simulations of pyrite oxidation and acid mine drainage in unsaturated waste rock piles. *Journal of Contaminant Hydrology*, 78(4), 343-371.
- Moosavi, A. A., & Sepaskhah, A. R. (2013). Sorptive number prediction of highly calcareous soils at different applied tensions using regression models. *Plant Knowledge Journal*, 2(2), 62-68.
- Morel-Seytoux, H. J. (1992). L'effet de barriere capillaire a l'interface de deux couches de sol aux propriétés fort contrastées. *Hydrol. continent*, 7, 117-128.
- Naseri, M., Iden, S. C., Richter, N., & Durner, W. (2019). Influence of Stone Content on Soil Hydraulic Properties: Experimental Investigation and Test of Existing Model Concepts. *Vadose Zone Journal*, 18(1), 180163.
- Nearing, G. S., & Gupta, H. V. (2018). Ensembles vs. information theory: supporting science under uncertainty. *Frontiers of Earth Science*, 12(4), 653-660.
- 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.
- Niswonger, R. G., Panday, S., & Ibaraki, M. (2011). MODFLOW-NWT, a Newton formulation for MODFLOW-2005. *US Geological Survey Techniques and Methods*, 6(A37), 44.
- Pabst, T., Bussière, B., Aubertin, M., & Molson, J. (2018). Comparative performance of cover

- systems to prevent acid mine drainage from pre-oxidized tailings: A numerical hydro-geochemical assessment. *Journal of contaminant hydrology*, 214, 39-53.
- Pabst, T., Molson, J., Aubertin, M., & Bussière, B. (2017). Reactive transport modelling of the hydro-geochemical behaviour of partially oxidized acid-generating mine tailings with a monolayer cover. *Applied Geochemistry*, 78, 219-233.
- Peregoedova, A, Aubertin, M., & Bussière, B. (2014). Evaluation of the water retention curve of mine waste rock using laboratory tests and predictive models. *67th Canadian Geotechnical Conference (GEO 2014), Regina, Saskatchewan.*
- Peregoedova, Anna. (2012). Étude expérimentale des propriétés hydrogéologiques des roches stériles à une échelle intermédiaire de laboratoire. Mémoire de maîtrise en sciences appliquées, *École Polytechnique de Montréal. Département des génies civil géologique et des mines.*
- Peregoedova, Anna, Aubertin, M., & Bussière, B. (2013). Laboratory measurement and prediction of the saturated hydraulic conductivity of mine waste rock. *Communication présentée à GeoMontreal 2013 : 66th Canadian Geotechnical Conference, Montréal, Québec (p. 6)*
- Pham, H. Q., Fredlund, D. G., & Barbour, S. L. (2005). A study of hysteresis models for soil-water characteristic curves. *Canadian Geotechnical Journal*, 42(6), 1548-1568.
- Plante, B., Benzaazoua, M., & Bussière, B. (2011). Kinetic testing and sorption studies by modified weathering cells to characterize the potential to generate contaminated neutral drainage. *Mine water and the environment*, 30(1), 22-37.
- Plante, B., Benzaazoua, M., Bussière, B., Biesinger, M. C., & Pratt, A. R. (2010). Study of Ni

- sorption onto Tio mine waste rock surfaces. *Applied Geochemistry*, 25(12), 1830-1844.
- Poaty, B., Plante, B., Bussière, B., Benzaazoua, M., Pabst, T., Aubertin, M., Martin, V., Thériault, M., & Nadeau, P. (2018). Geochemical behavior of different waste rock configurations from the Lac Tio mine: Comparison between column tests and experimental waste rock pile results. *Proceedings of Tailings and Mine Waste Conference, Keystone, CO*, 30, 811-821.
- Poeter, E., & Anderson, D. (2005). Multimodel ranking and inference in ground water modeling. *Groundwater*, 43(4), 597-605.
- Ramasamy, M., Power, C., & Mkandawire, M. (2018). Numerical prediction of the long-term evolution of acid mine drainage at a waste rock pile site remediated with an HDPE-lined cover system. *Journal of contaminant hydrology*, 216, 10-26.
- Rey, N. J., Demers, I., Bussière, B., Mbonimpa, M., & Gagnon, M. (2020). A geochemical evaluation of a monolayer cover with an elevated water table for the reclamation of the Doyon-Westwood tailings ponds, Canada. *Environmental Earth Sciences*, 79(2), 1-14.
- Ross, B. (1990). The diversion capacity of capillary barriers. *Water Resources Research*, 26(10), 2625-2629.
- Rozemeijer, J. C., Van Der Velde, Y., McLaren, R. G., Van Geer, F. C., Broers, H. P., & Bierkens, M. F. P. (2010). Integrated modeling of groundwater–surface water interactions in a tile-drained agricultural field: The importance of directly measured flow route contributions. *Water Resources Research*, 46(11).
- Šimůnek, J., van Genuchten, M. T., & Šejna, M. (2008). Development and applications of the HYDRUS and STANMOD software packages and related codes. *Vadose Zone Journal*,

7(2), 587-600.

Smith, L. A., López, D. L., Beckie, R., Morin, K., Dawson, R., & Price, W. (1995).

Hydrogeology of waste rock dumps. British Columbia Ministry of Energy, Mines and Petroleum Resources and CANMET.

Tavakoli, R., Pencheva, G., Wheeler, M. F., & Ganis, B. (2013). A parallel ensemble-based

framework for reservoir history matching and uncertainty characterization. *Computational Geosciences*, 17(1), 83-97.

Trinchero, P., Beckie, R., Sanchez-Vila, X., & Nichol, C. (2011). Assessing preferential flow

through an unsaturated waste rock pile using spectral analysis. *Water Resources Research*, 47(7).

Trudinger, J., & Spitz, K. (2008). *Mining & Sustainability: The Three Circles of Sustainable*

Development. IIR Executive Development, Sydney.

Turunen, M., Gurarslan, G., Šimůnek, J., & Koivusalo, H. (2020). What is the worth of drain

discharge and surface runoff data in hydrological simulations? *Journal of Hydrology*, 125030.

van Genuchten, M. T. (1980). A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity

of Unsaturated Soils¹. *Soil Science Society of America Journal*, 44, 892-898.

Warrick, A. W. (2003). *Soil water dynamics*. Oxford University Press.

Zhao, C., Hobbs, B. E., & Ord, A. (2009). *Fundamentals of computational geoscience: numerical*

methods and algorithms (Vol. 122). Springer Science & Business Media.

Zhou, H., Gómez-Hernández, J. J., & Li, L. (2014). Inverse methods in hydrogeology: Evolution

and recent trends. *Advances in Water Resources*, 63, 22-37.

CHAPITRE 5 DISCUSSION GÉNÉRALE

Une halde à stériles expérimentale a été construite sur le site de la mine du Lac Tio afin d'étudier la performance d'un nouveau type de recouvrement composé d'une couche de contrôle des écoulements (CCE). L'étude de la halde à stérile expérimentale a permis au cours des dernières années l'obtention de données permettant de déterminer le comportement hydrogéologique en place de la couche de contrôle des écoulements en réaction aux conditions climatiques. Les données recueillies ont été intégrées dans des simulations numériques afin d'étudier le comportement et l'évolution dans le temps des teneurs en eau volumique de la couche de contrôle des écoulements et de permettre d'optimiser l'approche et de l'appliquer à d'autres sites. Pour ce faire, des simulations numériques ont été réalisées au moyen d'un modèle 3D représentant la halde et intégrant les essais d'infiltration à grande échelle effectués lors de plusieurs campagnes de terrain. Cependant, les propriétés hydrogéologiques des matériaux composants cette structure était difficiles à mesurer en place compliquant ainsi la calibration des simulations numériques et la détermination de la performance sur le terrain de la méthode de recouvrement.

L'objectif principal de ce projet était donc de proposer une nouvelle méthode de calibration des propriétés hydrogéologiques d'un système de recouvrement en conditions non saturées et de l'appliquer au cas de la halde à stériles expérimentale de la mine du Lac Tio. La méthode proposée devait notamment pouvoir traiter les mesures de teneurs en eau volumique bruitées obtenues lors des essais d'infiltrations à grande échelle. En effet, la qualité des mesures était affectée par plusieurs facteurs extérieurs ou locaux entraînant des variations localisées des teneurs en eau volumique, des erreurs systématiques sur les teneurs en eau volumique mesurées, ainsi qu'un bruit de fond important. L'application d'un filtre passe-bas dans le domaine fréquentiel avec une fréquence de coupure de $2,3 \times 10^{-5}$ Hz a permis de réduire le bruit de fond et d'amplifier les variations de teneurs en eau volumique correspondant au passage des deux fronts de mouillage lors des essais d'infiltration I-C et I-D. De nouveaux paramètres ont ensuite été introduits afin de s'affranchir des erreurs systématiques et des différences locales dans les variations de teneur en eau volumique permettant de restreindre la calibration uniquement sur les tendances induites par le passage des fronts de mouillage infiltrés lors des essais d'infiltration. En particulier, trois paramètres ont été définis dans le but de caractériser le front de mouillage et le drainage dans la

couche de contrôle des écoulements ainsi que le temps d'arrivée du front de mouillage dans la partie supérieure des roches stériles. Ces paramètres étaient :

- t_1 : temps nécessaire pour atteindre 50% de l'augmentation maximale de la teneur en eau volumique en eau induite par l'infiltration dans la couche de contrôle des écoulements (0,80 m).
- t_2 : temps nécessaire pour atteindre 50% de la différence entre la teneur en eau volumique maximale et minimale lors du drainage dans la couche de contrôle des écoulements (0,80 m).
- t_a : temps d'arrivée du front de mouillage dans les stériles, à 1,3 m sous la surface.

En pratique, l'approche utilisée reposait sur la détection automatique et l'utilisation de fonction de maximum local et de maximum appliqué aux dérivées secondes afin d'obtenir les valeurs maximales de teneur en eau volumique et les temps d'arrivée correspondant aux fronts de mouillage des tests I-C et I-D. Les trois paramètres ont par la suite été utilisés afin de calibrer les simulations numériques et de comparer les résultats des simulations aux mesures obtenues expérimentalement.

Les modèles numériques utilisés ont été réalisés avec un modèle poreux équivalent représentant les trois matériaux de la halde expérimentale du lac Tio. Lors de la calibration, le modèle numérique commençait le 1er mai 2017 avec une condition initiale isostatique permettant d'approcher des teneurs en eau volumique résiduelle des matériaux proches des conditions réelles post-hivernales. Puis, les précipitations du mois de mai 2017 permettaient de recréer des conditions réalistes avant les essais d'infiltrations à grande échelle, en juin 2017. Les résultats des teneurs en eau volumique obtenues à la suite de ces essais dans la simulation numérique ont permis d'obtenir les paramètres de calibration. Les paramètres simulés et mesurés ont été comparés par la méthode de l'erreur quadratique moyenne pour chaque sonde, soit 28 paramètres au total.

Une approche de calibration automatique et sans dérivée a été retenue dans cette étude. La calibration des paramètres hydrogéologiques du modèle numérique de la halde à stérile a été réalisée avec le logiciel Nomad (GERAD) proposant diverses fonctions d'optimisation sans dérivée au moyen d'une méthode itérative par boîte noire basée sur l'algorithme de Mads (« Mesh adaptatives direct search »). Dans ce mémoire, les variables d'entrées correspondaient aux propriétés hydrogéologiques des matériaux de la halde à stériles expérimentale tandis que la valeur « objectif » à minimiser était définie comme l'erreur moyenne quadratique entre les valeurs des nouveaux paramètres simulées et celles calculées à partir des mesures obtenues à chaque sonde.

Un ensemble d'algorithmes allant de l'exécution de la simulation numérique au calcul de l'erreur ont été développés afin de traiter de manière totalement automatisée le processus de calibration. Cette méthode avait l'avantage de tester un plus grand nombre de jeux de propriétés que les méthodes de calibration par essais erreur et a permis ici d'itérer un nombre conséquent de jeux de propriétés hydrogéologiques (entre 80 et 100) jusqu'à l'obtention d'un optimal. De plus, l'indépendance des propriétés hydrogéologiques testées permettait de réduire les biais d'interprétation souvent induits par l'utilisation des méthodes de calibration plus conventionnelles (Carrera et al., 2005; Zhou et al., 2014).

Les résultats obtenus par la calibration automatique ont été comparés aux résultats mesurés sur la halde expérimentale. Ainsi, les temps d'arrivée du front de mouillage simulé dans la couche de contrôle des écoulements étaient très proches de ceux mesurés avec moins de 1,8 h de retard pour l'essai I-C et 2.1 h pour l'essai I-D. Les retards du temps d'arrivée simulé du front de mouillage dans les stériles étaient légèrement supérieurs avec une moyenne de 6 h par rapport aux données mesurées. La calibration numérique a ainsi grandement amélioré la représentativité des simulations comparativement à l'utilisation des propriétés hydrogéologiques mesurées *in situ* ou au laboratoire. Les teneurs en eau volumique simulées à une profondeur de 0,80 m représentaient bien les tendances mesurées lors des essais d'infiltration, avec pour certaines sondes, une erreur absolue sur les teneurs en eau volumique inférieure à l'incertitude des senseurs (0,03). Toutefois, les volumes d'eau sortant simulés étaient largement supérieurs à ceux mesurés. Cette différence pourrait s'expliquer (en partie) par le fait que les volumes d'eau sortant pourraient avoir été sous-évalués en raison d'un retard dans l'écoulement ou d'une rétention d'eau importante dans le sable des lysimètres (Trinchero et al., 2011). Les propriétés hydrogéologiques calibrées ont permis de prédire relativement précisément les teneurs en eau volumique dans la couche de contrôle sur une période de 523 j. Les simulations ont montré que l'écart entre les données mesurées et simulées était faible et généralement inférieur à la précision des capteurs. La méthode de calibration proposée a donc permis de déterminer les propriétés hydrogéologiques à partir de seulement 3 paramètres caractérisant le comportement du recouvrement lors de deux essais d'infiltration. Par contre, les simulations représentaient mal les périodes d'hiver et de fontes des neiges, car elles n'incluaient pas le couvert neigeux et le gel de l'eau dans les pores. Les simulations pour certaines précipitations majeures (supérieurs à 100 mm en 72 h) indiquaient également des différences plus marquées, qui pourraient s'expliquer par les phénomènes de ruissellement et d'évaporation qui

n'étaient pas pris en compte ici dans les simulations numériques. En effet, différentes recherches recommandent d'inclure le ruissellement et l'évaporation dans les simulations numériques (Turunen et al., 2020).

Des analyses paramétriques ont permis d'évaluer l'importance du choix et de l'emplacement des capteurs et de l'utilisation des débits de sortie mesurés. La réduction du nombre de capteurs a donné un résultat qui sous-évaluait les variations générales de teneurs en eau volumique dans la CCE. Ce résultat était attendu, et les travaux de Zhou et al. (2014) indiquaient en effet l'importance des effets d'échelles et la nécessité d'avoir un nombre important de points de mesure afin de reproduire les tendances générales lors de la calibration. L'utilisation des débits de sortie dans la calibration a donné une meilleure simulation du temps de drainage après le passage des fronts de mouillages lors des tests I-C et I-D. Cependant, les débits mesurés dans les lysimètres étaient peu fiables (Dubuc, 2018) et nécessiteraient une meilleure résolution des données dans le but d'améliorer les processus de calibration.

L'optimisation des propriétés hydrogéologiques et de l'épaisseur de la couche de contrôle des écoulements a par la suite été réalisée et a permis d'optimiser le design du recouvrement en minimisant le volume d'eau infiltrée dans les stériles. Cette configuration optimale (une épaisseur de 0,77 m ; une conductivité hydraulique de 1×10^{-3} m/s ; un AEV de 8 kPa ; un WEV de 22 kPa ; une porosité de 0,265) correspondait à un résultat idéal de 100% d'efficacité (pas d'infiltration dans les roches stériles réactives) où 67% du volume appliqué lors de l'essai I-C était dévié latéralement en bas de pente (le reste étant retenu dans la CCE). L'épaisseur de la couche de contrôle optimisée était de 0,77 m ce qui était assez proche de la valeur initiale de 0,7 m. Les itérations du logiciel Nomad indiquaient une augmentation de l'épaisseur de la CCE lorsque les écarts entre l'AEV du sable et le WEV des roches stériles étaient relativement proches. Cette relation avait déjà été observée lors de l'analyse paramétrique réalisée par Dubuc (2018). Les propriétés hydrogéologiques obtenues par optimisation indiquaient que le sable de la CCE devrait avoir une conductivité hydraulique de 1×10^{-3} m/s et une porosité de 0,265 pour être le plus efficace. Sa valeur d'AEV était de 8 kPa soit supérieure à la valeur de WEV des roches stériles (2,7 kPa) respectant les recommandations des précédentes recherches sur la CCE (Broda et al., 2014; Fala et al., 2005).

CHAPITRE 6 CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS

6.1 Conclusion

En conclusion, l'avantage majeur de la méthode de calibration proposée dans cette étude est de limiter les comparaisons entre simulations et mesures de terrains à certaines valeurs spécifiques (t_1 , t_2 , t_a) non basées sur les valeurs absolues des teneurs en eau volumique permettant ainsi de reproduire les variations générales de la teneur en eau volumique pour la couche de contrôle des écoulements et ainsi limiter la propagation des erreurs et incertitudes induites par les sondes de mesures de la teneur en eau volumique. La méthode proposée a permis d'obtenir une bonne calibration qui représentait les tendances générales de la halde à stériles expérimentale et a aussi permis d'extrapoler 523 jours de suivis aux conditions climatiques réelles de terrain. De plus, la calibration, réalisée avec l'approche de boîte noire, sur les paramètres proposés convergeait et les résultats obtenus étaient réalistes avec les matériaux de l'étude. Enfin, la méthode développée était totalement automatisée et basée sur un critère objectif qui était la valeur de l'erreur quadratique moyenne.

La calibration a donc permis de mieux caractériser les propriétés des matériaux *in situ* en itérant un nombre conséquent de propriétés hydrogéologiques indépendantes, ce qui a permis de diminuer le biais d'interprétation, et ainsi d'obtenir une meilleure représentativité des simulations.

Enfin, la méthode d'optimisation par boîte noire a aussi pu être utilisée pour optimiser les propriétés hydrogéologiques et physiques de la CCE, ce qui a permis de proposer un design optimal et une efficacité de 100%.

6.2 Recommandations

Plusieurs recommandations peuvent être émises à l'issue de ce projet de recherche et permettraient d'améliorer encore la qualité de la calibration :

- Décomposer chaque matériau spatialement afin de permettre les variations locales des propriétés hydrogéologiques en accord avec les observations de terrain. Par exemple, il a été observé à l'emplacement de la sonde P4 une rétention d'eau plus importante comparativement aux autres positions de mesure.

- Changer les propriétés hydrogéologiques d'entrée pour des propriétés géotechniques afin de représenter un plus grand nombre de résultats. Par exemple, la distribution granulométrique pourrait être utilisée dans le but de contraindre la valeur d'AEV et de conductivité hydraulique en utilisant le modèle de Kovacs-modifié et le modèle de Kozeny-Carman (Chapuis et Aubertin 2003, Aubertin et al. 2003).
- Introduire une optimisation avec une approche bi-objective permettant ainsi d'optimiser l'efficacité du recouvrement CCE à la fois sur les teneurs en eau volumique mesurées dans la halde et sur les débits de sortie récupérés dans les lysimètres.
- Appliquer cette approche de calibration automatisée à d'autres types de recouvrements et d'autres sites miniers pour des conditions climatiques différentes.
- Améliorer les simulations numériques en incluant l'évaporation et le ruissellement, et en utilisant des approches discrètes pour représenter les roches stériles.
- Varier les propriétés des roches stériles lors de l'optimisation de la CCE lors de l'application de ce type de recouvrement sur un nouveau site.

RÉFÉRENCES

- Abbaspour, K. C., Schulin, R., & van Genuchten, M. T. (2001). Estimating unsaturated soil hydraulic parameters using ant colony optimization. *Advances in Water Resources*, 24(8), 827-841.
- Akcil, A., & Koldas, S. (2006). Acid Mine Drainage (AMD): causes, treatment and case studies. *Journal of cleaner production*, 14(12-13), 1139-1145.
- Amos, R. T., Blowes, D. W., Bailey, B. L., Sego, D. C., Smith, L., & Ritchie, A. I. M. (2015). Waste-rock hydrogeology and geochemistry. *Applied Geochemistry*, 57, 140-156.
- Aquanty (2016). HydroGeoSphere User Manual. Release 1.0. Aquanty Inc.
- Aubertin, M., Mbonimpa, M., Bussière, B., & Chapuis, R. P. (2003). A model to predict the water retention curve from basic geotechnical properties. *Canadian Geotechnical Journal*, 40(6), 1104-1122.
- Aubertin, M., Cifuentes, E., Apithy, S. A., Bussière, B., Molson, J., & Chapuis, R. P. (2009). Analyses of water diversion along inclined covers with capillary barrier effects. *Canadian Geotechnical Journal*, 46(10), 1146-1164.
- Aubertin, M., James, M., Maknoon, M. & Bussière, B. (2013). Recommandations pour améliorer le comportement hydrogéotechnique des haldes à stériles. *Proceedings, GeoMontreal 2013 : 66th Canadian Geotechnical Conference, Montréal, Québec* (p. 8).
- Aubertin, M, Pabst, T., Bussière, B., James, M., Mbonimpa, M., Benzaazoua, M., & Maqsoud, A. (2015). Revue des meilleures pratiques de restauration des sites d'entreposage de rejets miniers générateurs de dma. *Proceedings, Symposium 2015 sur l'environnement et les mines, Rouyn-Noranda, Québec* (67 pages)
- Aubertin, Michel, Bussière, B., & Berner, L. (2002a). Environnement et gestion des résidus miniers. Dans *Les Presses Internationales Polytechnique, Montreal, Canada. Manuel sur Cédérom*. Presses Internationales Polytechnique.

- Aubertin, Michel, Bussière, B., Bernier, L., Chapuis, R., Julien, M., Belem, T., Simon, R., Mbonimpa, M., Benzaazoua, M., & Li, L. (2002b). La gestion des rejets miniers dans un contexte de développement durable et de protection de l'environnement. *Proceedings, Annual Conference - Canadian Society for Civil Engineering, 2002*, 317-326.
- Aubertin, Michel, Fala, O., Bussière, B., Martin, V., Campos, D., Gamache-Rochette, A., Chouteau, M., & Chapuis, R. P. (2002c). Analyse des écoulements de l'eau en conditions non saturées dans les haldes à stériles. *Défis et perspectives: Symposium 2002 sur l'environnement et les Mines. Rouyn-Noranda, Canada*.
- Aubertin, Michel, Fala, O., Molson, J., Gamache-Rochette, A., Lahmira, B., Martin, V., Lefebvre, R., Bussière, B., Chapuis, R. P., & Chouteau, M. (2005). Évaluation du comportement hydrogéologique et géochimique des haldes à stériles. *Symposium Rouyn-Noranda: L'Environnement et les Mines*, 15-18.
- Aubertin, Michel, Bussière, B., Pabst, T., James, M., & Mbonimpa, M. (2016). Review of the reclamation techniques for acid-generating mine wastes upon closure of disposal sites. *Proceedings, Geo-Chicago 2016: Sustainability, Energy, and the Environment, Chicago, Ill.* (p. 343-358).
- Audet, C. (2014). A survey on direct search methods for blackbox optimization and their applications. Dans *Mathematics without boundaries* (p. 31-56). Springer.
- Audet, C., & Dennis, J. E. (2006). Mesh Adaptive Direct Search Algorithms for Constrained Optimization. *SIAM Journal on Optimization*, 17(1), 188-217.
- Audet, C., & Hare, W. (2017). *Derivative-free and blackbox optimization*. Springer Series in Operations Research and Financial Engineering, Springer International Publishing.
- Audet, C., & Kokkolaras, M. (2016). *Blackbox and derivative-free optimization: theory, algorithms and applications*. Springer International Publishing..

- Awotunde, A. A., & Horne, R. (2011). A multiresolution analysis of the relationship between spatial distribution of reservoir parameters and time distribution of well-test data. *SPE Reservoir Evaluation & Engineering*, 14(03), 345-356.
- Bahrami, S., Ardejani, F. D., Aslani, S., & Baafi, E. (2014). Numerical modelling of the groundwater inflow to an advancing open pit mine: Kolahdarvazeh pit, Central Iran. *Environmental monitoring and assessment*, 186(12), 8573-8585.
- Benzaazoua, M., Bussière, B., Demers, I., Plante, B., Pepin, G., Aubertin, M., Chouteau, M., Dawood, I., Intissar, R., Lessard, G., Monzon, M., Peregoedova, A., Zagury, G. J., Molson, J. W., & Laflamme, D. (2013). Comportement géochimique et hydrogéologique des stériles de la mine Lac Tio. *Déchets, sciences et techniques*, 64.
- Bigdeli, K., Hare, W., & Tesfamariam, S. (2012). Configuration optimization of dampers for adjacent buildings under seismic excitations. *Engineering Optimization*, 44(12), 1491-1509.
- Blowes, D. W., Ptacek, C. J., Jambor, J. L., Weisener, C. G., Paktunc, D., Gould, W. D., & Johnson, D. B. (2003). The geochemistry of acid mine drainage. *Environmental geochemistry*, 9, 149-204.
- Brawner, C. O. (1986). Groundwater and coal mining. *Mining Science and Technology*, 3(3), 187-198.
- Bréard Lanoix, M.-L. (2017). Caractérisation des propriétés hydrogéologiques de la couche de contrôle des écoulements placée sur la halde à stériles expérimentale à la mine du lac Tio. Mémoire de maîtrise en science appliquées, *École Polytechnique de Montréal, Département des génies civil géologiques et des mines*.
- Bréard Lanoix, M.-L., Pabst, T., & Aubertin, M. (2020). Field determination of the hydraulic conductivity of a compacted sand layer controlling water flow on an experimental mine waste rock pile. *Hydrogeology Journal*, 1-13.
- Broda, S., Aubertin, M., Blessent, D., Hirthe, E., & Graf, T. (2014). Improving control of contamination from waste rock piles. *Environmental Geotechnics*, 4(4), 274-283.
- Broda, S., Aubertin, M., Blessent, D., Hirthe, E., & Graf, T. (2017). Improving control of contamination from waste rock piles. *Environmental Geotechnics*, 4(4), 274-283.

- Brunner, P., & Simmons, C. T. (2012). HydroGeoSphere: a fully integrated, physically based hydrological model. *Groundwater*, 50(2), 170-176.
- Bussière, B. (1999). Étude du comportement hydrique de couvertures avec effets de barrière capillaire inclinées avec l'aide de modélisations physiques et numériques. Thèse de doctorat, *École Polytechnique de Montréal, Département des génies civil, géologique et des mines*.
- Bussière, Bruno, Aubertin, M., & Chapuis, R. P. (2003). The behavior of inclined covers used as oxygen barriers. *Canadian Geotechnical Journal*, 40(3), 512-535.
- Carrera, J., Alcolea, A., Medina, A., Hidalgo, J., & Slooten, L. J. (2005). Inverse problem in hydrogeology. *Hydrogeology Journal*, 13(1), 206-222.
- Chapuis, R. P., & Aubertin, M. (2003). On the use of the Kozeny-Carman equation to predict the hydraulic conductivity of soils. *Canadian Geotechnical Journal*, 40(3), 616-628.
- Dawood, I., & Aubertin, M. (2014). Effect of dense material layers on unsaturated water flow inside a large waste rock pile: A numerical investigation. *Mine Water and the Environment*, 33, 24-38.
- Demers, I., Molson, J., Bussière, B., & Laflamme, D. (2013). Numerical modeling of contaminated neutral drainage from a waste-rock field test cell. *Applied geochemistry*, 33, 346-356.
- Diersch, H.-J. G. (2013). *FEFLOW: finite element modeling of flow, mass and heat transport in porous and fractured media*. Springer Science & Business Media.
- Dimech, A., Chouteau, M., Aubertin, M., Bussière, B., Martin, V., & Plante, B. (2019). Three-Dimensional Time-Lapse Geoelectrical Monitoring of Water Infiltration in an Experimental Mine Waste Rock Pile. *Vadose Zone Journal*, 18(1), 180098.
- Dubuc, J. (2018). Étude du comportement hydrogéologique d'une couche de contrôle des écoulements placée à la surface d'une halde à stériles expérimentale. Mémoire de maîtrise en science appliquées, *École Polytechnique de Montréal, Département des génies civil géologiques et des mines*.
- Dubuc, J., Pabst, T., & Aubertin, M. (2017). An assessment of the hydrogeological response of the flow control layer installed on the experimental waste rock pile at the Lac Tio mine.

Proceedings of the 70th Canadian Geotechnical Society Conference, 70.

- Emsellem, Y., & De Marsily, G. (1971). An automatic solution for the inverse problem. *Water Resources Research*, 7(5), 1264-1283.
- Fala, O., Aubertin, M., Molson, J. W., Bussière, B., Wilson, G. W., Chapuis, R., & Martin, V. (2003). Numerical modelling of unsaturated flow in uniform and heterogeneous waste rock piles. *Sixth International Conference on Acid Rock Drainage (ICARD)*, Australasian Institute of Mining and Metallurgy, Cairns, Australia, Publication Series, 3, 895-902.
- Fala, O., Molson, J., Aubertin, M., & Bussière, B. (2005). Numerical modelling of flow and capillary barrier effects in unsaturated waste rock piles. *Mine Water and the Environment*, 24(4), 172-185.
- Fetter, C. W. (2018). *Applied hydrogeology*. Waveland Press.
- Fienen, M. N., Muffels, C. T., & Hunt, R. J. (2009). On constraining pilot point calibration with regularization in PEST. *Groundwater*, 47(6), 835-844.
- Fredlund, D. G., & Xing, A. (1994). Equations for the soil-water characteristic curve. *Canadian Geotechnical Journal*, 31(4), 521-532. <https://doi.org/10.1139/t94-061>
- Fredlund, D G, Xing, A., & Huang, S. (1994). Predicting the permeability function for unsaturated soils using the soil-water characteristic curve. *Canadian Geotechnical Journal*, 31(4), 533-546.
- Fredlund, Delwyn G, & Rahardjo, H. (1993). *Soil mechanics for unsaturated soils*. John Wiley & Sons.
- Fredlund, M. D., Fredlund, D. G., & Wilson, G. W. (1997). Prediction of the soil-water characteristic curve from grain-size distribution and volume-mass properties. *Proc., 3rd Brazilian Symp. on Unsaturated Soils*, 1, 13-23.
- Fredlund, M. D., Wilson, G. W., & Fredlund, D. G. (2002). Use of the grain-size distribution for estimation of the soil-water characteristic curve. *Canadian Geotechnical Journal*, 39(5), 1103-1117.
- Gamache-Rochette, A. (2004). Water flow characterization in unsaturated rock waste piles using in situ hydrogeological tests. Mémoire de maîtrise en science appliquées, École

- Gloaguen, E., Chouteau, M., Marcotte, D., & Chapuis, R. (2001). Estimation of hydraulic conductivity of an unconfined aquifer using cokriging of GPR and hydrostratigraphic data. *Journal of Applied Geophysics*, 47(2), 135-152.
- Gouvernement du Québec (2017b). Le secteur minier du Québec, Ministère de l'Énergie et des ressources naturelles, 46 p.
- Guay, C., Minville, M., & Braun, M. (2015). A global portrait of hydrological changes at the 2050 horizon for the province of Québec. *Canadian Water Resources Journal/Revue canadienne des ressources hydriques*, 40(3), 285-302.
- Guo, Y., Xu, S., & Shan, W. (2018). Development of a frozen soil dielectric constant model and determination of dielectric constant variation during the soil freezing process. *Cold Regions Science and Technology*, 151, 28-33.
- Hawley, M., & Cuning, J. (2017). *Guidelines for mine waste dump and stockpile design*. CSIRO Publishing.
- He, X., Sonnenborg, T. O., Jørgensen, F., Høyer, A.-S., Møller, R. R., & Jensen, K. H. (2013). Analyzing the effects of geological and parameter uncertainty on prediction of groundwater head and travel time. *Hydrology & Earth System Sciences Discussions*, 10(3).
- Hillel, D. (1980). *Fundamentals of soil physics*. Academic press.
- Hillel, D. (1998). *Environmental soil physics: Fundamentals, applications, and environmental considerations*. Elsevier.
- Hollenbeck, K. J., & Jensen, K. H. (1998). Maximum-likelihood estimation of unsaturated hydraulic parameters. *Journal of Hydrology*, 210(1), 192-205.
- Hotton, G., Bresson, E., Demers, B. B. I., Thomas, P., & Philippe, R. (2018). Assessment of CCBE Performance with Climate Change: Case Study of the Lorraine Mine Site. *Proceedings Tailings and Mine Waste 2018, Keystone, Colorado, USA*.
- Huysmans, M., & Dassargues, A. (2009). Application of multiple-point geostatistics on modelling groundwater flow and transport in a cross-bedded aquifer (Belgium). *Hydrogeology Journal*, 17(8), 1901.

- Isebor, O. J., Durlofsky, L. J., & Ciaurri, D. E. (2014). A derivative-free methodology with local and global search for the constrained joint optimization of well locations and controls. *Computational Geosciences*, 18(3), 463-482.
- Johnson, D. B., & Hallberg, K. B. (2005). Acid mine drainage remediation options: a review. *Science of the total environment*, 338(1-2), 3-14.
- Kresic, N. (2006). *Hydrogeology and groundwater modeling*. CRC press.
- L-Bolduc, F. (2012). Une étude sur l'utilisation des roches stériles comme inclusions drainantes dans les résidus miniers. Mémoire de maîtrise en science appliquées, *École Polytechnique de Montréal, Département des génies civil géologiques et des mines*
- Lahmira, B., Lefebvre, R., Aubertin, M., & Bussière, B. (2016). Effect of heterogeneity and anisotropy related to the construction method on transfer processes in waste rock piles. *Journal of Contaminant Hydrology*, 184, 35-49.
- Le Digabel, S. (2011). Algorithm 909: NOMAD: Nonlinear optimization with the MADS algorithm. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 37(4), 1-15.
- Lefebvre, R., & Gélinas, P. J. (1995). Numerical modelling of AMD production in waste rock dumps. *Proceedings Mining and the Environment 1995*, 869-878.
- Lessard, G. (2011). Essais d'infiltration sur la halde à stériles Petit-Pas de la mine Tio, Havre-St-Pierre. Mémoire de maîtrise. *École Polytechnique de Montréal, Département des génies civil, géologique et des mines*.
- Martin, V., Bussière, B., Plante, B., Pabst, T., Aubertin, M., Medina, F., ... & Wu, R. (2017). Controlling water infiltration in waste rock piles: Design, construction, and monitoring of a large-scale in-situ pilot test pile. In *Proceedings of the 70th Canadian Geotechnical Society Conference* (Vol. 70).
- McCarter, M. K. (1990). Design and operating considerations for mine waste embankments. *SOC OF MINING ENGINEERS OF AIME, LITTLETON, CO,(USA), 1990.*, 890-899.
- McLemore, V. T., Fakhimi, A., van Zyl, D., Ayakwah, G. F., Anim, K., Boakye, K., Ennin, F., Felli, P., Fredlund, D., & Gutierrez, L. A. F. (2009). Literature review of other rock piles: Characterization, weathering, and stability. *Report OF-517, Questa Rock Pile Weathering*

Stability Project.

- Minville, M., Cartier, D., Guay, C., Leclaire, L., Audet, C., Le Digabel, S., & Merleau, J. (2014). Improving process representation in conceptual hydrological model calibration using climate simulations. *Water Resources Research*, 50(6), 5044-5073.
- Molson, J. W., Fala, O., Aubertin, M., & Bussière, B. (2005). Numerical simulations of pyrite oxidation and acid mine drainage in unsaturated waste rock piles. *Journal of Contaminant Hydrology*, 78(4), 343-371.
- Moosavi, A. A., & Sepaskhah, A. R. (2013). Sorptive number prediction of highly calcareous soils at different applied tensions using regression models. *Plant Knowledge Journal*, 2(2), 62-68.
- Morel-Seytoux, H. J. (1992). L'effet de barriere capillaire a l'interface de deux couches de sol aux propriétés fort contrastées. *Hydrol. continent*, 7, 117-128.
- Naseri, M., Iden, S. C., Richter, N., & Durner, W. (2019). Influence of Stone Content on Soil Hydraulic Properties: Experimental Investigation and Test of Existing Model Concepts. *Vadose Zone Journal*, 18(1), 180163.
- Nearing, G. S., & Gupta, H. V. (2018). Ensembles vs. information theory: supporting science under uncertainty. *Frontiers of Earth Science*, 12(4), 653-660.
- 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.
- Niswonger, R. G., Panday, S., & Ibaraki, M. (2011). MODFLOW-NWT, a Newton formulation for MODFLOW-2005. *US Geological Survey Techniques and Methods*, 6(A37), 44.
- Pabst, T., Bussière, B., Aubertin, M., & Molson, J. (2018). Comparative performance of cover systems to prevent acid mine drainage from pre-oxidized tailings: A numerical hydro-geochemical assessment. *Journal of contaminant hydrology*, 214, 39-53.
- Pabst, T., Molson, J., Aubertin, M., & Bussière, B. (2017). Reactive transport modelling of the hydro-geochemical behaviour of partially oxidized acid-generating mine tailings with a monolayer cover. *Applied Geochemistry*, 78, 219-233.

- Peregoedova, A, Aubertin, M., & Bussière, B. (2014). Evaluation of the water retention curve of mine waste rock using laboratory tests and predictive models. *Proceedings, 67th Canadian Geotechnical Conference (GEO 2014), Regina, Saskatchewan.*
- Peregoedova, Anna. (2012). Étude expérimentale des propriétés hydrogéologiques des roches stériles à une échelle intermédiaire de laboratoire. Mémoire de maîtrise en sciences appliquées, *École Polytechnique de Montréal, Département des génies civil géologique et des mines.*
- Peregoedova, Anna, Aubertin, M., & Bussière, B. (2013). Laboratory measurement and prediction of the saturated hydraulic conductivity of mine waste rock. *Proceedings of GeoMontreal 2013 : 66th Canadian Geotechnical Conference, Montréal, Québec (p. 6).*
- Pham, H. Q., Fredlund, D. G., & Barbour, S. L. (2005). A study of hysteresis models for soil-water characteristic curves. *Canadian Geotechnical Journal*, 42(6), 1548-1568.
- Plante, B., Benzaazoua, M., & Bussière, B. (2011). Kinetic testing and sorption studies by modified weathering cells to characterize the potential to generate contaminated neutral drainage. *Mine water and the environment*, 30(1), 22-37.
- Plante, B., Benzaazoua, M., Bussière, B., Biesinger, M. C., & Pratt, A. R. (2010). Study of Ni sorption onto Tio mine waste rock surfaces. *Applied Geochemistry*, 25(12), 1830-1844.
- Poaty, B., Plante, B., Bussière, B., Benzaazoua, M., Pabst, T., Aubertin, M., Martin, V., Thériault, M., & Nadeau, P. (2018). Geochemical behavior of different waste rock configurations from the Lac Tio mine: Comparison between column tests and experimental waste rock pile results. *Proceedings of Tailings and Mine Waste Conference, Keystone, CO*, 30, 811-821.
- Poeter, E., & Anderson, D. (2005). Multimodel ranking and inference in ground water modeling. *Groundwater*, 43(4), 597-605.
- Ramasamy, M., Power, C., & Mkandawire, M. (2018). Numerical prediction of the long-term evolution of acid mine drainage at a waste rock pile site remediated with an HDPE-lined cover system. *Journal of contaminant hydrology*, 216, 10-26.
- Rey, N. J., Demers, I., Bussière, B., Mbonimpa, M., & Gagnon, M. (2020). A geochemical evaluation of a monolayer cover with an elevated water table for the reclamation of the

- Doyon-Westwood tailings ponds, Canada. *Environmental Earth Sciences*, 79(2), 1-14.
- Ross, B. (1990). The diversion capacity of capillary barriers. *Water Resources Research*, 26(10), 2625-2629.
- Rozemeijer, J. C., Van Der Velde, Y., McLaren, R. G., Van Geer, F. C., Broers, H. P., & Bierkens, M. F. P. (2010). Integrated modeling of groundwater–surface water interactions in a tile-drained agricultural field: The importance of directly measured flow route contributions. *Water Resources Research*, 46(11).
- Šimůnek, J., van Genuchten, M. T., & Šejna, M. (2008). Development and applications of the HYDRUS and STANMOD software packages and related codes. *Vadose Zone Journal*, 7(2), 587-600.
- Smith, L. A., López, D. L., Beckie, R., Morin, K., Dawson, R., & Price, W. (1995). *Hydrogeology of waste rock dumps*. British Columbia Ministry of Energy, Mines and Petroleum Resources and CANMET.
- Tavakoli, R., Pencheva, G., Wheeler, M. F., & Ganis, B. (2013). A parallel ensemble-based framework for reservoir history matching and uncertainty characterization. *Computational Geosciences*, 17(1), 83-97.
- Trinchero, P., Beckie, R., Sanchez-Vila, X., & Nichol, C. (2011). Assessing preferential flow through an unsaturated waste rock pile using spectral analysis. *Water Resources Research*, 47(7).
- Trudinger, J., & Spitz, K. (2008). *Mining & Sustainability: The Three Circles of Sustainable Development*. IIR Executive Development, Sydney.
- Turunen, M., Gurarslan, G., Šimůnek, J., & Koivusalo, H. (2020). What is the worth of drain discharge and surface runoff data in hydrological simulations? *Journal of Hydrology*, 125030.
- van Genuchten, M. T. (1980). A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils¹. *Soil Science Society of America Journal*, 44, 892-898.
- Warrick, A. W. (2003). *Soil water dynamics*. Oxford University Press.
- Zhao, C., Hobbs, B. E., & Ord, A. (2009). *Fundamentals of computational geoscience: numerical*

methods and algorithms (Vol. 122). Springer Science & Business Media.

Zhou, H., Gómez-Hernández, J. J., & Li, L. (2014). Inverse methods in hydrogeology: Evolution and recent trends. *Advances in Water Resources*, 63, 22-37.

ANNEXE A CODE PYTHON UTILISÉ LORS DE LA CALIBRATION DE LA SIMULATION NUMÉRIQUE

Code Python permettant de réaliser la calibration de la simulation numérique :

```
#Importer les librairies
import pandas as pd
import numpy as np
import numpy.fft
from scipy.signal import argrelextrema
from scipy import signal
import matplotlib.pyplot as plt
from lmfit import Model
from scipy import interpolate
import scipy.optimize as op
import csv
import os, subprocess
from scipy import optimize
from math import log
import sys
#Logiciel Nomad: téléchargement: https://www.gerad.ca/nomad/
sys.path.append('C:\\Users\\tocro\\Desktop\\nomad.3.9.1_Personal\\examples\\interfaces\\pyNomad_Beta')
import PyNomad

# importer les données
def getData(sf):
    #ouvrir le fichier
    f = open(sf, 'r')
    f.readline()
    f.readline()
    f.readline()
    #initialiser les vecteurs
    time = []
    sat = []
    #retirer les espaces
    line = f.readline().split(' ')
    #créer le vecteur ligne avec les différentes valeurs
    line = [x for x in line if x]

    while len(line) > 1:
        time.append(float(line[0])) # extrait le pas de temps
        sat.append(float(line[3]) * 0.30) # 0.30 correspond à la
        #porosité pour le passage de la saturation à la teneur en eau volumique
        line = f.readline().split(' ') #passage à la ligne suivante
        line = [x for x in line if x]
    #fermer le fichier
    f.close()
    #retourne le temps et la saturation
    return time, sat

#Obtenir les les résultats de HGS
def GetHGSValue(sim_path):
```

```

    # doit retourner un numpy array
    names = ['moiso.observation_well_flow.x_%sbot.dat' % i for i in (5,
15, 25, 45, 55)]
    y_tot = []
    #Préparer les variables teneurs en eau volumique et temps
    for x in names:
        time, sat = getData(sim_path + x)
        y_pz = []
        for t in range(len(time)):
            y_pz.append(sat[t])
        y_tot.append(y_pz)
    return time, y_tot

# Extraire l'essai d'infiltration 37=> 7 Juin 2017
def extraire(t, serie):
    # extraire un essai d infiltration
    i = t.index(37)
    i2 = t.index(45)
    tfit = t[i:i2]
    lysmagfit = serie[i:i2]
    #extraire minimum
    ma = max(lysmagfit)
    bo = lysmagfit.index(ma)
    d = min(lysmagfit[0:bo])
    return tfit, lysmagfit, d

#adapter aux temps du surrogate I-C commence à 2j
def extrairesurogate(t, serie):
    # extraire un essai d infiltration
    t = list(t)
    serie = list(serie)
    i = t.index(2)
    i2 = t.index(10)
    tfit = t[i:i2]
    lysmagfit = serie[i:i2]
    ma = max(lysmagfit)
    bo = lysmagfit.index(ma)
    d = min(lysmagfit[0:bo])
    return tfit, lysmagfit, d

#extraire les propriétés hydrogéologiques depuis HGS
def extrairemprops(folder):
    src = open(folder + 'mat.mprops', 'r') # Ouvrir le fichier des
propriétés hydrogéologiques de HGS
    src_lines = src.readlines()
    src.close()
    # steriles
    ksat1 = float(src_lines[6].strip())
    alpha1 = float(src_lines[17].strip())
    beta1 = float(src_lines[20].strip())
    ts1 = float(src_lines[9].strip())
    tr1 = float(src_lines[14].strip()) * ts1
    # anorthosite concassée
    ksat2 = float(src_lines[38].strip())
    alpha2 = float(src_lines[49].strip())
    beta2 = float(src_lines[52].strip())

```

```

ts2 = float(src_lines[41].strip())
tr2 = float(src_lines[46].strip()) * ts2
# cce
ksat3 = float(src_lines[69].strip())
alpha3 = float(src_lines[81].strip())
beta3 = float(src_lines[84].strip())
ts3 = float(src_lines[73].strip())
tr3 = float(src_lines[78].strip()) * ts3
# Vecteur des conductivités hydrauliques saturées
k = [ksat1, ksat2, ksat3]
# Vecteur des paramètres alpha de Van Genuchten
alpha = [alpha1, alpha2, alpha3]
# Vecteur des paramètres n de Van Genuchten
beta = [beta1, beta2, beta3]
# Vecteur utilisé comme argument dans le cas du traçage de la courbe
de rétention d'eau
ts = [ts1, ts2, ts3]
tr = [tr1, tr2, tr3]
# Matrice des propriétés hydrogéologiques
prop = [k, alpha, beta, ts, tr]
print(prop)
return prop

# edit lines and properties
def editMprops(folder, params):
    src = open(folder + 'mat.mprops', 'r')
    src_lines = src.readlines()
    src.close()
    src_lines[6] = str(params[0][0]) + '\n' # Conductivité hydraulique
des stériles
    src_lines[38] = str(params[0][1]) + '\n' # Conductivité hydraulique
de la roche stérile concassées
    src_lines[69] = str(params[0][2]) + '\n' # Conductivité hydraulique
du sable CCE
    src_lines[17] = str(params[1][0]) + '\n' # Paramètre alpha VG des
roches stériles
    src_lines[49] = str(params[1][1]) + '\n' # Paramètre alpha VG des
roches stériles concassées
    src_lines[81] = str(params[1][2]) + '\n' # Paramètre alpha VG du sable
CCE
    src_lines[20] = str(params[2][0]) + '\n' # Paramètre n VG des roches
stériles
    src_lines[52] = str(params[2][1]) + '\n' # Paramètre n VG des roches
stériles concassées
    src_lines[84] = str(params[2][2]) + '\n' # Paramètre n VG du sable
CCE
    # Ecrire les lignes
    src = open(folder + 'mat.mprops', 'w')
    src.writelines(src_lines)
    src.close()
    return

#calcul de l'erreur quadratique moyenne A pour mesuré B pour simuler
def erreurcar(A, B):
    eens = []
    for i in range(0, 4):

```

```

    e_tot = []
    for k in range(0, 5):
        if k == 1:
            e = 2 * (A[i, k] - B[i][k]) ** 2
        elif k == 4:
            e = 2 * (A[i, k] - B[i][k]) ** 2
        else:
            e = (A[i, k] - B[i][k]) ** 2
        e_tot.append(e)
    eenss.append(e_tot)
    eenss = np.array(eenss)
    moyer = eenss.mean()
    #sortie => RMSE
    return moyer

#créer un fichier de suivi des itérations
def suivi(folder):
    src = open(folder + 'material.mprops', 'r')
    src_lines = src.readlines()
    src.close()
    src_lines[2] = '2.7e-4\n'
    src_lines[6] = str(params[0]) + '\n' # porosity
    src_lines[8] = str(params[1]) + '\n' # dispersivity longi
    src_lines[10] = str(params[2]) + '\n' # porosity transverse
    src_lines[12] = str(params[3]) + '\n' # porosity transverse vertical
    src_lines[18] = str(params[4]) + '\n' # porosity imm
    src_lines[20] = str(params[5]) + '\n' # transfert
    src = open(folder + 'suivi.txt', 'w')
    a = list(src_lines)
    src.write(a)
    src.close()

#Obtenir les paramètres décrivant les mesures (calculer précédemment et sous forme de tableau Excel
def openmesure(filetxt):
    reader = csv.reader(open(filetxt, 'r'), delimiter=',')
    x = list(reader)
    x = [i for i in x if i]
    print(x)
    B = np.array(x).astype('float')
    return B

#Variante du code permettant de résoudre la calibration sur l'AEV et WEV
#entrée van Genuchten =>sortie AEV
def entryvalue(prop):
    lin = np.logspace(-2, 2, 100000)
    A = []
    print(prop)
    for i in range(3):
        l = [prop[1][i], prop[2][i]]
        tsi = prop[3][i]
        tri = prop[4][i]
        y = vangenl(lin, l, tri, tsi)
        #Equation de van Genuchten (1980)
        def entryvalueVG(lin, pAEV, pWEV):
            q = (tsi - tri) / (np.log10(pAEV) - np.log10(pWEV))
            cst = tsi - (tsi - tri) / (np.log10(pAEV) - np.log10(pWEV)) *

```



```

(np.log10(pAEV))
    y1 = list(range(len(lin)))
    for i in range(len(lin)):
        if lin[i] <= pAEV:
            y1[i] = tsi
        elif lin[i] >= pWEV:
            y1[i] = tri
        else:
            y1[i] = q * np.log10(lin[i]) + cst

    return y1
#Paramètre fitting
gmodel = Model(entryvalueVG)
result = gmodel.fit(y, lin=lin, pAEV=6, pWEV=15)
res = result.params
print(res)
result = result.best_fit
a = []
for x in res:
    a.append(res[x].value)
A.append(a)

print(A)
for i in range(3):
    prop[1][i] = A[i][0]
    prop[2][i] = A[i][1]
#nouveau vecteur de propriété avec AEV et WEV
return prop

#Procédure inverse pour utilisation dans HGS
def vangeuchtenparAEV(lin, pAEV, pWEV, tr, ts):
    q = (ts - tr) / (np.log10(pAEV) - np.log10(pWEV))
    cst = ts - (ts - tr) / (np.log10(pAEV) - np.log10(pWEV)) *
np.log10(pAEV)
    y = list(range(len(lin)))

    def vangen(lin, a, n):

        y = tr + (ts - tr) / ((1 + (a * lin) ** n) ** (1 - 1 / n))
        return y

    for i in range(len(lin)):
        if lin[i] <= pAEV:
            y[i] = ts
        elif lin[i] >= pWEV:
            y[i] = tr
        else:
            y[i] = q * np.log10(lin[i]) + cst

    gmodel = Model(vangen)
    result = gmodel.fit(y, lin=lin, a=0.1, n=6)
    res = result.params
    # result = result.best_fit
    a = []
    for x in res:
        a.append(res[x].value)
    print(a)

```

```

    return a
def GetHGSValue2(sim_path):
    # extraire à 1.30m
    names = ['/moiso.observation_well_flow.x_%ssttop.dat' % i for i in (
25, 35, 45, 55)]
    y_tot = []
    # obtention des teneurs en eau volumique aux pas de temps
    # extraire les teneurs en eau volumique
    for x in names:
        time, sat = getData(sim_path + x)
        i = t.index(37)
        i2 = t.index(51)
        y_pz = []
        tr = t[i:i2]
        for t in range(i, i2):
            y_pz.append(sat[t])
        y_tot.append(y_pz)
    Res = []
    for x in range(len(y_tot)):
        f = interpolate.Akima1DInterpolator(tr, x)
        # calcul de la dérivé deuxième
        f2 = interpolate.Akima1DInterpolator(tr, f)
        y_n = f.__call__(tr)
        y_2n = f2.__call__(tr)
        plt.subplot(1, 3, 3).set(xlabel='time (j)')
        plt.plot(tr, y_n)
        # extraire maximum de la dérivé seconde
        A = tr[argrelextrema(f2, np.greater, order=100)]
        # création de la sortie correspondant au temps d'arrivé du front
de mouillage
        res = []
        for i in [0, 1]:
            res.append(A[i])
        return res
    Res.append(res)
    return Res

#Fonction equivalente pour le Surrogate
def GetHGSValue2stg(sim_path):
    # doit retourner un numpy array
    names = ['/moiso.observation_well_flow.x_%ssttop.dat' % i for i in
(15, 25, 35, 45, 55)]
    y_tot = []

    for x in names:
        time, sat = getData(sim_path + x)
        y_pz = []
        for t in range(len(time)):
            y_pz.append(sat[t])
        y_tot.append(y_pz)
    G = []
    for x in range(len(y_tot)):
        a = []
        b = []
        for i in range(len(time)):
            if time[i] > 2.5:
                if y_tot[x][i] < 0.04:

```

```

        y_tot[x][i] = 0.04
        a.append(time[i])
        b.append(y_tot[x][i])
    lin = np.linspace(2.8, 10, 1000)
    f = interpolate.interpld(a, b, kind='cubic')(lin)
    h = (2.8 - 10) / 1000
    g = []
    for i in range(len(lin) - 1):
        g.append((f[i + 1] - f[i]) / h)
    lin2 = lin[0:999]
    G.append(g)
Res = []
for x in range(len(G)):
    f = interpolate.Akima1DInterpolator(lin2, g)
    y_n = f.__call__(lin2)
    F_n = f.antiderivative(1) # construit la n-ième primitive
    y_n = F_n.__call__(lin2)
    A = lin2[argrelextrema(y_n, np.greater, order=200)]
    A2 = y_n[argrelextrema(y_n, np.greater, order=200)]
    print(A, A2)
    A = [float(c) for c in A]
    A2 = [float(c) for c in A2]
    id1 = list(lin2).index(lin2[np.abs(lin2 - 2.86).argmin()])
    id2 = list(lin2).index(lin2[np.abs(lin2 - A[0]).argmin()])
    id3 = list(lin2).index(lin2[np.abs(lin2 - 9.90).argmin()])
    tcut1 = lin2[id1:id2]
    tcut2 = lin2[id2:id3]
    tr501 = tcut1[np.abs(y_n[id1:id2] - 0.50 * A2[0]).argmin()]
    tr502 = tcut2[np.abs(y_n[id2:id3] - 0.50 * A2[0]).argmin()]
    res50 = []
    res50.append(tr501)
    res50.append(tr502)
    Res.append(res50)

return Res

def GetHGSValue2bot(sim_path):
    # extraire résultat à 0.80m
    names = ['/moiso.observation_well_flow.x_%sbot.dat' % i for i in (15,
25, 35, 45, 55)]
    y_tot = []
    # extraire les teneurs en eau volumique
    for x in names:
        time, sat = getData(sim_path + x)
        i = t.index(37)
        i2 = t.index(51)
        y_pz = []
        lin2=t[i:i2]
        for t in range(i,i2):
            y_pz.append(sat[t])
        y_tot.append(y_pz)
    Res=[]
    for x in range(len(y_tot)):

        # extraire la teneur en eau volumique maximale
        A = lin2 [argrelextrema(x, np.greater, order=200)]

```

```

    A2 = x[argrelextrema(x, np.greater, order=200)]
    # séparer la courbe entre passage des fronts de mouillage et
    phase de drainage
    A = [float(c) for c in A]
    A2 = [float(c) for c in A2]
    id1 = list(lin2).index(lin2[np.abs(lin2 - 37.86).argmin()])
    id2 = list(lin2).index(lin2[np.abs(lin2 - A[0]).argmin()])
    id3 = list(lin2).index(lin2[np.abs(lin2 - 44.85).argmin()])
    id4 = list(lin2).index(lin2[np.abs(lin2 - A[1]).argmin()])
    id5 = list(lin2).index(lin2[np.abs(lin2 - 52.00).argmin()])
    tcut1 = lin2[id1:id2]
    tcut2 = lin2[id2:id3]
    tcut3 = lin2[id3:id4]
    tcut4 = lin2[id4:id5]
    #obtenir les paramètre
    tr501 = tcut1[np.abs(x[id1:id2] - 0.50 * A2[0]).argmin()] #tc1
    tr502 = tcut2[np.abs(x[id2:id3] - 0.50 * A2[0]).argmin()] #tc2
    tr503 = tcut3[np.abs(x[id3:id4] - 0.50 * A2[1]).argmin()] #td1
    tr504 = tcut4[np.abs(x[id4:id5] - 0.50 * A2[1]).argmin()] #td2
    res50 = []
    #enregistrer le resultat
    res50.append(tr501)
    res50.append(tr502)
    res50.append(tr503)
    res50.append(tr504)
    # concatener les resultats de chaque sonde
    Res.append(res50)
    #donne les paramètres à chaque
    return Res

def GetHGSValue2botstg(sim_path):
    # doit retourner un numpy array
    names = ['%moiso.observation_well_flow.x_%sbot.dat' % i for i in (15,
25, 45, 55)]
    y_tot = []
    i = t.index(2)
    i2 = t.index(10)
    y_pz = []
    lin2 = t[i:i2]
    for t in range(i, i2):
        y_pz.append(sat[t])
    y_tot.append(y_pz)
    Res = []
    for x in range(len(y_tot)):
        # extraire la teneur en eau volumique maximale
        A = lin2[argrelextrema(x, np.greater, order=200)]
        A2 = x[argrelextrema(x, np.greater, order=200)]
        # séparer la courbe entre passage des fronts de mouillage et
        phase de drainage
        A = [float(c) for c in A]
        A2 = [float(c) for c in A2]
        A = lin2[argrelextrema(y_n, np.greater, order=250)]
        A2 = y_n[argrelextrema(y_n, np.greater, order=250)]
        A = [float(c) for c in A]
        A2 = [float(c) for c in A2]
        id1 = list(lin2).index(lin2[np.abs(lin2 - 2.86).argmin()])

```

```

        id2 = list(lin2).index(lin2[np.abs(lin2 - A[0]).argmin()])
        id3 = list(lin2).index(lin2[np.abs(lin2 - 9.90).argmin()])
        tcut1 = lin2[id1:id2]
        tcut2 = lin2[id2:id3]
        tr501 = tcut1[np.abs(y_n[id1:id2] - 0.50 * A2[0]).argmin()]
        tr502 = tcut2[np.abs(y_n[id2:id3] - 0.50 * A2[0]).argmin()]
        res50 = []
        res50.append(tr501)
        res50.append(tr502)
        Res.append(res50)
    return Res

#calcul de l'erreur quadratique pour 1.30
def comparaison2(path):
    Res = GetHGSValue2(path)
    B = openmesure(path + '/arriver110.csv')
    eenss = []
    for i in range(0, 4):
        e_tot = []
        for k in range(0, 3):
            if k == 1:
                e = (Res[i][k] - B[i][k]) ** 2
            elif k == 4:
                e = (Res[i][k] - B[i][k]) ** 2
            else:
                e = (Res[i][k] - B[i][k]) ** 2
            e_tot.append(e)
        eenss.append(e_tot)
    eenss = np.array(eenss)
    moyer = eenss.mean()
    print(e_tot)
    return moyer

#calcul de l'erreur quadratique pour 1.30 (surrogate)
def comparaison2stg(path):
    Res = GetHGSValue2stg(path)
    B = openmesure(path + '/arriver110.csv')
    eenss = []
    for i in range(0, 4):
        e_tot = []
        for k in range(0, 1):
            e = 2 * (Res[i][k] - B[i][k]) ** 2
            e_tot.append(e)
        eenss.append(e_tot)
    eenss = np.array(eenss)
    moyer = eenss.mean()
    print(e_tot)
    return moyer

#calcul de l'erreur quadratique pour 0.80m
def comparaison2bot(path):
    Res = GetHGSValue2bot(path)
    B = openmesure(path + '/arriver80.csv')
    eenss = []
    for i in range(0, 4):
        e_tot = []
        for k in range(0, 3):

```

```

        if k == 1:
            e = 2 * (Res[i][k] - B[i][k]) ** 2
        elif k == 4:
            e = 2 * (Res[i][k] - B[i][k]) ** 2
        else:
            e = (Res[i][k] - B[i][k]) ** 2
        e_tot.append(e)
        eenss.append(e_tot)
    eenss = np.array(eenss)
    moyer = eenss.mean()
    print(e_tot)
    return moyer

#calcul de l'erreur quadratique pour 0.80m (Surrogate)
def comparaison2botstg(path):
    Res = GetHGSValue2botstg(path)
    B = openmesure(path + '/arriver80.csv')
    eenss = []
    for i in range(0, 3):
        e_tot = []
        for k in range(0, 1):
            e = 2 * (Res[i][k] - B[i][k]) ** 2
            e_tot.append(e)
        eenss.append(e_tot)
    eenss = np.array(eenss)
    moyer = eenss.mean()
    print(e_tot)
    return moyer

def HGSMoel(params, args):
    # params correspond à au 9 propriétés hydrogeologiques
    #Ksat, alpha VG, n VG
    #args correspond à la porosité et à la teneur en eau volumique
    résiduelle
    #paramètres entrés sous forme de log
    #transformation des paramètres d'entrés
    params = [10 ** x for x in params]
    #enregistrer les propriétés dans un fichier texte
    folder = '/TOM/tom0618/optimisationt50' + '/'
    src = open(folder + 'suivi.txt', 'a+')
    src.write('#' + ' ' + str(params) + '\n')
    src.close()
    #mettre les propriétés hydrogéologiques dans le bon format
    #pour la fonction d'édition de .mprop
    params = np.reshape(params, (3, 3))
    params = [list(row) for row in params]
    print(params)
    params.append(args[0][:])
    params.append(args[1][:])
    print(params, args)
    print(params)
    #déterminer le dossier de la calibration
    path = '/TOM/tom0618/optimisationt50'
    #éditer le fichier .mprop
    editMprops(path + '/', params)
    #ouvrir le terminal de commande
    os.chdir(path)

```

```

#exécuter la compilation du dossier .grok
p = subprocess.Popen('./grok.exe')
p.wait()
# réaliser la simulation numérique
p = subprocess.Popen('./phgs.exe')
p.wait()
#extraction des résultats
#obtention des paramètres
#calcul de l'erreur quadratique
etot = comparaison(path)
#écrire le résultat dans un fichier de suivi
src = open(folder + 'suivi2.txt', 'a+')
src.write('#' + ' ' + str(etot) + '\n')
src.close()
os.chdir(path)
# donne l'erreur quadratique moyenne en sortie
return etot

#fonction objectif pour la boucle "Surrogate"
def HGSMODELsgt(params, args):

    print(params)
    params = [10 ** x for x in params]
    print(params)
    folder = '/TOM/tom0618/substitut2' + '/'
    src = open(folder + 'suivi.txt', 'a+')
    src.write('#' + ' ' + str(params) + '\n')
    src.close()
    params = np.reshape(params, (3, 3))
    params = [list(row) for row in params]
    print(params)
    params.append(args[0][:])
    params.append(args[1][:])
    print(params, args)
    print(params)
    path = '/TOM/tom0618/substitut2'
    editMprops(path + '/', params)
    os.chdir(path)
    p = subprocess.Popen('./grok.exe')
    p.wait()
    p = subprocess.Popen('./phgs.exe')
    p.wait()
    etot = comparaison2botstg(path)
    etot2 = comparaison2stg(path)
    etot = 0.5 * etot + 0.5 * etot2
    src = open(folder + 'suivi2.txt', 'a+')
    src.write('#' + ' ' + str(etot) + '\n')
    src.close()
    os.chdir(path)
    return etot

# fonction d'appel de Nomad pour réaliser la calibration
def optimum(path):
    #définir les propriétés comme des variables globales
    global prop
    global params

```

```

# extraire les propriétés hydrogéologiques initiales
prop = extrairemprops(path)
prop = np.array(prop)
print(prop, 'ok')
# linéarisation du vecteur d'entrée
params = np.ravel(np.array([prop[0, :], prop[1, :], prop[2, :]]))
# transformation en log base 10 des propriétés hydrogéologiques
params = [log(x, 10) for x in params]
#rappel des arguments: porosité et teneur en eau volumique résiduel
args = [prop[3, :], prop[4, :]]
args = [list(row) for row in args]
#fonction de boîte noire
#initialisation vecteur initial xo et options surrogate
def bb(xo, sgte_eval):
    print(xo)
    #définir la dimension du vecteur linéaire 9 dans ce cas
    dim = xo.get_n()
    #f correspond aux formatage du vecteur xo pour correspondre au
format numérique du logiciel
    f = [xo.get_coord(i) for i in range(dim)]
    print(f)
    #définir le test lors de l'itération du surrogate
    if (sgte_eval):
        # appel de la fonction surrogate
        g = HGSMODELSGT(f, args)

    else:
        #appel de la boîte noire
        g = HGSMODEL(f, args)
        #définir le nombre de sortie, si contrainte plusieurs sortie
        xo.set_bb_output(0, g)

    return 1 # 1: success 0: failed evaluation
#initialisation des fichiers de suivis
src = open(os.getcwd() + '/' + 'suivi.txt', 'w')
src.close()
src = open(os.getcwd() + '/' + 'suivi2.txt', 'w')
src.close()
# limite de l'ensemble Omega
#limite basse
lb = [1.2, -0.1, -0.218244625, -1.5, -1.5, -1.5, 0.002, 0.002, 0.002]
#limite haute
ub = [3.839478047, 2.635483747, 1, 1.8, 1.8, 1.8, 1.6, 1.6, 1.6]
# définition des options du logiciel Nomad respectivement:
#fichier de suivi
#Taille du paramètre de sondage initial
#limite de la taille du paramètre de sondage
#sortie de la boîte noire, ici 1 correspondant à la valeur de sortie
esum => définis OBJ
#maximum d'itération autorisé 100
#valeur d'arrêt 0.02
#activé options surrogate
#affiché les informations à chaque itération
#suivie pour chaque itération
#générer un fichier cache
paramet = ['STATS_FILE stats.txt BBE BBO CONS_H MESH_SIZE SGTE
STAT_AVG STAT_SUM TIME SOL f=%.2EOBJ',

```



```

        'INITIAL_POLL_SIZE (0.5 0.5 0.5 0.01 0.01 0.01 0.03 0.03
0.03)',
        'MIN_POLL_SIZE (0.1 0.1 0.1 0.005 0.005 0.005 0.01 0.01
0.01)', 'BB_OUTPUT_TYPE OBJ',
        'MAX_BB_EVAL 100', 'F_TARGET 0.1', 'HAS_SGTE yes',
'DISPLAY_STATS BBE THREAD_NUM OBJ',
        'DISPLAY_ALL_EVAL yes', 'CACHE_FILE cache.txt']
    #lancer le logiciel black box
    [x_return, f_return, h_return, nb_evals, nb_iters, stopflag] =
PyNomad.optimize(bb, params, lb, ub, paramet)
    #visualisation du résultat final dans le terminal
    print('\n NOMAD outputs \n X_sol={} \n F_sol={} \n H_sol={} \n
NB_evals={} \n NB_iters={} \n'.format(x_return, f_return, h_return,
nb_evals, nb_iters))
    #retourne valeur d'entrée optimal
    return x_return
path = os.getcwd() + '/'
res = optimum(path)

```