UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

SOLUTION DU PROBLÈME INVERSE EN HYDROGÉOLOGIE À L'AIDE DE MÉTHODES GÉOSTATISTIQUES

Francis GAGNON

DÉPARTEMENT DES GÉNIES CIVIL, GÉOLOGIQUE ET DES MINES

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION

DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES (M. Sc. A.)

(GÉNIE MINÉRAL)

MAI 98

© Francis Gagnon, 1998.

National Library of Canada
Bibliothèque nationale du Canada

Acquisitions and Bibliographic Services
Acquisitions et services bibliographiques

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

Our file Notre référence

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

The author retains ownership of the copyright in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

0-612-37442-4

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

SOLUTION DU PROBLÈME INVERSE EN HYDROGÉOLOGIE À L'AIDE DE MÉTHODES GÉOSTATISTIQUES

présenté par: GAGNON Francis

En vue de l'obtention du diplôme de: Maîtrise ès sciences appliquées

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

M. SOULIÉ Michel, D.Sc.A., président

M. MARCOTTE Denis, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. CHAPUIS Robert P., D.Sc.A., membre

REMERCIEMENTS

Je tiens spécialement à remercier le professeur Denis Marcotte qui m'a dirigé tout au long de ces deux années et qui m'a fourni un soutien financier. Je voudrais aussi remercier le professeur Robert Chapuis et le technicien Antonio Gatien qui ont rendu possible les essais de perméabilité sur le terrain et au laboratoire.

RÉSUMÉ

Lorsque l'on simule des transmissivités, rien ne garantit que ces valeurs permettent de respecter les charges observées en différents piézomètres et ce aussi bien en régime permanent qu'en régime transitoire. En d'autres mots, la simulation géostatistique permet de bien reproduire les aspects statistiques des transmissivités mais non les aspects déterministes reliant transmissivités et charges hydrauliques (équation d'écoulement). La méthode décrite dans ce mémoire consiste à combiner les simulations géostatistiques, le simulateur d'écoulement en différences finies MODFLOW et l'algorithme du gradient conjugué pour ajuster de manière itérative les charges hydrauliques simulées aux charges observées en modifiant le champ de transmissivités initial en un petit nombre de points appelés points-pilotes et en redistribuant les perturbations aux autres points par krigeage. La méthode utilisée a permis d'obtenir des simulations conditionnelles aux conductivités et aux charges hydrauliques observées pour deux cas synthétiques et pour une étude de cas portant sur l'aquifère de Lachenaie.

Ces simulations montrent que le conditionnement aux charges hydrauliques permet de reproduire, en moyenne, les contrastes réels des conductivités hydrauliques et réduit l'incertitude sur les trajets de particules non-réactives. Le conditionnement a cependant peu d'effet sur l'incertitude des temps d'arrivées des particules. Sous l'hypothèse que les charges et les conductivités hydrauliques sont parfaitement connues, l'ensemble des

résultats obtenus tend à montrer l'utilité moindre d'effectuer de nombreux tests de conductivités hydrauliques par rapport à des mesures de charge. On s'attend à retrouver le même phénomène dans la majorité des applications considérant que la mesure des charges est généralement plus précise que la détermination des conductivités hydrauliques.

ABSTRACT

When transmissivities are simulated, it is not guaranteed that these values reproduce the head measurements either in steady or unsteady flow conditions when used in a numerical flow model. In other words, the geostatistic simulation allows to correctly reproduce the statistical aspects of transmissivity but not the deterministic aspects linking transmissivity and hydraulic head (flow equation). In this thesis, the described method consists in combining the geostatistic simulations, the MODFLOW program, (a flow simulator in finite differences) and the conjugated gradient algorithm to iteratively adjust the hydraulic heads by altering the initial transmissivity field at a small number of points called master points and by reditributing the perturbations to the other points by kriging. The method used allowed us to obtain simulations conditionned to conductivities and observed hydraulic heads for two synthetic cases and for a case study on Lachenaie aquifer. These simulations show that the conditioning of hydraulic heads allows to reproduce, in average, the contrasts of real hydraulic conductivities and reduces uncertainty on non-reactive particle trajectories. The conditioning, however, has a marginal effect on the uncertainty of particle arrival times. Considering that conductivities are more likey to be tainted with measurement or interpretation errors, the obtained results tend to show the less importance of numerous hydraulic conductivity tests in comparison to head measurements.

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS ..... **iv**

RÉSUMÉ ..... **v**

ABSTRACT ..... **vii**

TABLE DES MATIÈRES ..... **viii**

LISTE DES TABLEAUX ..... **xii**

LISTE DES FIGURES ..... **xiii**

LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES ..... **xix**

LISTE DES ANNEXES ..... **xxii**

CHAPITRE 1 - INTRODUCTION **1**

1.1 PROBLÉMATIQUE 1

1.2 OBJECTIFS DE L'ÉTUDE 2

1.3 PLAN DE TRAVAIL 3

CHAPITRE 2 - REVUE DE LA LITTÉRATURE 4

2.1 APERÇU HISTORIQUE 4

2.2 HYDROGÉOLOGIE 7

2.3 APPROCHE INVERSE 13

CHAPITRE 3 - THÉORIE 19

3.1 RAPPELS GÉOSTATISTIQUES 19

3.1.1 VARIOGRAMME 19

3.1.2 SYSTÈME DE KRIGEAGE ORDINAIRE 21

3.1.3 SYSTÈME DE KRIGEAGE DUAL 25

3.1.4 SIMULATION SÉQUENTIELLE GAUSSIENNE 26

3.2 HYDROGÉOLOGIE 27

3.2.1 CHARGE HYDRAULIQUE (H) 28

3.2.2 CONDUCTIVITÉ HYDRAULIQUE 29

3.2.3 LOI DE DARCY 30

3.2.4 ESSAIS DE CONDUCTIVITÉ HYDRAULIQUE IN SITU (LEFRANC) 31

3.2.5 LE SIMULATEUR D'ÉCOULEMENT MODFLOW 34

3.3 OPTIMISATION 35

3.3.1 NOTIONS DE BASE 36

3.3.2 DIRECTIONS CONJUGUÉES 38

3.3.3 ALGORITHME DU GRADIENT CONJUGUÉ 41

3.4 PROGRAMME D'INVERSION 43

CHAPITRE 4 - APPLICATIONS 46

4.1 AQUIFÈRES SYNTHÉTIQUES 46

4.2 DÉTERMINATION DU NOMBRE OPTIMAL DE POINTS-PILOTES 49

4.3 OPTIMISATION 52

4.3.1 ÉVOLUTION DES FONCTIONS OBJECTIVES 54

4.3.2 EFFET DU CONDITIONNEMENT SUR LE VARIOGRAMME ET LES STATISTIQUES 55

4.3.3 CHEMINEMENT DE PARTICULES 59

CHAPITRE 5 - ÉTUDE DE CAS **62**

5.1 DESCRIPTION DU SITE DE LACHENAIE 62

5.2 TRAVAUX EFFECTUÉS 64

5.3 INTERPRÉTATION DES ESSAIS 65

5.4 VARIOGRAMME ET STATISTIQUES 67

5.5 SIMULATIONS CONDITIONNELLES 69

5.6 CONDITIONS FRONTIÈRES 70

5.7 OPTIMISATION 73

5.7.1 ÉVOLUTION DES FONCTIONS OBJECTIVES 75

5.7.2 EFFET DU CONDITIONNEMENT SUR LE VARIOGRAMME ET LES STATISTIQUES 77

5.7.3 CHEMINEMENT DE PARTICULES 82

CHAPITRE 6 - CONCLUSIONS ET RECOMMANDATIONS **84**

CHAPITRE 7 - BIBLIOGRAPHIE **89**

ANNEXES **102**

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 4.1 : Statistiques des simulations 1 et 2 47

Tableau 4.2 : Fonction objective moyenne finale versus nombre de points-pilotes 50

Tableau 4.3 : Fonctions objectives moyennes initiales et finales 54

Tableau 4.4 : Statistiques sur les temps de parcours initiaux et finaux 60

Tableau 5.1 : Statistiques des logarithmes des conductivités hydrauliques 68

Tableau 5.2 : Moyennes des fonctions objectives initiales et finales - aquifère de Lachenaie 75

Tableau 5.3 : Statistiques sur les temps de parcours initiaux et finaux - aquifère de Lachenaie 82

Tableau C.1 : Caractéristiques des piézomètres 160

Tableau C.2 : Contribution des observations à la valeur de la fonction objective 162

LISTE DES FIGURES

Figure 3.1 : Exemple de variogramme 21

Figure 3.2 : Minimum relatif et absolu 37

Figure 3.3 : Fonction convexe et non convexe 38

Figure 3.4 : Comparaison entre gradient et gradient conjugué 43

Figure 3.5 : Algorithme du programme d'inversion 45

Figure 4.1 : Variogrammes des transmissivités synthétiques 47

Figure 4.2 : Histogramme des transmissivités synthétiques 48

Figure 4.3 : Conditions frontières 48

Figure 4.4 : Transmissivités et charges hydrauliques du cas synthétique 1 49

Figure 4.5 : Transmissivités et charges hydrauliques du cas synthétique 2 49

Figure 4.6 : Variations de la fonction objective en fonction du nombre d'itérations 52

Figure 4.7 : Scénarios d'échantillonnage des transmissivités et des charges hydrauliques 53

Figure 4.8 : Trajets et temps d'arrivée «réels» des particules 59

Figure 5.1 : Plan de localisation de la propriété de Lachenaie 63

Figure 5.2 : Variogramme de l'élévation du sommet de la couche d'argile 66

Figure 5.3 : Variogramme des logarithmes des conductivités hydrauliques 68

Figure 5.4 : Histogramme des logarithmes des conductivités hydrauliques 69

Figure 5.5 : Variogramme omnidirectionnel des charges hydrauliques 72

Figure 5.6 : Carte des charges hydrauliques krigées 73

Figure 5.7 : Scénarios d'échantillonnage de l'aquifère de Lachenaie 74

Figure 5.8 : Fonctions objectives finales en fonction des fonctions objectives initiales - aquifère de Lachenaie 75

Figure 5.9 : Enveloppes des variogrammes et moyennes des variogrammes initiaux et finaux - aquifère de Lachenaie 78

Figure 5.10 : Moyennes des logarithmes des conductivités hydrauliques finales en fonction des moyennes initiales et écarts-types finaux en fonction des écarts-types initiaux - aquifère de Lachenaie 79

Figure B.1 : Opimisation aquifère 1, 0T et 30h connues 134

Figure B.2 : Opimisation aquifère 2, 0T et 30h connues 135

Figure B.3 : Opimisation aquifère 1, 10T et 30h connues 136

Figure B.4 : Opimisation aquifère 2, 10T et 30h connues 137

Figure B.5 : Opimisation aquifère 1, 30T et 30h connues 138

Figure B.6 : Opimisation aquifère 2, 30T et 30h connues 139

Figure B.7 : Opimisation aquifère 1, 30T et 60h connues 140

Figure B.8 : Opimisation aquifère 2, 30T et 60h connues 141

Figure B.9 : Fonctions objectives finales versus fonctions objectives initiales 142

Figure B.10 : Enveloppes des variogrammes et moyennes des variogrammes expérimentaux initiaux et finaux pour l'aquifère synthétique 1 143

Figure B.11 : Enveloppes des variogrammes et moyennes des variogrammes expérimentaux initiaux et finaux pour l'aquifère synthétique 2 144

Figure B.12 : Moyennes et écarts-types finaux des log T en fonction des moyennes et écart-types initiaux pour l'aquifère synthétique 1 145

Figure B.13 : Moyennes et écarts-types finaux des log T en fonction des moyennes et écart-types initiaux pour l'aquifère synthétique 2 146

Figure B.14 : Images des écarts-types des transmissivités initiales et finales pour l'aquifère synthétique 1 147

Figure B.15 : Images des écarts-types des charges initiales et finales pour l'aquifère synthétique 1 148

Figure B.16 : Images des écarts-types des transmissivités initiales et finales pour l'aquifère synthétique 2 149

Figure B.17 : Images des écarts-types des charges initiales et finales pour l'aquifère synthétique 2 150

Figure B.18 : Images des moyennes des transmissivités initiales et finales pour l'aquifère synthétique 1 151

Figure B.19 : Images des moyennes des charges initiales et finales pour l'aquifère synthétique 1 152

Figure B.20 : Images des moyennes des transmissivités initiales et finales pour l'aquifère synthétique 2 153

Figure B.21 : Images des moyennes des charges initiales et finales pour l'aquifère synthétique 2 154

Figure B.22 : Trajets initiaux et finaux des particules dans l'aquifère synthétique 1 ... 155

Figure B.23 : Histogrammes des temps d'arrivée initiaux et finaux des particules dans l'aquifère synthétique 1 156

Figure B.24 : Trajets initiaux et finaux des particules dans l'aquifère synthétique 2 157

Figure B.25 : Histogrammes de temps d'arrivée initiaux et finaux des particules dans l'aquifère synthétique 2 158

Figure C.1 : Optimisation, Lachenaie, scénario 1 163

Figure C.2 : Optimisation, Lachenaie, scénario 2 164

Figure C.3 : Images des écarts-types des conductivités hydrauliques initiales et finales - aquifère de Lachenaie 165

Figure C.4 : Images des écarts-types des charges hydrauliques initiales et finales - aquifère de Lachenaie 166

Figure C.5 : Images des moyennes des conductivités hydrauliques initiales et finales - aquifère de Lachenaie 167

Figure C.6 : Images des moyennes des charges hydrauliques initiales et finales - aquifère de Lachenaie 168

Figure C.7 : Trajets initiaux et finaux des particules - aquifère de Lachenaie 169

Figure C.8 : Histogrammes des temps de parcours initiaux et finaux des particules - aquifère de Lachenaie 168

LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES

A : Section d'un conduit (m^2)

b : Épaisseur de l'aquifère ou épaisseur saturée de l'aquifère (m)

c: Facteur de forme (m)

Cov : Covariance

D(h) : Ensemble des paires dont les points sont espacés de la distance h

E^n: Espace à n dimensions

g : Accélération gravitationnelle (m/s^2)

h Distance entre deux points, ou charge hydraulique (m)

i Gradient hydraulique (m/m)

k : Matrice (nx1) des covariances entre les points observés et le point à estimer, ou perméabilité intrinsèque d'un matériau

K : Matrice (nx1) des covariances entre les observations, ou conductivité hydraulique (m/s ou cm/s)

n_e : Porosité efficace (m^3/m^3)

N(h) : Nombre de paires dont les points sont espacés de la distance h.

$N(Z^*_{ks},\sigma^2_{ks})$: Distribution normale de moyenne Z^*_{ks} et de variance σ^2_{ks}

P : Pression du fluide (kPa)

Q : Débit spécifique, ou terme relié aux puits/sources (m^3/s)

S : Coefficient d'emmagasinement

t : Temps (s)

T : Transmissivité (m^2/s)

v : Vitesse (m/s)

v_D : Vitesse de Darcy (m/s)

Var : Variance

y :	Logarithme naturel des transmissivités
$Z(x)$:	Fonction aléatoire
Z :	Élévation (m)
$Z^*(x)$:	Valeur de Z estimées au point x
λ_i :	Poids assigné à la valeur observées au point i
λ :	Vecteur (nx1) des poids du krigeage
γ :	Fonction du variogramme
μ :	Opérateur de Lagrange
μ_w:	Viscosité dynamique de l'eau (kg/(m*s))
ρ_w:	Masse volumique de l'eau (kg/m^3)

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE A - PROGRAMME D'INVERSION 102

Description du programme 103

Problématique 103

Objectifs 103

Méthodologie 103

Programme NLIN - description 104

1. Déclaration des variables 105

1.1 Variables globales 105

1.2 Variables locales 117

2. Lecture du fichier de paramètres NLIN.PAR 119

3. Préparation de l'optimisation 120

3.1 Lecture des fichiers de données 121

3.2 Définition des variables de l'optimisation 122

3.3 Définition des variables de MODFLOW 122

4. Optimisation et sauvegarde des résultats 124

5. Description des sous-routines 126

Sous routine MAT_K 126

Sous-routine GAUSSJ 126

Sous-routine ECOUL 127

Sous-routine OBJECT 127

Sous-routine KRIGE 128

Sous-routine ECOUL2 129

Sous-routine GRADIENT 129

Sous-routine EVALOBJ 131

ANNEXE B - APPLICATIONS 133

ANNEXE C - ÉTUDE DE CAS 159

CHAPITRE 1

INTRODUCTION

1.1 PROBLÉMATIQUE

L'eau est une ressource vitale pour l'homme et la majorité des réserves mondiales d'eau douce se retrouve sous terre, dans le sol ou le roc. La nécessité de caractériser le mieux possible les eaux souterraines est apparue avec l'accroissement des besoins en eau et les problèmes de contamination qui ont découlé du développement industriel du XXième siècle.

La modélisation de l'écoulement des eaux souterraines est un domaine essentiel de l'hydrogéologie dans lequel il s'effectue beaucoup de recherches actuellement. Les paramètres importants qui définissent les caractéristiques d'un aquifère sont généralement connus à seulement quelques points répartis sur l'ensemble du domaine d'étude et sont aussi sujets à des imprécisions. On cherche donc à estimer ces paramètres sur l'ensemble du domaine à partir d'une information partielle, et ce dans le but de déterminer le plus précisément possible les caractéristiques de l'écoulement souterrain.

Dans le cadre de cette étude, il est plus particulièrement question de la relation entre les charges hydrauliques et les transmissivités dans un écoulement souterrain que ce soit en régime permanent ou en régime transitoire.

La géostatistique est *"l'étude des phénomènes qui fluctuent dans l'espace et/ou le temps"* (Deutsch et Journel, 1992, p. 9). La base de la géostatistique repose sur la théorie des variables régionalisées, qui s'applique particulièrement bien aux phénomènes naturels tels que les écoulements souterrains.

En combinant la géostatistique et les simulations stochastiques, il est possible de reproduire l'arrangement spatial d'une variable régionalisée comme la transmissivité ou la conductivité hydraulique tout en respectant les valeurs connues à certains points. Cependant, si l'on soumet le champ de transmissivités obtenues à un simulateur d'écoulement, rien ne nous assure de reproduire les charges hydrauliques connues sur le domaine étudié.

1.2 OBJECTIFS DE L'ÉTUDE

L'objectif de cette étude est d'appliquer sur un cas réel une méthode de simulation des champs de transmissivités ou conductivités hydrauliques qui permette de respecter les charges hydrauliques observées et de conserver les paramètres statistiques et géostatistiques désirés. La méthodologie utilisée a été décrite par de Marsily et al. (1984)

et Gomez-Hernandez et al. (1996). Pour ce faire, un programme FORTRAN faisant appel au simulateur d'écoulement MODFLOW et à un programme d'optimisation basé sur la méthode itérative du gradient conjugué est développé. Des champs simulés et une étude de cas réel permettent de valider la méthodologie et les programmes utilisés.

1.3 PLAN DE TRAVAIL

Le chapitre 2 présente une revue de la littérature concernant les applications de la géostatistique à l'hydrogéologie. Le chapitre 3 présente l'ensemble des considérations théoriques dans les domaines de la géostatistique, l'hydrogéologie et les méthodes d'optimisation qui sont nécessaires à la bonne compréhension de cette étude. Le chapitre 4 présente l'étude de deux aquifères synthétiques qui ont servi de «réalité» pour l'optimisation de 600 simulations à l'aide de la routine d'inversion. Le chapitre 5 présente les résultats d'une étude de cas provenant de l'aquifère de Lachenaie. Finalement, le chapitre 6 présente les conclusions et les recommandations de la recherche.

CHAPITRE 2

REVUE DE LA LITTÉRATURE

Ce chapitre en trois partie présente une revue de la littérature concernant la géostatistique. La première partie présente un bref aperçu historique du développement théorique et des applications de la géostatistique. La deuxième partie présente les principaux travaux appliquant la géostatistique au domaine de l'hydrogéologie. Finalement, la troisième partie se concentre particulièrement sur les travaux concernant la méthode inverse en hydrogéologie.

2.1 APERÇU HISTORIQUE

On peut situer la naissance de la géostatistique dans les années 50-60 alors que Krige applique certains des concepts de la géostatistique à l'estimation des teneurs en or dans les mines sud-africaines. Il constate alors que les méthodes d'estimation traditionnelles ne fournissent pas de précision sur les estimés. De plus, il définit les relations taille-variance reliant les estimés sur les blocs, c'est-à-dire que plus les blocs sont gros, moins les estimés des teneurs de blocs sont variables.

G. Matheron (1962) de l'École des Mines de Paris est le premier à utiliser extensivement le terme géostatistique. Il en donne la définition suivante:

La géostatistique est l'application du formalisme des fonctions aléatoires à la reconnaissance et l'estimation des phénomènes naturels.

Dans ses travaux , Matheron (1965, 1971) développe des outils opérationnels faisant la jonction entre la théorie et les problèmes pratiques. Le concept de base est la théorie des variables régionalisées qui découle du fait que des observations sont généralement d'autant plus corrélées qu'elles sont proches les unes des autres. Les deux principaux outils de la géostatistique sont le variogramme qui décrit la corrélation spatiale entre les observations et le krigeage, un estimateur linéaire sans biais et à variance minimale.

Les premières applications de la géostatistique s'effectuent dans le domaine minier. Par exemple, Sinclair et al. (1978 et 1980) réalisent l'étude géostatistique d'un gisement d'amiante du nord de la Colombie Britannique et des gisements de cuivre du Yukon. Wellmer et Giroux (1980) utilisent le krigeage pour estimer les teneurs et les tonnages d'un gisement de plomb-zinc sur l'île de Baffin. Guarascio (1975) présente les améliorations obtenues sur les estimés des teneurs en uranium en réalisant un cokrigeage avec les données plus nombreuses de radiométrie.

Au cours des années 70 et 80, de multiples outils géostatistiques ont été développés pour répondre à divers besoins, l'outil le plus important pour cette recherche étant les simulations conditionnelles.

Les simulations conditionnelles permettent de reproduire les caractéristiques statistiques et géostatistiques d'une variable tout en respectant les observations. Matheron (1973) a effectué le développement théorique des simulations conditionnelles et a proposé la méthode des bandes tournantes. D'autres méthodes de simulations ont été développées subséquemment, notamment la méthode fréquentielle (Borgman et al., 1984), la méthode de décomposition LU (Davis, 1987), l'algorithme séquentiel Gaussien (aujourd'hui peut-être la méthode la plus répandue, dont on doit le principe à Lévy (1937)) et le recuit simulé (simulated annealing) qui est en fait une méthode d'optimisation (Kirkpatrick et al., 1983).

Les années 80 et 90 marquent la diversification des applications de la géostatistique. Hormis l'hydrogéologie, nous pouvons mentionner entre autres des publications en géotechnique (Soulié, 1984, Montès, 1985), en géophysique (Easley et al., 1990 et Shive et al., 1990), en agriculture (Samra et al., 1990), en océanographie (Gohin, 1988), dans le domaine pétrolier (Haas et Dubrule, 1994), en climatologie (Litchy et Karlinger, 1990), en génie mécanique (Echaabi et al., 1995), en télédétection (Jupp et al. 1988 et 1989), etc...

Rappelons finalement que la géostatistique a été introduite en Amérique du Nord par l'École Polytechnique vers la fin des années 60 par Roger Blais, puis Michel David. Au

milieu des années 70, Polytechnique était reconnue comme l'un des plus grands centres de recherche dans ce domaine.

2.2 HYDROGÉOLOGIE

L'hydrogéologie est la science qui étudie la distribution, le mouvement, la qualité et la nature des matériaux qui contiennent les eaux souterraines. Puisque la plus grande partie des ressources planétaires en eau potable provient du sous-sol, la compréhension des processus hydrogéologiques est d'une importance capitale pour le développement et la protection de cette richesse.

Une multitude de paramètres doivent être étudiés par l'hydrogéologue pour caractériser les nappes d'eau souterraines. À cette fin, un grand nombre de données doivent être recueillies, les plus importantes étant les charges hydrauliques, les conductivités hydrauliques, et la nature, la porosité et la granulométrie des matériaux.

Trois raisons principales sont à l'origine du développement des méthodes géostatistiques dans le domaine de l'hydrogéologie.

1° Les méthodes déterministes d'estimation des paramètres, qui demandaient de poser plusieurs hypothèses de simplification, donnaient souvent des résultats éloignés de la réalité. On a alors réalisé que les caractéristiques des aquifères sont extrêmement

variables dans l'espace et que souvent le support d'échantillonnage est minuscule comparé à la taille des zones étudiées. Il est donc difficile de relier des paramètres ponctuels aux caractéristiques à grande échelle.

2° Les campagnes de cueillette de données sur le terrain sont de première importance pour caractériser un aquifère. Elles représentent à elles seules la plus grande partie des dépenses d'une étude hydrogéologique. Cependant, il est très rare d'avoir les ressources financières nécessaires pour effectuer une cueillette de données à grande échelle pour une étude donnée. Il est donc primordial de maximiser la quantité d'information que l'on peut soutirer des données.

3° Les mesures prises sur le terrain sont entachées d'une erreur et les estimés des paramètres hydrogéologiques qui en découlent le sont aussi. Il est donc important de pouvoir quantifier la précision sur les estimés de manière à juger de leur pertinence.

L'introduction de la géostatistique aux problèmes hydrogéologiques remonte aux années 70 avec les publications de Delfiner et Delhomme (1973), Delhomme (1978), Gambolati et Volpi (1979, a et b) et Villeneuve et al. (1979). Leurs travaux consistaient principalement à cartographier les variables «charge hydraulique» et «transmissivité» (sans tenir compte de l'équation de Poisson qui les relie). Ils mentionnent tous l'avantage

de fournir une précision sur les estimés qu'offre le krigeage par rapport aux méthodes déterministes.

Delhomme (1979) a utilisé les simulations conditionnelles pour générer des champs de transmissivités qu'il a ensuite soumis à un simulateur d'écoulement. Il a noté la grande variabilité des champs de charges hydrauliques générés et cela même si l'on a un grand nombre de données conditionnantes.

Mizell et al.(1982) ont comparé la corrélation spatiale entre les transmissivités et les charges hydrauliques pour un cas à 2 dimensions. Ils ont constaté que les variogrammes des charges hydrauliques étaient anisotropes avec une plus grande portée perpendiculairement au sens de l'écoulement même si les variogrammes des transmissivités étaient isotropes. De plus, ils ont constaté que les portées des variogrammes des charges hydrauliques étaient beaucoup plus longues que celles des transmissivités, ce qui confirme l'effet de lissage de l'équation d'écoulement.

Rouhani (1985) a présenté un algorithme itératif permettant de déterminer le nombre et l'emplacement optimal des échantillons supplémentaires en fonction de la réduction de la variance sur les estimés et du gain économique engendré par l'ajout d'information hydrogéologique. La méthode est basée sur le fait que la variance d'estimation ne dépend que de la fonction de covariance et de l'arrangement spatial de l'échantillonnage. Cet

algorithme est supérieur au choix basé sur le carré des distances maximales entre les échantillons.

Ahmed et DeMarsily (1987) et Hughson et al. (1996) ont comparé différentes méthodes d'estimation de la transmissivité à partir de mesures de capacités spécifiques et de transmissivités. Le cokrigeage semble la méthode d'estimation la plus efficace lorsque le nombre de paires de mesures est suffisant (plus grand que 50 selon Hughson et al.) pour estimer correctement les variogrammes et le variogramme croisé. Lorsque le nombre de paires de mesures est insuffisant, le krigeage avec régression linéaire fournit des estimés aussi précis sans nécessiter autant de calculs que le cokrigeage.

Desbarats (1987) a étudié la connectivité des canaux de forte conductivité hydraulique. Ces canaux sont typiques des séquences grès-shale qui peuvent montrer des contrastes de conductivités hydrauliques de plusieurs ordres de grandeur. Pour simuler une telle séquence, il a utilisé une simulation d'indicatrices qui permettait de coder chaque noeud de la maille en fonction du type de roche. Chaque noeud recevait ensuite une valeur de conductivité hydraulique constante en fonction du type de roche. On utilisait ensuite une forme modifiée de cheminement de particules (particle tracking) pour étudier les temps d'arrivée. Les principales conclusions de cette étude sont que les modèles de transport de contaminants classiques ne s'appliquent pas pour ce cas et que les temps d'arrivées des particules montrent une distribution bimodale correspondant à deux groupes de

particules distincts. Le premier groupe a voyagé dans les canaux formés par les grès et montre des temps d'arrivées très similaires. Le deuxième groupe a voyagé dans des chemins tortueux au travers grès et shales et montre une grande dispersion des temps d'arrivée.

Dans une étude similaire, Silliman et Wright (1988), ont montré que lorsque les conductivités hydrauliques sont corrélées spatialement il existe au moins un canal de forte conductivité dont la moyenne est supérieure à la perméabilité moyenne du bloc étudié, ce qui a une grande implication sur les temps de migration des contaminants.

Schafmeister-Spierling et Burger (1989) ont étudié la variation des paramètres hydrogéologiques à l'aide de simulations non-conditionnelles sur les conductivités hydrauliques. L'étude a consisté à soumettre trois séries de simulations non-conditionnelles de conductivités hydrauliques de portées différentes (1380, 460 et 50 mètres respectivement) à un simulateur d'écoulement en différences finies, à étudier les variations locales des charges hydrauliques, vitesses et direction d'écoulement et dispersion longitudinale d'un contaminant et à comparer les résultats avec ceux d'un aquifère dont les conductivités hydrauliques sont constantes. Ils ont montré qu'en général la différence entre les charges hydrauliques augmente avec la portée du variogramme. Les directions locales d'écoulement ont montré une variation de plus de

40° par rapport au cas uniforme. De plus, l'incertitude sur le transport de contaminant augmente avec la portée du variogramme.

Rubin et Gomez-Hernandez (1990) ont étudié le problème des changements d'échelle de la conductivité hydraulique. Plutôt que d'utiliser simplement une moyenne géométrique pour exprimer la conductivité hydraulique effective, ils ont développé le concept de conductivité hydraulique de bloc dont la valeur dépend de la taille du bloc considéré, du variogramme des conductivités hydrauliques et du variogramme croisé conductivité hydraulique-charge hydraulique. Cette approche permet de conditionner les conductivités hydrauliques de blocs aux conductivités mesurées (sur un support plus petit) et aux charges hydrauliques. La conductivité moyenne des blocs est proportionnelle à la taille. L'effet conditionnant des charges est faible par rapport à celui des conductivités. Des simulations non-conditionnelles ont montré que cette approche permet de bien prédire les perméabilités de blocs et les variances de blocs tant que les variances restent faibles ou que la taille des blocs est grande.

Samper et al. (1992) ont développé un algorithme itératif de covalidation croisée basé sur la minimisation d'une fonction objective qui dépend des fonctions d'auto-covariances et de la fonction de covariances croisées. La fonction de covariances croisées est exprimée comme une combinaison linéaire des fonctions d'auto-covariances. La

covalidation croisée est réalisée à l'aide d'un voisinage global pour réduire le temps de calcul.

Rautman et Istok (1996) ont décrit une application des simulations conditionnelles aux problèmes de contamination des eaux souterraines. Les simulations permettent d'établir la distribution possible des contaminants, d'établir les frontières séparant les zones contaminées des zones non contaminées et d'estimer la distribution de la masse totale des contaminants. Les simulations permettent aussi de reproduire les fluctuations des paramètres géostatistiques.

2.3 APPROCHE INVERSE

Les simulateurs d'écoulement sont de puissants outils pour étudier les écoulements souterrains. Depuis quelques années, avec la sensibilisation aux problèmes environnementaux et le renforcement des exigences gouvernementales dans ce domaine, la modélisation numérique est devenue un domaine de recherche important auprès de la communauté scientifique.

La modélisation numérique consiste généralement à soumettre un champ de transmissivités à un simulateur d'écoulement et d'étudier le champ de charges hydrauliques résultant. Il s'agit de la méthode directe. Cependant rien ne garantit que les charges hydrauliques résultantes respecteront les observations en tout point. À l'opposé,

la méthode inverse cherche à estimer les transmissivités à partir d'un champ de charges hydrauliques. Cependant, les équations d'écoulement ne permettent pas de trouver de solution unique à ce problème. Une multitude d'approches stochastiques et déterministes ont été développées pour résoudre ce problème. Les approches déterministes sont généralement basées sur une zonation des paramètres hydrogéologiques et sur un ajustement subséquent par essai-erreur. Les résultats dépendent donc beaucoup de l'habileté du modélisateur. Gelhar (1993) présente une revue des principales approches déterministes existantes. Cette section présente les approches stochastiques au problème inverse tout en se concentrant particulièrement sur les méthodes qui ont inspiré la présente.

Mizell (1980), Mizell et al. (1982), Yeh et al. (1983), Kitanidis et Vomvoris (1983), Dagan (1985), Hoeksema et Kitanidis (1984, 1985) et Clifton et Neuman (1982) ont présenté des méthodes de résolution directe du problème inverse à un cas 2D en écoulement permanent ayant plusieurs points en commun. Les équations d'écoulement sont d'abord linéarisées, une approximation qui est valable pour des champs à faibles variances. Les fonctions d'auto-covariances et de covariances croisées reliant charges hydrauliques et transmissivités sont estimées à l'aide des observations, soit par moindre carré ou par maximum de vraisemblance (maximum likelihood). Les transmissivités et les charges hydrauliques sont estimées par cokrigeage. Dagan et Rubin (1988) ont

étendu la méthode aux écoulements transitoires. Carrera et al. (1992) y ont ajouté le transport des contaminants.

De Marsily et al. (1984) ont présenté une approche itérative faisant appel au krigeage combiné avec un simulateur d'écoulement en différences finies et un algorithme d'optimisation. L'optimisation des transmissivités se déroule en sept étapes. D'abord, un nombre limité de points-pilotes est déterminé sur une grille pseudo-régulière sur le domaine étudié. L'optimisation n'a lieu que sur ces points-pilotes. Ensuite, les transmissivités initiales sont estimées par krigeage sur l'ensemble de la grille. Puis, le champ de transmissivités est soumis au simulateur d'écoulement pour obtenir les charges hydrauliques résultantes. La fonction objective (la somme des carrés des différences entre les charges observées et les charges obtenues par le simulateur d'écoulement) est estimée. Si la fonction objective est plus petite que le critère de convergence, les charges hydrauliques krigées sont conformes aux charges observées et le programme est arrêté. Sinon, on détermine le gradient de la fonction objective et l'on recherche le minimum dans cette direction. À chaque itération, on effectue un krigeage sur l'ensemble des points de la grille en utilisant les valeurs observées et les points-pilotes. L'optimisation est arrêtée lorsque l'on atteint le critère de convergence ou lorsque la fonction objective atteint un minimum.

Keidser et al. (1990) et Keidser et Rosbjerg (1991) ont proposé une méthode inverse combinant l'approche zonale et le krigeage. Les estimés initiaux sont produits par krigeage. Ensuite, la grille des estimés est divisée en sous-régions. Dans chaque sous-région, un facteur de correction proportionnel à la variance d'estimation est appliqué à chaque noeud. L'optimisation est réalisée sur les facteurs de correction plutôt que directement sur les estimés. Ils ont ensuite comparé cette nouvelle approche à celles de de Marsily et al. (1984) , Kitanidis et Vomvoris (1983) et à la méthode zonale (Cooley, 1977).

Marsh La Venue et Pickens (1992) ont proposé une approche similaire à celle développée par de Marsily et al. (1984) dont la principale innovation se situe au niveau de la détermination du nombre et de la localisation des points-pilotes servant à l'optimisation du champ de transmissivités. Au départ, les régions où une modification des transmissivités krigées ou des conditions frontières vont améliorer grandement l'ajustement aux charges observées sont déterminées par une technique de sensibilité adjointe. Aux endroits identifiés, des points-pilotes dont les transmissivités sont optimisées sont ajoutés aux observations qui servent au krigeage. La méthode permet d'ajouter un nombre minimal de points-pilotes aux observations et de respecter les charges hydrauliques connues.

Yeh et al. (1995) ont présenté une approche itérative combinant le cokrigeage classique entre les transmissivités et les charges hydrauliques et un simulateur d'écoulement de type différences finies. La méthode proposée se déroule en quatre étapes. D'abord, on effectue un cokrigeage sur les transmissivités et les charges hydrauliques mesurées. On obtient un champ de transmissivités et un champ de charges hydrauliques. Ensuite, les transmissivités sont soumises au simulateur d'écoulement en donnant les charges hydrauliques initiales comme solution de départ. Les charges hydrauliques mesurées sont traitées comme des charges constantes. Un nouveau cokrigeage est effectué en utilisant maintenant les transmissivités mesurées et l'ensemble du champ de charges hydrauliques résultantes de l'étape précédente. Finalement, le champ de transmissivités obtenu est soumis de nouveau au simulateur d'écoulement. La procédure est répétée jusqu'à l'obtention du critère d'arrêt.

Gomez-Hernandez et al. (1996) et Wen et al. (1996) ont adapté l'approche de de Marsily et al. (1984) pour produire des simulations conditionnelles aux transmissivités et aux charges observées. Au départ, une simulation conditionnelle aux transmissivités observées est soumise à un simulateur d'écoulement en différences finies pour obtenir le champ initial de charges hydrauliques. La fonction objective initiale représentant le carré des différences entre les charges initiales et les charges observées est calculée. Si cette fonction objective ne respecte pas le critère de convergence, un champ de perturbation est ajouté aux transmissivités simulées de manière à ce que les charges observées soient

reproduites. La perturbation s'effectue aux points-pilotes et est ensuite redistribuée à l'ensemble de la grille par krigeage. Le champ de perturbations optimal est déterminé de manière itérative à l'aide de l'algorithme du gradient.

L'algorithme présenté dans les publications de de Marsily et al. (1984), Gomez-Hernandez et al. (1996) et Wen et al. (1996) a été adopté dans cette étude pour solutionner le problème inverse. Il a été adapté au simulateur d'écoulement MODFLOW et il utilise la méthode des gradients conjugués pour l'optimisation des perturbations aux points-pilotes.

On voit l'évolution qu'a suivie la recherche géostatistique dans le domaine de l'hydrogéologie. Au début, on n'était préoccupé que de fournir des cartes des principaux paramètres (par krigeage et cokrigeage) sans égard réel à la physique du problème. Par la suite, avec l'utilisation des simulateurs d'écoulement, on a cherché à produire des cartes des paramètres charge et transmissivité qui soient physiquement cohérents. Les efforts récents visent maintenant à déterminer par simulation une multitude de solutions possibles ayant les bonnes caractéristiques statistiques et respectant la physique du phénomène. Cet ensemble de réalisations possibles permet de déterminer l'incertitude concernant le phénomène, de définir les zones névralgiques et les données requises pour mieux connaître le phénomène. Notre étude s'inscrit en continuité avec ces efforts récents.

CHAPITRE 3

THÉORIE

Le présent chapitre est divisé en quatre parties. La première présente un rappel des notions de géostatistique utilisées dans cette étude. La deuxième partie présente quelques notions de base de l'hydrogéologie et particulièrement des essais de perméabilité de même que le simulateur d'écoulement MODFLOW. La troisième partie présente les notions de programmation non-linéaire nécessaires à la compréhension du fonctionnement du programme d'optimisation en se concentrant surtout sur l'algorithme du gradient conjugué. Finalement, la quatrième partie présente le programme développé pour la réalisation de ce travail de recherche.

3.1 RAPPELS GÉOSTATISTIQUES

3.1.1 VARIOGRAMME

L'outil de base de la géostatistique est le variogramme. L'idée fondamentale du variogramme est que la variance de la différence entre deux observations situées dans un champ donné ne dépend que de la distance entre ces deux observations et de l'orientation dans l'espace, mais pas de la position de la paire d'observations dans le champ.

On définit le variogramme expérimental comme suit:

$$\gamma_e = \frac{1}{2N(h)} \sum_{(i,j)\in D(h)} [Z(x_i) - Z(x_j)]^2 \qquad 3.1$$

où N(h) : Nombre de paires dont les points sont espacés de la distance h.

D(h) : Ensemble des paires dont les points sont espacés de la distance h.

Le variogramme théorique se définit comme suit:

$$\gamma(|h|) = 0.5 \text{ Var } [Z(x) - Z(x+h)] \qquad 3.2$$

où x : Vecteur de coordonnées

h : Vecteur de déplacement

Les variogrammes expérimentaux peuvent être ajustés par différents modèles théoriques dont les plus communs sont les modèles sphériques, exponentiels et gaussiens. Journel et Huijbregts (1978, pp.164-165) fournissent une description complète des modèles de variogrammes.

La figure 3.1 présente un variogramme typique. Il s'agit d'un modèle sphérique ayant un effet de pépite (C_0) de 0.5, qui correspond à la variation à très courte échelle, l'erreur d'analyse et la précision analytique; un plateau de 2 (C_0 + C), qui correspond à la

variance de la variable aléatoire et une portée de 50 (a), qui correspond à la distance ou la covariance entre les paires d'observations devient nulle.

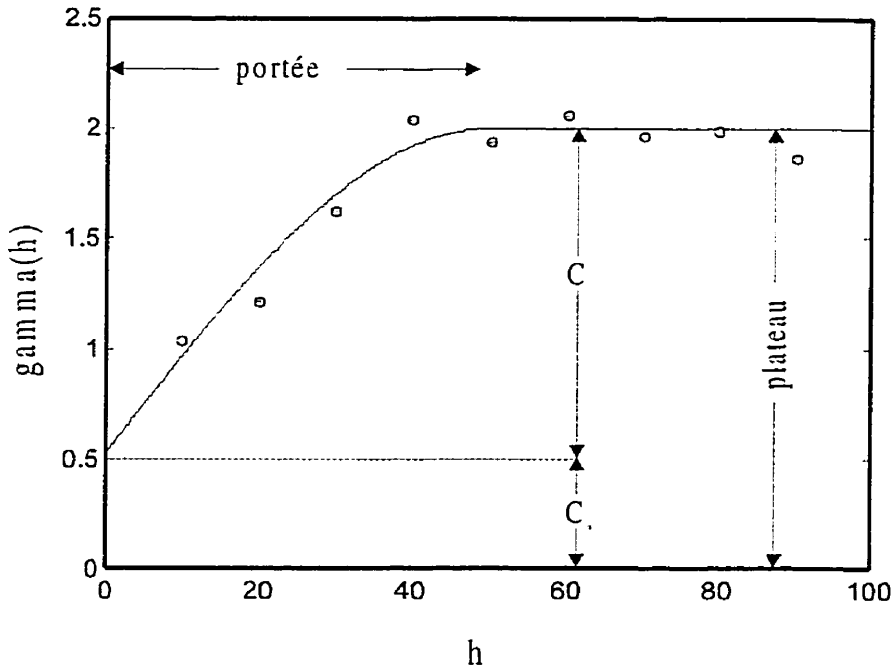


Figure 3.1 : Exemple de variogramme

3.1.2 SYSTÈME DE KRIGEAGE ORDINAIRE

Le krigeage est une méthode d'estimation utilisant une combinaison linéaire des observations situées dans le voisinage du point à estimer. Le krigeage a l'avantage d'offrir la variance d'estimation minimale. L'estimateur linéaire se définit comme suit:

$$Z^* = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i Z_i \qquad 3.3$$

où Z^* : Estimé

Z_i : Variables aléatoires correspondant aux points échantillons

λ_i : Poids associés aux points échantillons

On veut minimiser la variance d'estimation de l'estimateur linéaire, qui se définit comme suit:

$$\sigma_e^2 = \mathrm{Var}[Z - Z^*] = \mathrm{Var}[Z] + \mathrm{Var}[Z^*] - 2\,\mathrm{Cov}[Z, Z^*] \qquad 3.4$$

où Z : Variable aléatoire au point à estimer

Substituant l'équation 3.3 dans 3.4, on obtient:

$$\sigma_e^2 = \mathrm{Var}[Z] + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \lambda_i\lambda_j\,\mathrm{Cov}[Z_i, Z_j] - 2\sum_{i=1}^{n} \lambda_i\,\mathrm{Cov}[Z, Z_i] \qquad 3.5$$

Pour que l'estimateur soit sans biais, il faut que:

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i = 1 \qquad 3.6$$

On solutionne cette fonction quadratique sous contrainte par la méthode de Lagrange. On forme le lagrangien:

$$L(\lambda) = Var[Z_v] + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \lambda_i\lambda_j Cov[Z_i, Z_j] - 2\sum_{i=1}^{n} \lambda_i Cov[Z, Z_i] - 2\mu\left(\sum_{i=1}^{n} \lambda_i - 1\right) \qquad 3.7$$

où μ : Multiplicateur de Lagrange.

Le minimum est atteint lorsque l'ensemble des dérivées partielles par rapport aux λ_i et à μ sont égales à zéro. Ceci permet d'obtenir le système de krigeage ordinaire:

$$\sum_{j=1}^{n} \lambda_j \; Cov[Z_i, Z_j] + \mu = Cov[Z, Z_i] \quad \forall\, i = 1 \ldots n \qquad 3.8$$

et $\sum_{i=1}^{n} \lambda_i = 1$

Sous forme matricielle, le krigeage ordinaire prend la forme suivante:

$$\begin{bmatrix} K & 1 \\ 1' & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k \\ 1 \end{bmatrix} \qquad 3.9$$

où K : Matrice des (nxn) covariances entre les observations

1 : Vecteur colonne de taille n

λ : Vecteur des poids du krigeage

k : Vecteur des (n) covariances entre les observations et le point à estimer

La solution du système de krigeage ordinaire est généralement exprimée sous la forme simplifiée suivante :

$$K\lambda = k \qquad 3.10$$

$$\lambda = K^{-1}k \qquad 3.11$$

La variance d'estimation minimale appelée variance de krigeage est obtenue en remplaçant les équations du krigeage dans l'équation de la variance d'estimation (3.5).

$$\sigma_k^2 = Var[Z] - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i Cov[Z, Z_i] - \mu \qquad 3.12$$

ou, sous forme matricielle :

$$\sigma_k^2 = Var(Z) - \lambda' k \qquad 3.13$$

En général, le krigeage présente un effet écran. Les observations qui sont situées près du point à estimer reçoivent des poids plus importants. Dans le cas d'un grand nombre de points à estimer et d'un grand nombre d'observations, il est plus avantageux de travailler en voisinage glissant, ne retenant que les observations situées dans un rayon de recherche défini et limitant le nombre d'observations par quadrant. La taille de la matrice K à inverser est diminuée et la vitesse d'exécution augmente.

3.1.3 SYSTÈME DE KRIGEAGE DUAL

Lorsque le nombre d'observations est plus limité et que la connaissance de la variance d'estimation n'est pas nécessaire, il peut être avantageux en temps de calcul de faire un krigeage global en utilisant une modification du système de krigeage pour obtenir le système de krigeage dual.

Soit l'estimateur obtenu par krigeage :

$$Z_0^* = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i Z_i \qquad 3.14$$

On peut réécrire l'estimateur différemment en complétant Z_i par un 0 et λ_i par μ, le multiplicateur de Lagrange de telle sorte que :

$$Z_0^* = \lambda' Z \quad \text{où} \quad \lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \\ \mu \end{bmatrix} \quad Z = \begin{bmatrix} Z_1 \\ Z_2 \\ \vdots \\ Z_n \\ 0 \end{bmatrix} \qquad 3.15$$
$$= Z' \lambda$$

En remplaçant la valeur de λ obtenue à l'équation 3.15 on obtient :

$$Z_0^* = Z'K^{-1}k = b'k \qquad \text{avec } b' = Z'K^{-1} \qquad 3.16$$

Le système de krigeage dual permet de réduire le nombre d'opérations nécessaires pour estimer un point d'un ordre n^2 à un ordre n, où n représente le nombre d'observations utilisées dans le système de krigeage. De plus, l'estimation obtenue par krigeage dual apparaît comme une forme analytique comprenant un terme de dérive (b_{n+1}) et un terme stochastique $\sum_{i=1}^{n} b_i k(|x_0 - x_i|)$.

3.1.4 SIMULATION SÉQUENTIELLE GAUSSIENNE

Le but des simulations conditionnelles est de fournir différentes réalisations équiprobables du phénomène étudié ayant le même variogramme, le même histogramme, respectant les valeurs observées et n'ayant pas d'effet de lissage (contrairement au krigeage). Pour le lecteur désirant approfondir le sujet, Deutsch et Journel (1992) présentent une revue des différents algorithmes de simulation.

Dans le cadre de cette étude, l'algorithme séquentiel Gaussien a été utilisé pour générer des réalisations de champs de transmissivités qui sont conditionnelles ou non à des transmissivités observées.

Les principales étapes de l'algorithme sont les suivantes:

1. Choisir un point au hasard et retenir les points à l'intérieur du voisinage qui servent de données conditionnantes (points observations et points simulés).

2. Faire un krigeage simple à voisinage glissant avec les points retenus. L'estimé obtenu (Z^*_{ks}) et la variance de krigeage correspondante (σ^2_{ks}) définissent une loi normale $N(Z^*_{ks}, \sigma^2_{ks})$

3. Tirer une valeur dans $N(Z^*_{ks}, \sigma^2_{ks})$ que l'on ajoute à l'ensemble des valeurs conditionnantes.

4. Passer à un autre point

3.2 HYDROGÉOLOGIE

L'hydrogéologie est la science qui étudie la distribution, le mouvement et la qualité des eaux souterraines de même que la nature des matériaux qui la contiennent. Les notions

de base de l'hydrogéologie sont abordées dans cette section. Pour une discussion plus élaborée, se référer à Freeze & Cherry (1979).

3.2.1 CHARGE HYDRAULIQUE (H)

La charge hydraulique au point (x,y,z) se définit par l'équation de Bernouilli comme suit:

$$h(x,y,z) = Z + \frac{P}{\gamma_w} + \frac{v^2}{2g} \qquad 3.17$$

où Z : Élévation du point

P : Pression du fluide

γ_w: Poids volumique de l'eau

v : Vitesse du fluide

g : Accélération gravitationnelle

La charge hydraulique s'exprime en mètres et représente l'énergie disponible par unité de masse du fluide. En hydrogéologie, étant donné les vitesses d'écoulement qui sont faibles, on néglige généralement le terme $\frac{v^2}{2g}$.

3.2.2 CONDUCTIVITÉ HYDRAULIQUE

La conductivité hydraulique est une mesure de la perméabilité à l'eau d'un matériau.

La conductivité hydraulique d'un matériau s'exprime de la façon suivante:

$$K_w = k \frac{\rho_w g}{\mu_w} \qquad 3.18$$

où k : Perméabilité intrinsèque du matériau

ρ_w : Masse volumique de l'eau

g : Accélération gravitationnelle

μ_w : Viscosité dynamique de l'eau

La conductivité hydraulique (K_w) représente une mesure de la perméabilité à l'eau qu'il ne faut pas confondre avec la perméabilité intrinsèque (k) d'un matériau, qui s'exprime en m^2 et qui est fonction du diamètre des pores au carré et d'un facteur de forme.

Il est d'usage courant d'utiliser les transmissivités (T) plutôt que les conductivités hydrauliques pour caractériser les aquifères. Conductivité hydraulique et transmissivité sont reliées par l'équation suivante :

$$T = K\,b \qquad\qquad T = \int_{z1}^{z2} K(z)\,dz \qquad 3.19$$

où b : Épaisseur saturée de l'aquifère

z_1 et z_2 : Élévation du plancher et du plafond de l'aquifère

3.2.3 LOI DE DARCY

En 1856, Darcy a déterminé la relation qui existe entre la conductivité hydraulique d'un matériau poreux, le débit spécifique et le gradient hydraulique. L'expérience consistait à mesurer le débit et la perte de charge dans un cylindre incliné rempli de sable dans laquelle de l'eau circulait. Il a montré que l'écoulement dans un milieu poreux est proportionnel à la perte de charge et inversement proportionnel à l'épaisseur du matériau traversé.

$$Q = -A\,K\,\frac{\Delta h}{L} \qquad 3.20$$

$$v_D = \frac{Q}{A} = -K\,\frac{\Delta h}{L} = -K\,i \qquad 3.21$$

où Q : Débit spécifique (m/s)

A : Aire du cylindre (m^2)

K : Conductivité hydraulique (m/s)

∇h : Perte de charge (m)

L : Distance ente les mesures de charge (m)

i : Gradient hydraulique (m/m)

v_D : Vitesse de Darcy (m/s)

Le signe négatif dans les équations 3.20 et 3.21 indique que l'écoulement s'effectue de la charge hydraulique la plus haute vers la plus basse. La vitesse dont il est question à l'équation 3.21 est appelée vitesse de Darcy parce qu'elle considère que l'écoulement se fait uniformément sur l'ensemble de la section sans tenir compte des grains et des pores. En fait, la vitesse réelle moyenne d'écoulement est la vitesse de Darcy divisée par la porosité efficace (n_e).

3.2.4 ESSAIS DE CONDUCTIVITÉ HYDRAULIQUE IN SITU (LEFRANC)

L'essai de conductivité hydraulique à charge variable de type Lefranc consiste à retirer ou injecter rapidement une quantité d'eau d'un piézomètre et à mesurer la variation du

niveau de la nappe dans le temps jusqu'au retour au niveau initial. Cette méthode a l'avantage d'être très rapide et peu coûteuse comparativement à un essai de pompage. Cependant, l'essai Lefranc ne permet que d'estimer la perméabilité d'un petit volume de matériau situé dans un rayon très proche du piézomètre.

La conductivité hydraulique est déduite de l'équation suivante qui est dérivée de la loi de Darcy.

$$Q = c\,K\,h \qquad 3.22$$

où Q : Débit d'entrée ou de sortie de l'eau dans le piézomètre (m^3/s)

c : Facteur de forme (m)

K : Conductivité hydraulique du sol (m/s)

h : Différence de charge appliquée à la zone d'injection (m)

Le débit d'entrée ou de sortie (Q) est aussi donné par l'équation suivante :

$$Q = -A\frac{\Delta h}{\Delta t} \qquad 3.23$$

où A : Section intérieure du tuyau d'injection (m^2)

$\frac{\Delta h}{\Delta t}$: Vitesse de descente ou de remontée de l'eau dans le tuyau (m/s)

En combinant les équations 3.22 et 3.23, on obtient:

$$\frac{\Delta h}{h} = - \frac{c}{A} K \Delta t \qquad 3.24$$

En intégrant par rapport à h et t, on obtient:

$$\ln \frac{h_1}{h_2} = - \frac{c}{A} K (t_2 - t_1) \qquad 3.25$$

où h_1 : Différence de charge au temps t_1

h_2 : Différence de charge au temps t_2

Le facteur de forme (c) dépend de la géométrie de la zone d'injection et il existe une grande variété dans les valeurs proposées (Chapuis, 1989). Bouwer et Rice (1976) et Bouwer (1989) ont proposé un coefficient de forme pour les piézomètres à pénétration partielle dans les aquifères à nappe libre qui a été adopté pour les essais de conductivité hydraulique réalisés sur le site de Lachenaie.

3.2.5 LE SIMULATEUR D'ÉCOULEMENT MODFLOW

MODFLOW est un simulateur d'écoulement tridimensionnel en différences finies créé par l'U.S.G.S. Le code de MODFLOW est écrit en langage FORTRAN 66, est du domaine public. Il est constitué d'un ensemble de modules indépendants les uns des autres qui permettent de simuler la plupart des phénomènes hydrogéologiques.

Ce logiciel a été retenu parmi les autres principalement pour sa grande facilité de modification du code initial. MODFLOW est un logiciel qui a fait ses preuves et fournit des solutions numériques stables (Anderson et Woessner, 1992). De plus, de nouveaux modules sont développés chaque année qui permettent d'étendre les capacités du logiciel.

L'équation de Poisson régissant l'écoulement de l'eau souterraine dans un aquifère confiné se définit comme suit:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(T_x \frac{\partial h}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(T_y \frac{\partial h}{\partial y}\right) = S \frac{\partial h}{\partial t} + Q \qquad 3.26$$

où T : Transmissivités

h : Charge hydraulique

S : Coefficient d'emmagasinement

Q : Terme représentant les sources et les puits

Le nom différences finies provient du fait que les dérivées sont approximées par des différences. De Marsily (1981) offre une description détaillée du principe des différences finies pour le lecteur intéressé à approfondir le sujet.

3.3 OPTIMISATION

Cette section présente quelques notions de programmation non-linéaire qui sont nécessaires à la compréhension du programme d'inversion. Le but d'un algorithme d'optimisation est d'obtenir le minimum d'une fonction et ce, en effectuant le moins d'opérations mathématiques possibles. Tous les algorithmes d'optimisation ont la même structure. À partir d'un point initial, une direction de mouvement est déterminée par une règle fixe ; un déplacement est effectué le long de cette direction jusqu'à un minimum (relatif) . À ce nouveau point, une nouvelle direction de mouvement est déterminée et le processus est répété. La différence entre les algorithmes est dans la règle qui définit le choix des directions successives de mouvement. Le lecteur intéressé à voir en détail les principes de la programmation non-linéaire peut se référer à Luenberger (1973).

3.3.1 NOTIONS DE BASE

La formulation générale des problèmes d'optimisation sans contrainte est la suivante :

minimiser $f(x_1,x_2,...,x_n)$ 3.27

sujet à $x_1,x_2,...,x_n \in E^n$

où $f(x_1,x_2,...,x_n)$: Fonction objective

E^n : Espace à n dimensions

Il existe deux types de solutions à l'équation 3.27, soit : les minimas locaux ou relatifs et le minimum absolu. Il est en général très difficile de trouver le minimum absolu d'une fonction puisque la solution finale dépend souvent des valeurs initiales. La figure 3.2 illustre bien cette réalité. Le point A converge vers le minimum relatif B tandis que le point C converge vers le minimum absolu D.

On est assuré qu'une fonction convexe n'a pas de minimas locaux mais un seul minimum global. Géométriquement (figure 3.3), une fonction est convexe lorsque toute ligne joignant deux points sur la fonction est toujours au-dessus de la fonction. Dans ce

cas, on est assuré que les algorithmes d'optimisation convergent vers une solution unique. Autrement, on ne peut rien dire.

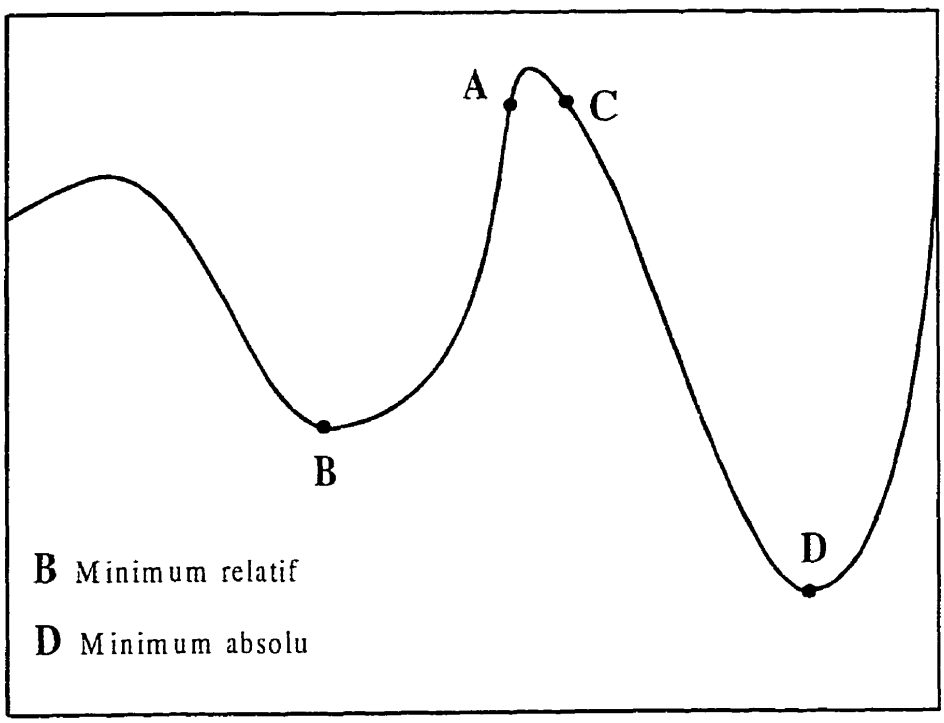


Figure 3.2 : Minimum relatif et absolu

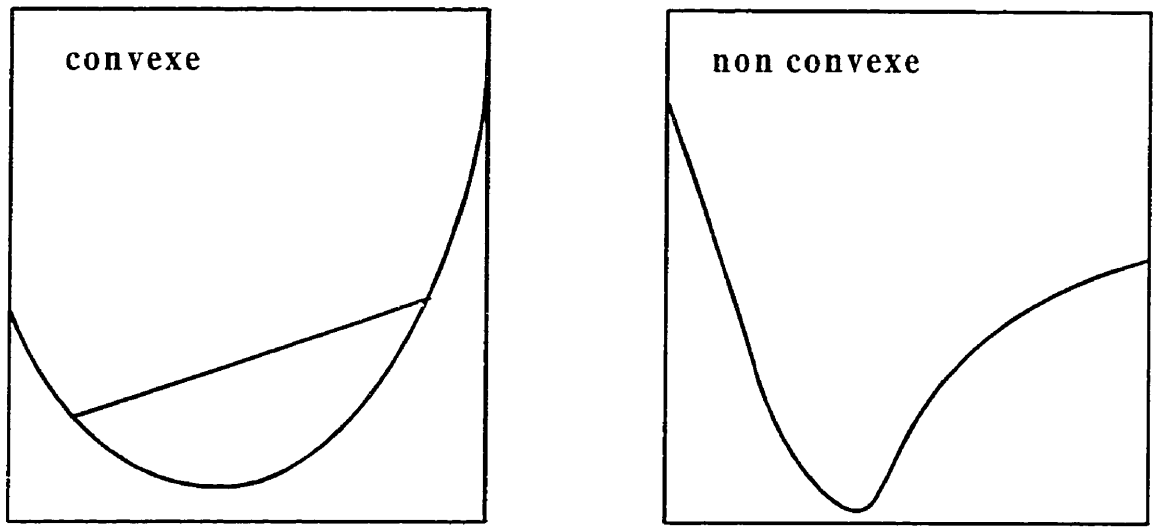


Figure 3.3 : Fonction convexe et non convexe

3.3.2 DIRECTIONS CONJUGUÉES

Toute fonction dont le point p est l'origine du système de coordonnées peut être approximée par sa série de Taylor qui prend la forme suivante :

$$f(x) = f(p) + \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} x_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} x_i x_j + \ldots\ldots \qquad 3.28$$

$$f(x) \approx \frac{1}{2} x' Q x - x' b + c \qquad 3.29$$

où $\quad [Q]_{ij} = \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right|_p$

b : $-\nabla f|p$

c : $f(p)$

La matrice Q dont les composantes sont les dérivées partielles de degré 2 de la fonction f est appelée matrice Hessienne. On peut montrer que lorsque la matrice Q est positive définie, c'est-à-dire lorsque tous ses vecteurs propres sont positifs, la fonction f est convexe.

Le gradient de la fonction f est calculé à partir de l'équation 3.29. On obtient :

$$\nabla f = g = Q x - b \qquad 3.30$$

Partant de x_0, supposons que l'on se déplace dans une direction u_0 jusqu'à un minimum x_1 et que l'on se propose de se déplacer dans une nouvelle direction u_1. Le choix de cette direction doit être effectué de façon à ce qu'on y retrouve un point x_2 dont le gradient g_2 soit perpendiculaire à u_0 et u_1 pour s'assurer que l'on ne puisse plus décroître la fonction objective en empruntant un parcours parallèle aux directions déjà considérées.

Bref, on veut :

$$g_2' u_1 = 0 \qquad 3.31$$

$$g_2'u_0 = 0 \qquad 3.32$$

La première condition signifie seulement que x_2 est le point minimisant la fonction f dans la direction u_1. Maintenant, on a de l'équation 3.30 :

$$g_1 = Qx_1 - b \qquad 3.33$$

$$g_2 = Qx_2 - b \qquad 3.34$$

et évidemment :

$$x_2 = x_1 + \alpha_1 u_1 \qquad 3.35$$

où α_1 : Constante plus grande que 0

En combinant les équations 3.32, 3.34 et 3.35, on obtient :

$$u_0' g_2 = 0 = u_0' Q x_2 - u_0' b \qquad 3.36$$

$$= u_0' Q x_1 + \alpha_1 u_0' Q u_1 - u_0' b \qquad 3.37$$

$$= \underbrace{u_0' g_1}_{0} + \alpha_1 u_0' Q u_1 = 0 \qquad 3.38$$

Le premier terme de droite de l'équation 3.38 est nul puisque u_0 et g_1 sont orthogonaux, ce qui impose que le terme $\alpha_1 u_0' Q\, u_1$ soit égal à 0. Puisque α_1 est plus grand que 0, il faut donc que $u_0' Q\, u_1$ soit égal à 0. Ce qui impose que ces deux vecteurs soient conjugués ou Q-orthogonaux. Généralisant ce résultat, si une fonction quadratique de N dimensions est successivement minimisée le long de N vecteurs conjugués, on obtient le minimum absolu en exactement N itérations (Luenberger, 1973, p. 191).

3.3.3 ALGORITHME DU GRADIENT CONJUGUÉ

L'algorithme du gradient conjugué a été préféré aux autres méthodes d'optimisation (Gauss-Newton, gradient, etc...) parce qu'il permet un taux de convergence rapide tout en restant relativement simple. L'algorithme utilisé est une variation de la méthode de Fletcher-Reeves proposée par Polak-Ribiere (Gilbert et Nocedal, 1992). Cet algorithme demande l'estimation du gradient à chaque itération mais ne demande pas la connaissance de la matrice Hessienne Q (Press et al., 1986, p. 415).

La première étape du gradient conjugué consiste à chercher le minimum relatif dans la direction du gradient. Le déplacement de chaque itération successive s'effectue dans une direction qui est une combinaison linéaire du nouveau gradient et de la direction de déplacement précédente.

La figure 3.4 montre une comparaison entre la méthode du gradient conjugué et du gradient pour une fonction quadratique en deux dimensions. L'avantage de la méthode du gradient conjugué est de converger vers le minimum en exactement N itérations pour une fonction quadratique à N dimensions comparativement à la méthode du gradient dont le taux de convergence dépend de l'excentricité de la fonction. Dans le cas d'une fonction non quadratique, le déplacement de la $N+1^{\text{ième}}$ itération s'effectue de nouveau dans la direction du gradient, ce qui est l'équivalent de recommencer l'algorithme de nouveau.

L'algorithme du gradient conjugué provenant de la librairie Numerical Recipes in FORTRAN (Press et al., 1986) a été retenu pour la partie optimisation du programme et ce, pour plusieurs raisons. Premièrement, la librairie Numerical Recipes est du domaine public. Deuxièmement, la documentation qui est fournie avec les programmes est détaillée. Troisièmement, les codes sont performants et faciles à modifier. Finalement, il est possible de compiler ces routines sur plusieurs plates-formes sans modifier les codes.

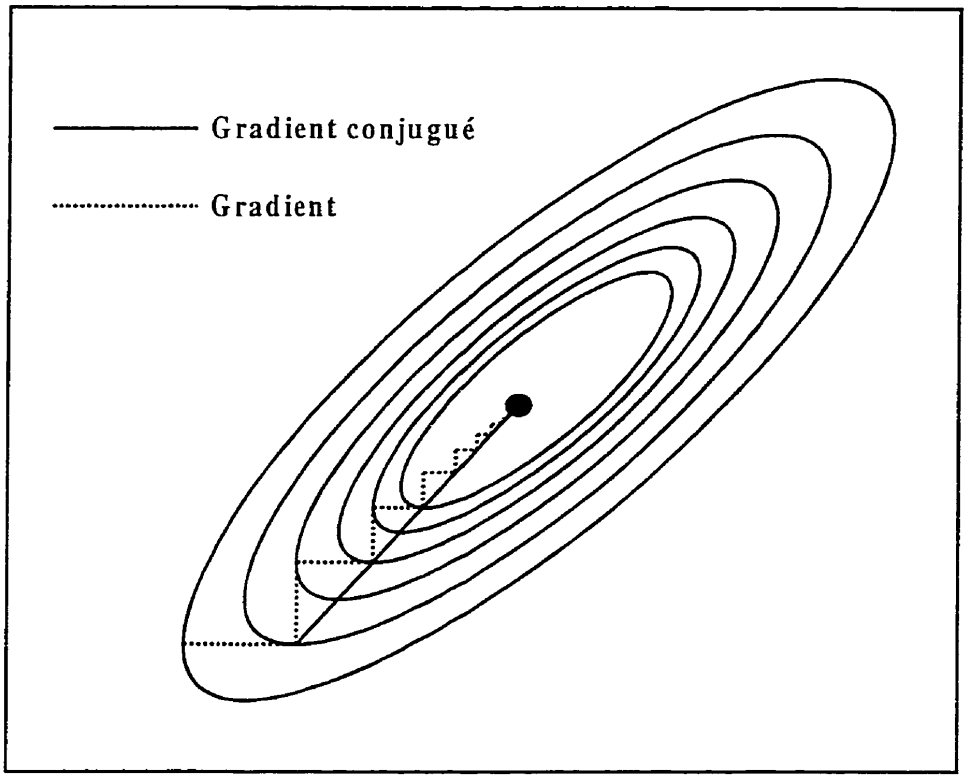


Figure 3.4 : Comparaison entre gradient et gradient conjugué

3.4 PROGRAMME D'INVERSION

Le programme d'inversion combine le simulateur d'écoulement MODFLOW et l'algorithme du gradient conjugué pour ajuster de manière itérative les charges hydrauliques simulées aux charges observées en altérant le champ de transmissivités.

La fonction objective utilisée est la somme des carrés des différences entre les charges observées et les charges provenant du simulateur d'écoulement (SE2). L'altération se fait

sur des points-pilotes situés sur une grille quasi régulière. L'altération est ensuite redistribuée aux autres points par un krigeage dual (global).

L'annexe A présente une description de chaque sous-routine du programme. La figure 3.5 présente l'algorithme du programme principal. Les routines de MODFLOW ne sont pas présentées dans cet ouvrage, cependant, le lecteur intéressé peut obtenir le manuel de l'utilisateur sur internet à l'adresse suivante : **http://www.epa.gov/ada/modflmn.html**.

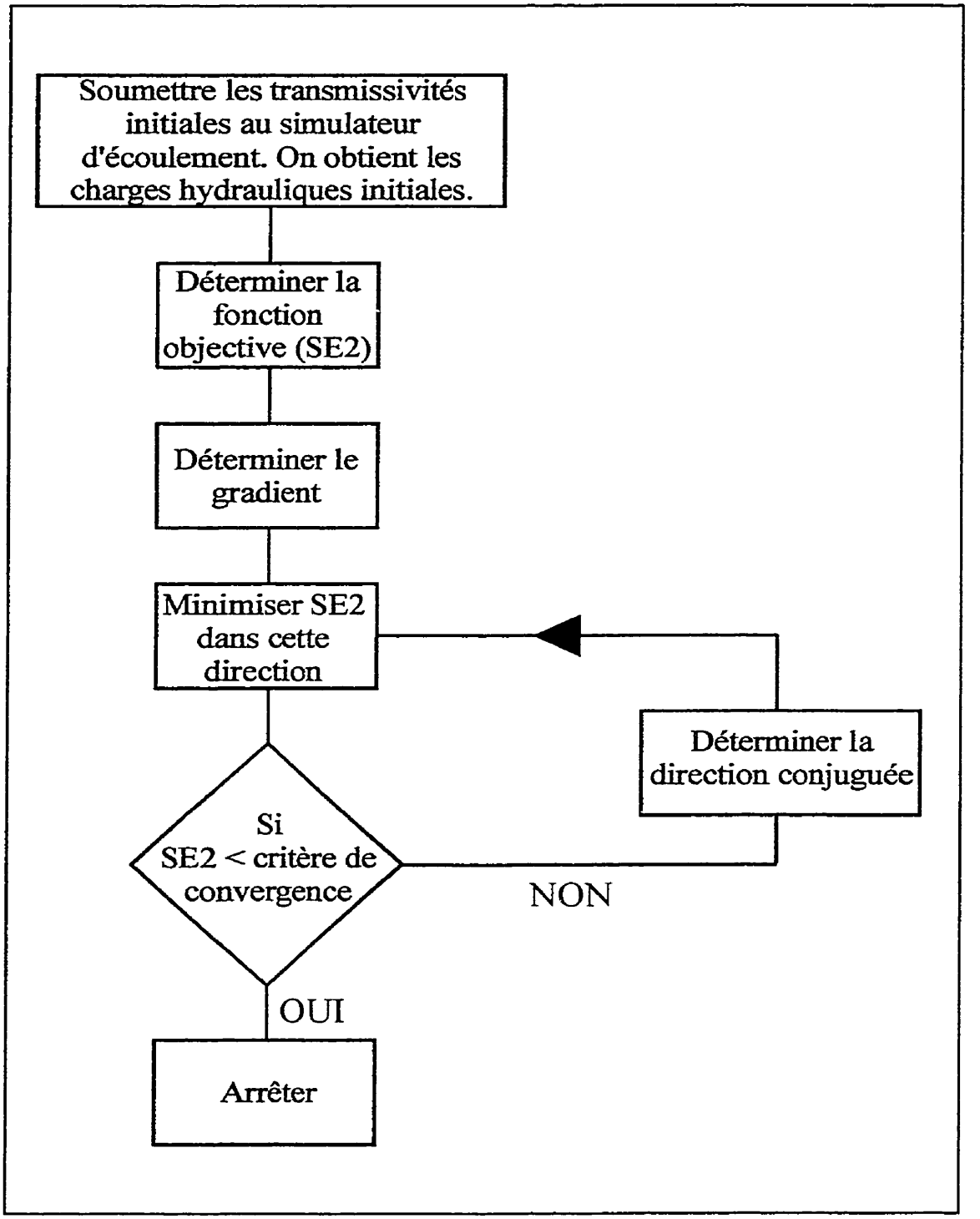


Figure 3.5 : Algorithme du programme d'inversion

CHAPITRE 4

APPLICATIONS

Ce chapitre présente l'application du programme d'inversion à deux aquifères synthétiques obtenus par simulations non-conditionnelles. Il s'agit de deux champs de transmissivités de 50X50 qui sont soumis au simulateur d'écoulement et constituent deux «réalités» qui servent à obtenir un total de 800 simulations conditionnelles aux transmissivités et aux charges hydrauliques provenant de divers scénarios d'échantillonnage. Les champs de transmissivités simulés ont été obtenus à partir d'un algorithme séquentiel gaussien provenant de la librairie géostatistique GSLIB (Deutsch et Journel, 1992).

4.1 AQUIFÈRES SYNTHÉTIQUES

Dans un premier temps, deux aquifères synthétiques sont créés à partir de simulations non-conditionnelles. Il s'agit de deux grilles régulières de 50x50 transmissivités, ayant un variogramme théorique sphérique sans effet de pépite, un plateau de 1 et des portées de 10 et 30 noeuds de grille respectivement. Le tableau 4.1 qui suit résume les statistiques des deux champs de transmissivités simulés. Les figures 4.1 et 4.2 présentent les variogrammes théoriques et expérimentaux des deux simulations et les histogrammes

respectifs. Il faut noter qu'il est généralement accepté que la distribution des transmissivités est log-normale (Mizell et al., 1982) de telle sorte que :

$$Y = Ln(T) \qquad \text{avec} \quad Y \sim N(\mu,\sigma^2) \qquad 4.1$$

Par conséquent, les simulations portent sur Y plutôt que directement sur T .

Tableau 4.1 : Statistiques des simulations 1 et 2

	Simulation 1	Simulation 2
Moyenne ($\bar{Y}$)	2.23×10^{-2}	-2.90×10^{-1}
Variance (σ_Y^2)	1.01	9.38×10^{-1}
Maximum	3.37	2.62
Minimum	-3.51	-2.73

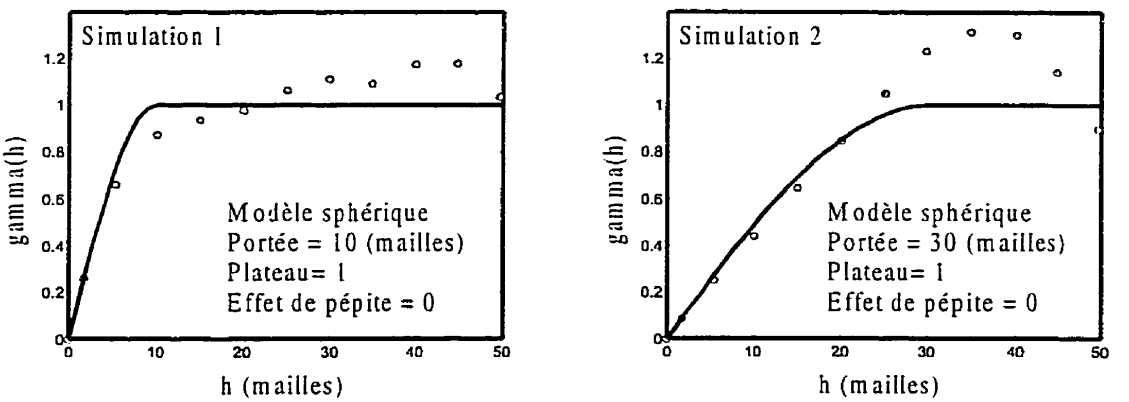


Figure 4.1 : Variogrammes des transmissivités synthétiques

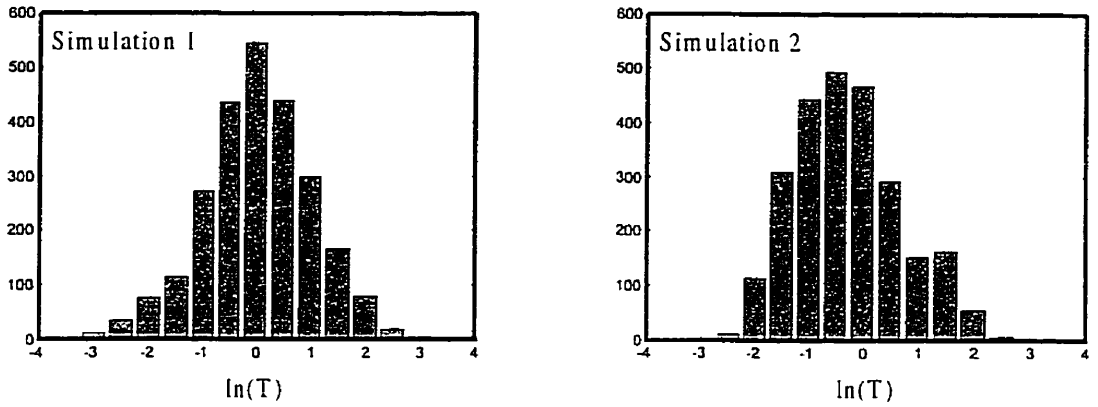


Figure 4.2 : Histogramme des transmissivités synthétiques

Ces deux simulations ont été soumises au simulateur d'écoulement MODFLOW afin d'obtenir les deux champs de charges hydrauliques «réels» associés. Les conditions frontières imposées aux deux champs sont décrites à la figure 4.3. Les figures 4.4 et 4.5 présentent les transmissivités et les charges hydrauliques résultantes pour ces deux aquifères.

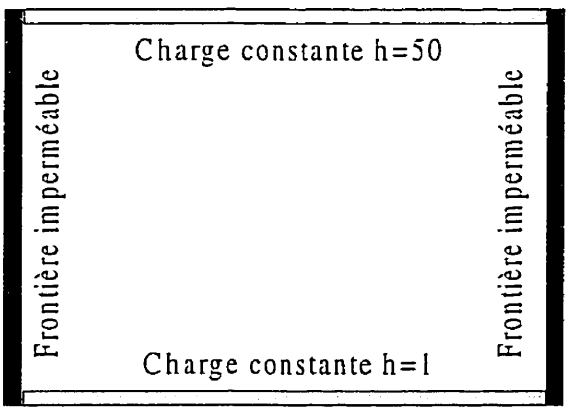


Figure 4.3 : Conditions frontières

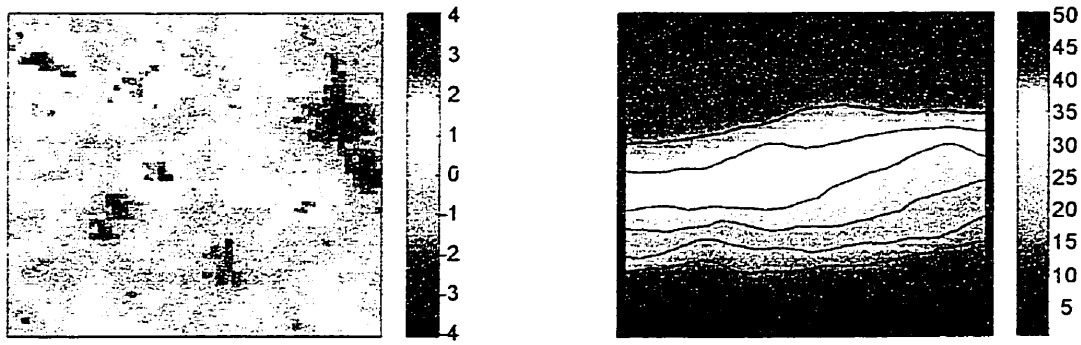


Figure 4.4 : Transmissivités et charges hydrauliques du cas synthétique 1

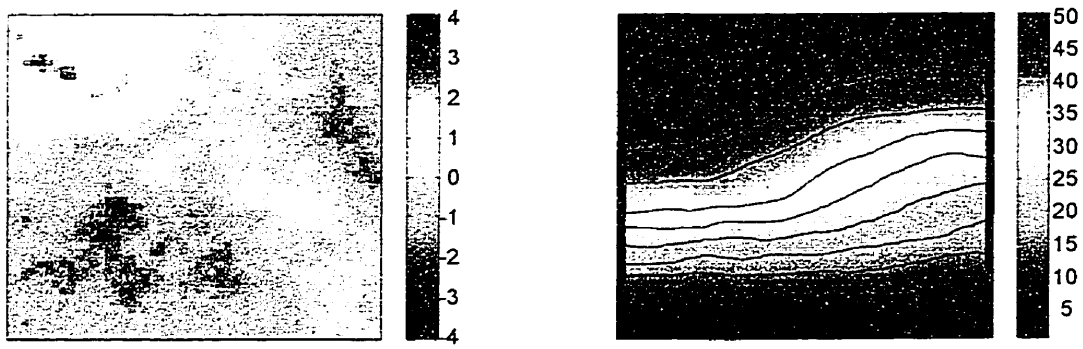


Figure 4.5 : Transmissivités et charges hydrauliques du cas synthétique 2

4.2 DÉTERMINATION DU NOMBRE OPTIMAL DE POINTS-PILOTES

Avant de procéder aux simulations, on a déterminé le nombre optimal de points-pilotes permettant de minimiser la fonction objective sans augmenter excessivement le temps de calcul. Puisque le gradient doit être calculé à chaque itération, plus le nombre de points-pilotes augmente, plus l'optimisation est longue. On a donc échantillonné 10 transmissivités et 30 charges hydrauliques sur l'aquifère synthétique numéro 1. Ensuite,

trente simulations conditionnelles aux 10 transmissivités « mesurées » ont été conditionnées aux 30 charges « mesurées » (voir figure 4.7 pour la localisation des observations) avec successivement 4, 9, 16, 25, 36, 49, 64, 81, 100 et 121 points-pilotes situés sur une grille quasi-régulière à l'intérieur de l'aquifère.

Le tableau 4.2 qui suit présente la moyenne des fonctions objectives finales pour ces cas, le nombre d'itérations moyen nécessaire et un estimé du temps de calcul requis pour obtenir la solution. Rappelons que la fonction objective représente la somme des carrés des différences entre les charges observées et les charges simulées. Le variogramme utilisé était un sphérique sans effet de pépite ayant une portée de 10 mailles de grille et un plateau de 1.

Tableau 4.2 : Fonction objective moyenne finale versus nombre de points-pilotes

Nombre de points-pilotes	Fonction objective finale moyenne	Nombre moyen d'itérations	Temps de convergence moyen (min.)
(simulation initiale) 0	658.60	0	0
4	459.95	5.70	4.4
9	227.23	11.50	6.0
16	111.54	14.33	12.8
25	54.63	16.20	19.1
36	23.02	18.67	24.5

Tableau 4.2 (suite) : Fonction objective moyenne finale versus nombre de points-pilotes

Nombre de points-pilotes	Fonction objective finale moyenne	Nombre moyen d'itérations	Temps de convergence moyen (min.)
49	18.47	15.90	32.2
64	14.92	18.73	52.2
81	4.73	21.07	90.2
100	2.00	29.83	162.2
121	3.96	23.10	230.0

À la lumière de ces résultats, nous avons choisi d'utiliser la grille de 100 points-pilotes, qui permet d'obtenir la meilleure solution moyenne. Nous avons cependant fixé le nombre d'itérations maximal à 30 de façon à réduire les temps d'optimisation. On peut voir sur la figure 4.6 qui présente l'évolution des 30 fonctions objectives pour le cas retenu que les optimisations qui ont dépassé 30 itérations n'ont que très peu été améliorées par la suite. En fait, si le nombre d'itérations maximal avait été fixé à 30 a priori, la fonction objective finale serait passée de 2.00 a 2.03 tout en réduisant le temps moyen d'optimisation d'environ 20% (le nombre total d'itérations pour les 30 optimisations passe de 895 à 714).

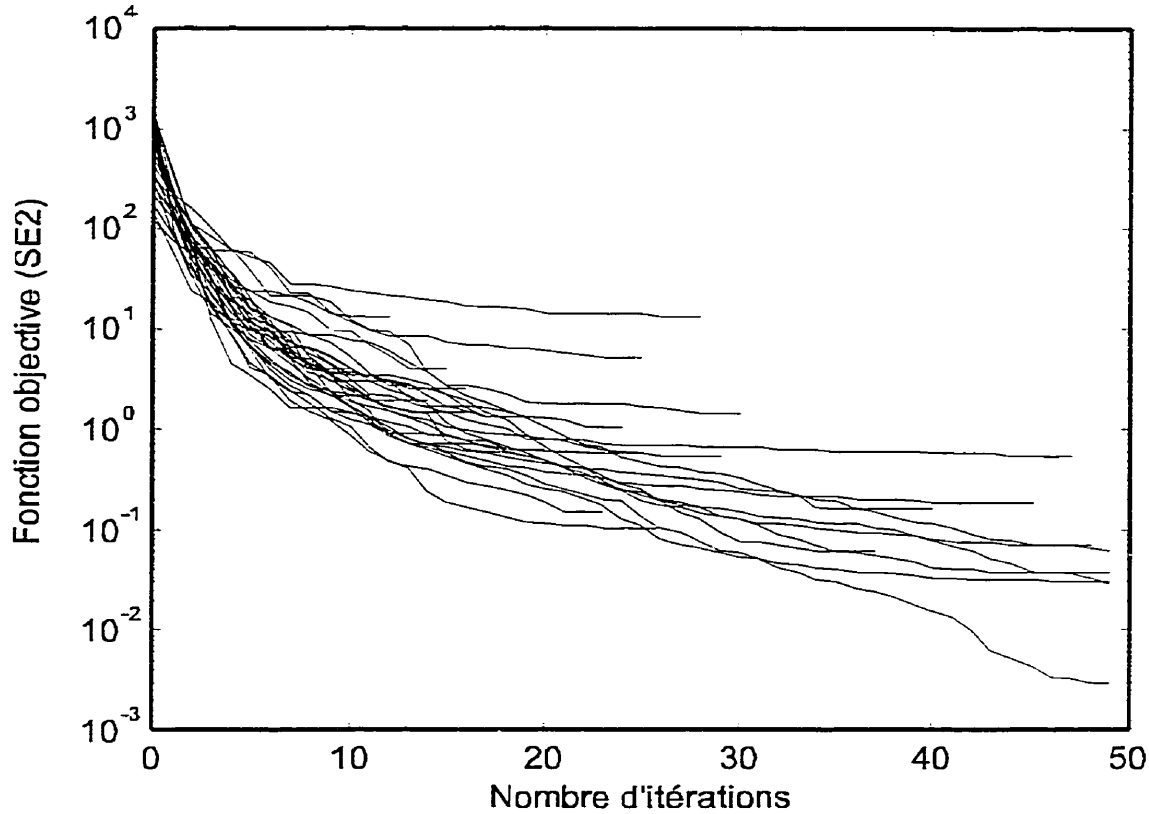


Figure 4.6 : Variations de la fonction objective en fonction du nombre d'itérations

4.3 OPTIMISATION

Ayant déterminé le nombre de points-pilotes à utiliser, 4 scénarios d'échantillonnage ont été étudiés pour les deux aquifères considérés. Pour chaque scénario et aquifères considérés, 100 simulations ont été optimisées, pour un total de 800. La figure 4.7 qui suit présente les 4 scénarios d'échantillonnage étudiés. Les figures B.1 à B.8 de l'annexe B présentent des exemples de conditionnement pour tous les cas considérés.

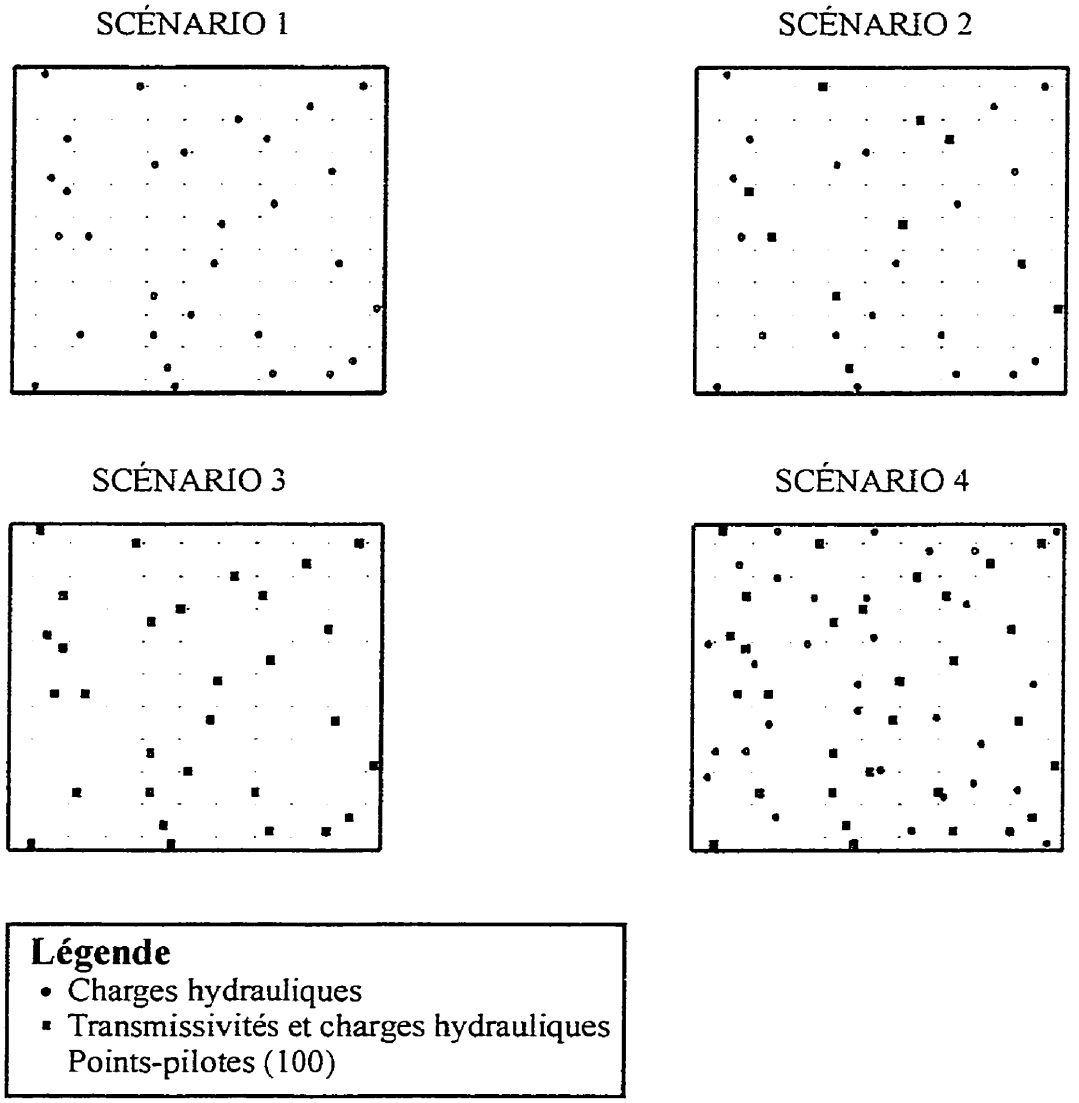


Figure 4.7 : Scénarios d'échantillonnage des transmissivités et des charges hydrauliques

4.3.1 ÉVOLUTION DES FONCTIONS OBJECTIVES

La figure B.9 de l'annexe présente les fonctions objectives finales en fonction des fonctions objectives initiales pour l'ensemble des cas considérés. Le tableau 4.3 présente les moyennes initiales et finales des fonctions objectives pour les 8 cas considérés.

Tableau 4.3 : Fonctions objectives moyennes initiales et finales

	Aquifère synthétique 1		Aquifère synthétique 2	
Fonction objective	initiale	finale	initiale	finale
0T, 30H	998.11	3.25	2269.13	17.36
10T, 30H	641.07	2.81	389.13	0.15
30T, 30H	314.76	1.45	93.94	0.13
30T, 60H	657.43	8.04	201.21	0.47

On peut voir au tableau 4.3 que la valeur moyenne de la fonction objective initiale (SE2i) diminue en fonction du nombre de transmissivités observées et ce, d'autant plus que la portée du variogramme est grande. Pour un même nombre de transmissivités connues, l'aquifère synthétique 2 (dont le variogramme a une portée de 30) montre un meilleur conditionnement initial sauf dans le cas où aucune transmissivité n'est connue. La figure B.9 montre qu'il n'existe pas de lien entre la qualité de la solution initiale et la

qualité de la solution finale. Une bonne solution initiale n'assure donc pas que l'optimisation convergera vers une bonne solution finale.

4.3.2 EFFET DU CONDITIONNEMENT SUR LE VARIOGRAMME ET LES STATISTIQUES

Les figures B.10 et B.11 de l'annexe B présentent l'enveloppe et les valeurs moyennes des variogrammes initiaux et finaux pour les 8 cas considérés. Dans l'ensemble des cas, on peut voir que les caractéristiques spatiales sont conservées après l'optimisation.

On peut aussi remarquer que le conditionnement aux charges permet de réduire les dimensions de l'enveloppe des variogrammes, plus particulièrement pour les scénarios comprenant 30 transmissivités et 30 charges hydrauliques, et 30 transmissivités et 60 charges hydrauliques respectivement. Cet effet de conditionnement au variogramme expérimental semble être plus marqué pour l'aquifère synthétique numéro 2. On peut aussi voir que les courbes des variogrammes moyens montrent que l'on reproduit en moyenne assez bien le variogramme expérimental des deux réalités.

Les figures B.12 et B.13 de l'annexe B présentent les moyennes des logarithmes des transmissivités finales en fonction des moyennes initiales ainsi que les écarts-types finaux en fonction des écarts-types initiaux de chaque simulation. On constate qu'en

général, la moyenne et l'écart-type des logarithmes de T semblent diminuées par l'optimisation. On pense que la diminution des transmissivités provient en partie des transmissivités observées qui sont inférieures à zéro. Dans les simulations conditionnelles, puisqu'on effectue un krigeage simple avec une moyenne de zéro, les transmissivités simulées auront tendance à se rapprocher de la moyenne zéro loin des points observés. Conséquemment, la simulation crée des transmissivités plus contrastées que les transmissivités réelles. Les contrastes de transmissivités ont une forte influence sur le patron de charges hydrauliques. Les charges observées ont sans doute pour effet de chercher à diminuer ces contrastes et donc à diminuer les transmissivités loin des points observés.

Les figures B14 à B.17 présentent les écarts-types des transmissivités et des charges hydrauliques initiales et finales pour chaque position sur la grille. Ces images permettent de juger de la qualité du conditionnement qu'offrent les charges hydrauliques et les transmissivités. Lorsque le conditionnement est fort en un point donné, l'écart-type est faible et le point apparaîtra bleu foncé sur les figures, inversement lorsque le conditionnement est faible, le point apparaîtra rouge. La colonne de gauche sur ces figures (solution initiale) n'utilise pas les charges. La colonne de droite (solution finale) les utilise. En comparant les deux colonnes, on peut évaluer le conditionnement opéré par les charges pour un même niveau d'information sur T. D'une ligne à l'autre, on peut

évaluer l'impact d'ajouter soit des informations sur T (colonne de gauche), ou des informations sur T et h (colonne de droite).

Ceci nous amène aux constatations suivantes. Premièrement, le conditionnement des transmissivités aux transmissivités observées est (évidemment) proportionnel à la portée du variogramme. L'effet de conditionnement des transmissivités sur les charges hydrauliques initiales est aussi proportionnel à la portée du variogramme sur les transmissivités, mais reste tout de même faible par rapport au conditionnement des charges par les charges hydrauliques. Deuxièmement, le conditionnement aux charges hydrauliques permet de fournir des solutions acceptables aux points de charges hydrauliques connues et diminue fortement l'incertitude sur l'ensemble des charges hydrauliques. Par contre, le conditionnement aux charges hydrauliques réduit peu l'incertitude sur les transmissivités. Troisièmement, les zones où les charges hydrauliques sont fortement conditionnées correspondent aux charges hydrauliques observées. Le rayon d'influence des charges est faible peu importe la portée du variogramme. Les zones qui ne contiennent pas de charges hydrauliques observées ont toutes un écart-type des charges semblable se situant autour de 1 peu importe le scénario ou l'aquifère synthétique considéré. Donc, l'ajout de transmissivités observées diminue peu l'incertitude sur les charges hydrauliques dans les zones où les charges hydrauliques ne sont pas connues.

Les figures B.18 à B.21 présentent respectivement les moyennes des logarithmes des transmissivités et des charges hydrauliques initiales et finales en fonction de la position sur la grille. Ces graphiques permettent de juger si les solutions obtenues reflètent bien en moyenne les caractéristiques des transmissivités et charges hydrauliques réelles. Il faut cependant noter que ces figures moyennes ne respectent pas les équations d'écoulement.

Si l'on compare les figures B.18 et B.20 aux deux champs de transmissivités synthétiques (figures 4.4 et 4.5), on constate que l'optimisation permet de reproduire les contrastes de transmissivités «réels» et ce, d'autant plus que le nombre de transmissivités observées est élevé. Par exemple, à la figure B.20, on voit nettement la zone de forte perméabilité située au nord-est de la grille apparaître après le conditionnement aux charges hydrauliques. La définition de cette zone augmente avec le nombre de transmissivités observées. De la même façon, plus le nombre de transmissivités observées est élevé, plus les patrons des charges hydrauliques moyennes initiales ressemblent aux transmissivités et charges hydrauliques réelles. On peut aussi voir que dans le cas où 30 transmissivités sont initialement observées, les champs de charges hydrauliques moyens initiaux reproduisent déjà assez bien l'écoulement réel.

4.3.3 CHEMINEMENT DE PARTICULES

Les 800 simulations obtenues ont servi à étudier le cheminement d'un contaminant non-réactif et déterminer l'incertitude sur les trajets et les temps d'arrivée initiaux et finaux. Une particule était initialement placée au centre de la frontière nord de l'aquifère, puis le trajet et le temps de parcours étaient simulés à l'aide d'une routine de cheminement de particules. La figure 4.8 qui suit présente les cheminements «réels» des particules ainsi que les temps d'arrivée «réels» des aquifères synthétiques 1 et 2. Les figures B.22 à B.25 de l'annexe B présentent les trajets initiaux et finaux des particules pour les scénarios retenus et les histogrammes des temps d'arrivée initiaux et finaux. Le tableau 4.4 qui suit présente la moyenne et l'écart-type des temps d'arrivée des particules pour chaque scénario.

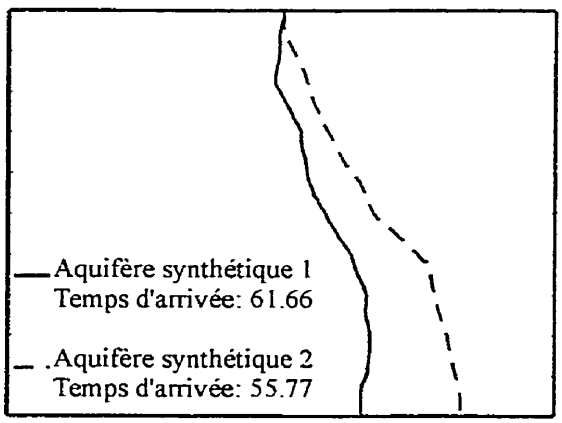


Figure 4.8 : Trajets et temps d'arrivée «réels» des particules

Tableau 4.4 : Statistiques sur les temps de parcours initiaux et finaux

	Aquifère synthétique 1				Aquifère synthétique 2			
Scénario	Moyenne (init. et fin.)		Écart-type (init. Et fin.)		Moyenne (init. Et fin.)		Écart-type (init. et fin.)	
0T et 30H	54.46	57.89	21.65	23.83	60.33	61.01	43.68	35.95
10T et 30 H	65.07	68.59	26.80	24.10	99.89	82.58	42.46	25.82
30T et 30H	58.74	66.90	19.83	22.94	66.53	59.78	15.99	16.18
30T et 60H	58.74	66.10	19.83	22.87	66.53	67.75	15.99	13.29

On peut voir que, dans le cas de l'aquifère synthétique numéro 1, le conditionnement aux transmissivités diminue très peu l'incertitude initiale sur les trajets des particules. Bien que le conditionnement aux charges hydrauliques diminue l'incertitude sur les trajets finaux par rapport aux trajets initiaux, le fait d'ajouter des transmissivités observées avant le conditionnement aux charges hydrauliques diminue peu l'incertitude finale. L'incertitude reste grande même lorsque 30 transmissivités et 60 charges hydrauliques sont observées. Le trajet «réel» de la particule se retrouve à l'intérieur de l'éventail des trajets simulés pour les quatre scénarios considérés avant et après l'optimisation. On peut aussi voir à la figure B.23 et au tableau 4.4 que l'incertitude sur les temps d'arrivée reste similaire pour tous les scénarios considérés.

Dans le cas de l'aquifère synthétique numéro 2, l'incertitude sur les chemins finaux devient très faible dès que 10 transmissivités et 30 charges hydrauliques sont observées. Lorsque 30 transmissivités sont observées, l'incertitude initiale sur les chemins devient également très faible. Le conditionnement aux charges hydrauliques ne diminue que marginalement l'incertitude par la suite. Le trajet «réel» de la particule se retrouve à l'intérieur de l'éventail des simulations pour les quatre scénarios considérés avant et après l'optimisation. On peut voir, à la figure B.25 et au tableau 4.4, que l'incertitude sur les temps d'arrivée n'est diminuée significativement par le conditionnement aux charges hydrauliques que dans le cas où 10 transmissivités et 30 charges hydrauliques sont observées.

CHAPITRE 5

ÉTUDE DE CAS

L'étude de cas provient de mesures de conductivités hydrauliques recueillies sur un aquifère à nappe libre situé dans la région de Lachenaie. Les conductivités hydrauliques sont utilisées pour obtenir des simulations conditionnelles.

5.1 DESCRIPTION DU SITE DE LACHENAIE

Le site de Lachenaie est situé à l'est du site d'enfouissement principal de la compagnie BFI, le long de l'autoroute 640. Il s'agit d'un aquifère à nappe libre, composé de sable moyen et de fines couches de silt, d'une épaisseur moyenne d'environ 3.5 mètres et fortement perméable. La couche sous-jacente est composée de l'argile de la mer Champlain d'une épaisseur moyenne de 30 mètres et d'une conductivité hydraulique d'environ 10^{-7} cm/s. La recharge de l'aquifère se fait par un étang situé au nord-ouest du site et la décharge dans le fossé de drainage de l'autoroute 640. Le gradient hydraulique moyen est d'environ 2%.

Un total de 48 sondages ont été effectués sur la propriété dans lequel ont été installés des piézomètres. Les piézomètres ont un diamètre de 3.175 cm et les crépines ont des fentes de 0.51 mm. Les longueurs de crépines varient entre 0.2 et 1.2 mètres. Chaque piézomètre a été développé à l'aide d'une pompe à haute pression. Les sommets des

tuyaux ont tous été arpentés en octobre 1995 et vérifiés en juin 1996. La figure 5.1 présente un plan de localisation des piézomètres.

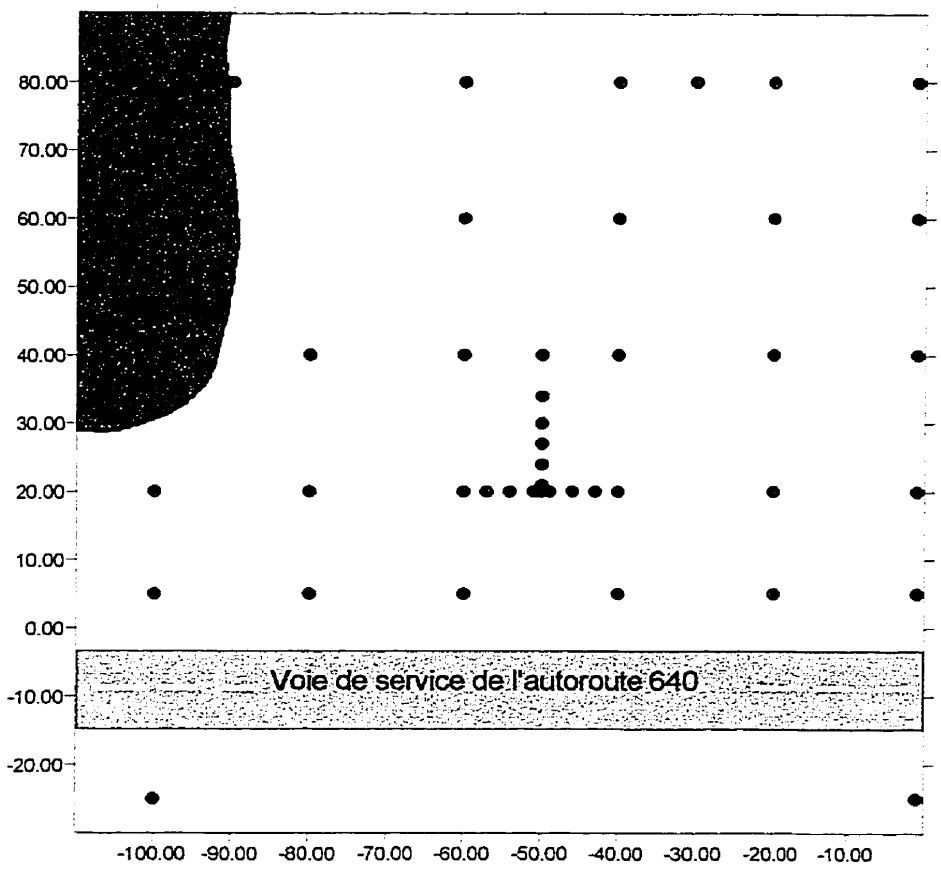


Figure 5.1 : Plan de localisation de la propriété de Lachenaie

5.2 TRAVAUX EFFECTUÉS

Des essais de conductivité hydraulique et le relevé des niveaux piézométriques ont été réalisés dans 35 des 48 piézomètres de la propriété lors de deux visites effectuées les 23 et 30 novembre 1996.

Les essais de conductivité hydraulique se sont déroulés de la façon suivante:

- mesure du niveau piézométrique à l'aide d'une sonde électrique;
- insertion d'une jauge à pression dans le fond du piézomètre;
- remplissage rapide du piézomètre à l'aide d'un seau et d'un entonnoir;
- lecture du niveau piézométrique à toutes les secondes;
- attente de quelques minutes;
- reprise de l'essai pour s'assurer de la reproductibilité des estimés.

La baisse du niveau dans les piézomètres était très rapide et généralement le retour au niveau initial s'effectuait en moins de 10 secondes. La température de l'eau se situait autour de 7°C tandis que la température extérieure se situait autour de 0°C. La pression barométrique n'a pas été mesurée.

5.3 INTERPRÉTATION DES ESSAIS

L'interprétation des essais s'est effectuée à l'aide d'une feuille de calcul développée par Groleau (1995). Les coefficients de forme (C) sont ceux proposés par Bouwer & Rice

(1976) pour des piézomètres à pénétration totale ou partielle dans un aquifère non-confiné.

Notons que dans l'essai décrit par Bouwer & Rice, une quantité d'eau est rapidement enlevée du piézomètre et l'on mesure la remontée de l'eau, contrairement aux essais effectués à Lachenaie, où l'on ajoutait une quantité d'eau et l'on mesurait la descente. Cependant, si la totalité de la partie crépinée est submergée et les effets de la remontée dans la partie non-saturée sont négligés, les deux essais devraient être symétriques (Bouwer, 1989). Aussi, étant donné que le rayon efficace des puits n'était pas connu, il a été fixé au rayon du piézomètre, conformément à la pratique usuelle (Bouwer, 1989).

Pour les puits à pénétration partielle, où le niveau réel du sommet de la couche d'argile était inconnu, les estimés du niveau de la couche d'argile ont été obtenus par krigeage. La figure 5.2 présente le variogramme expérimental de l'élévation de la couche d'argile et les caractéristiques du modèle théorique adopté. Il faut noter que nous avons choisi d'estimer le niveau du sommet de la couche d'argile plutôt que celui de l'épaisseur de sable parce que cette variable doit être donnée en entrée à MODFLOW pour simuler les écoulements non-confinés

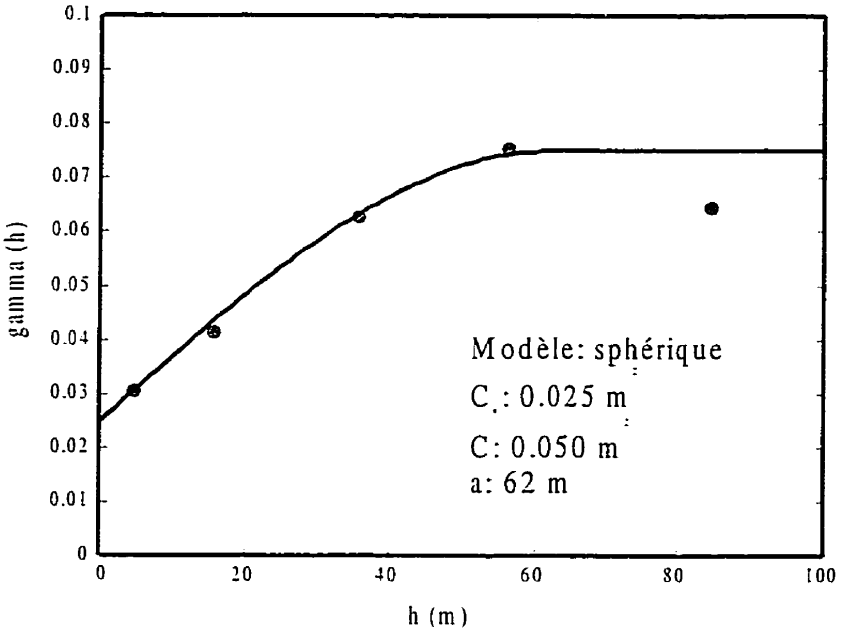


Figure 5.2 : Variogramme de l'élévation du sommet de la couche d'argile

Le tableau C.1 de l'annexe présente l'ensemble des estimés de conductivité hydrauliques obtenus à Lachenaie, l'élévation de la couche d'argile de même que les niveaux piézométriques mesurés. Les estimés du tableau C.1 proviennent du premier essai. Les reprises ont donné des valeurs pratiquement identiques.

Finalement, il faut noter que plusieurs sources d'erreur viennent entacher les essais de perméabilité in situ. Selon Chapuis (communication personnelle, 1998), dans des conditions où tous les paramètres de l'essai sont connus, la perméabilité réelle d'un échantillon de sol se situe dans un intervalle compris entre le simple et le double de l'estimé obtenu. Dans le cas de Lachenaie, on dénote trois sources d'erreur principales.

Premièrement, on ne connaît pas le rayon de développement des piézomètres. Deuxièmement, dans le cas des piézomètres à pénétration partielle, on doit utiliser un estimé de l'épaisseur de l'aquifère. Troisièmement, même dans les cas où les piézomètres sont installés jusqu'à l'argile, il subsiste toujours une certaine imprécision sur l'épaisseur de la couche puisque le passage entre la couche de sable et d'argile est plus où moins net. Tous ces facteurs ont pour effet de diminuer la précision des estimés obtenus.

5.4 VARIOGRAMME ET STATISTIQUES

Le variogramme expérimental des logarithmes de conductivités hydrauliques a été obtenu à partir des estimés des perméabilité obtenus sur le terrain. Le modèle théorique qui a été adopté présente un effet de pépite de 0.18 $(cm/s)^2$, une portée de 42 mètres et un plateau de 0.56 $(cm/s)^2$. La figure 5.3 qui suit présente le variogramme expérimental et le variogramme théorique adopté. Le tableau qui suit présente les statistiques des conductivités hydrauliques estimées et la figure 5.4 présente l'histogramme.

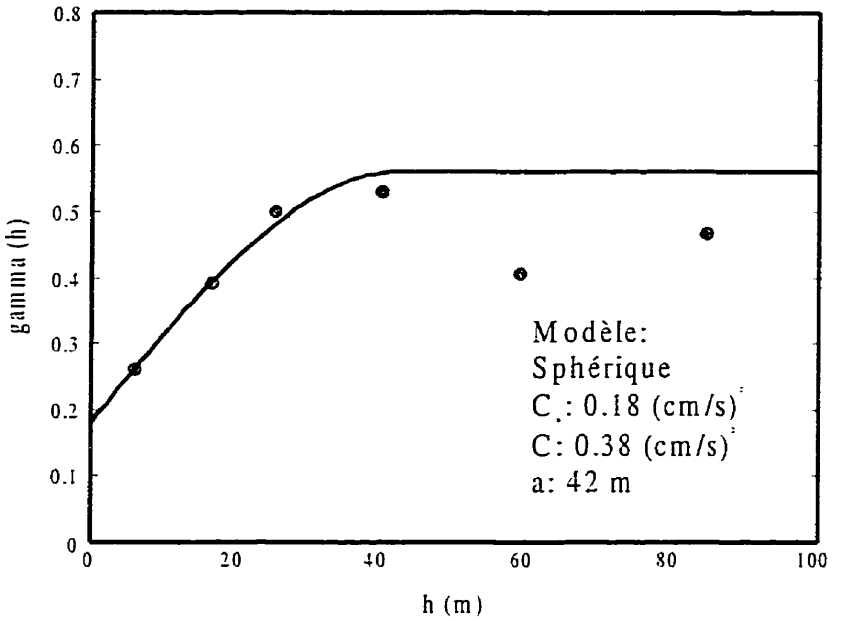


Figure 5.3 : Variogramme des logarithmes des conductivités hydrauliques

Tableau 5.1 : Statistiques des logarithmes des conductivités hydrauliques

	Log K
Moyenne ($\bar{Y}$)	-3.13
Variance (σ_Y^2)	0.45
Maximum	-1.90
Minimum	-4.61

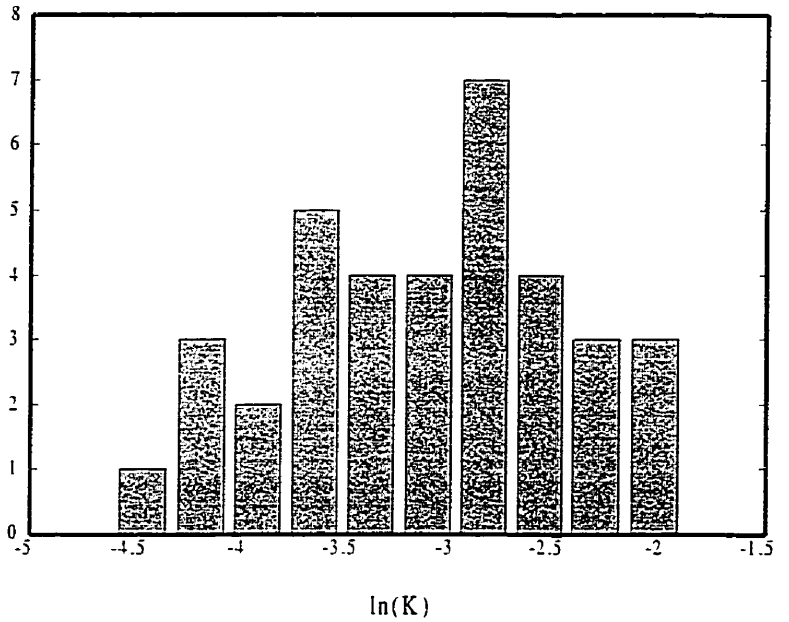


Figure 5.4 : Histogramme des logarithmes des conductivités hydrauliques

5.5 SIMULATIONS CONDITIONNELLES

L'étape suivante a consisté à obtenir des simulations de champs de conductivités hydrauliques conditionnelles aux conductivités mesurées. On a retenu a priori une grille de 50x37 correspondant à une maille de 2mx2m de côté pour l'optimisation. Les limites de cette grille sont (-99,78) au nord-ouest, (-99,6) au sud-ouest, (-1,78) au nord-est et (-1,6) au sud-est. La maille de la grille a été choisie de façon à être assez fine pour fournir des estimés précis sans demander un temps d'optimisation trop grand. La position de la grille a été choisie de manière à ce qu'aucun noeud simulé ne soit extrapolé.

On peut considérer que le rayon d'influence des essais de perméabilité in situ est d'environ 30 centimètres. Le support sur lesquelles les conductivités hydrauliques sont connues est donc faible par rapport à la taille des cellules de 2mx2m qui a été retenue. Une technique de simulation tenant compte des changements d'échelle a donc été adoptée.

Afin de tenir compte des supports différents, chaque maille de la grille a été subdivisée en une grille de 3x3 dont chaque noeud correspond à peu près au support d'un essai in situ. Les simulations ont donc eu lieu sur une grille de 150X111. Ensuite on a estimé la conductivité de chaque noeud de la grille de 50x37 en faisant une moyenne géométrique des 9 valeurs simulées sur la grille interne.

Cette façon de procéder a pour effet de filtrer l'effet de pépite du variogramme expérimental. Donc les conductivités hydrauliques simulées montrent des variogrammes expérimentaux sans effet de pépite.

5.6 CONDITIONS FRONTIÈRES

Pour l'optimisation, on a assigné des charges constantes pour les quatre frontières de l'aquifère. Dans la zone nord-ouest de l'aquifère le niveau a été fixé à 13m, ce qui correspond au niveau de l'étang. Pour le reste de l'aquifère, on ne possédait que des mesures ponctuelles correspondant aux piézomètres. Pour palier ce problème et du

même coup fournir une solution initiale au simulateur d'écoulement pour l'optimisation. les charges hydrauliques ont été krigées aux points de la grille. Les charges hydrauliques situées sur les frontières ont été considérées comme les charges constantes pour l'optimisation.

La figure 5.5 présente le variogramme expérimental des charges hydrauliques. On peut voir l'effet de la dérive sur le variogramme puisque la moyenne des charges hydrauliques varie en fonction de la position. Pour éliminer l'effet de dérive, il faudrait soustraire la régionale. Le problème est que la régionale n'est pas connue et que, pour l'obtenir, il faudrait connaître les conditions frontières en tous points. Or, le krigeage des charges hydrauliques vise précisément à obtenir ces conditions frontières. On a donc décidé d'adopter un variogramme théorique arbitraire et d'utiliser le krigeage universel avec dérive d'ordre 1 pour estimer les charges hydrauliques. Le modèle adopté est un sphérique sans effet de pépite qui montre une portée de 30 mètres. On a vérifié visuellement que les charges krigées ne présentaient pas d'anomalies aux frontières (par exemple des inversions du gradient hydraulique le long d'une frontière).

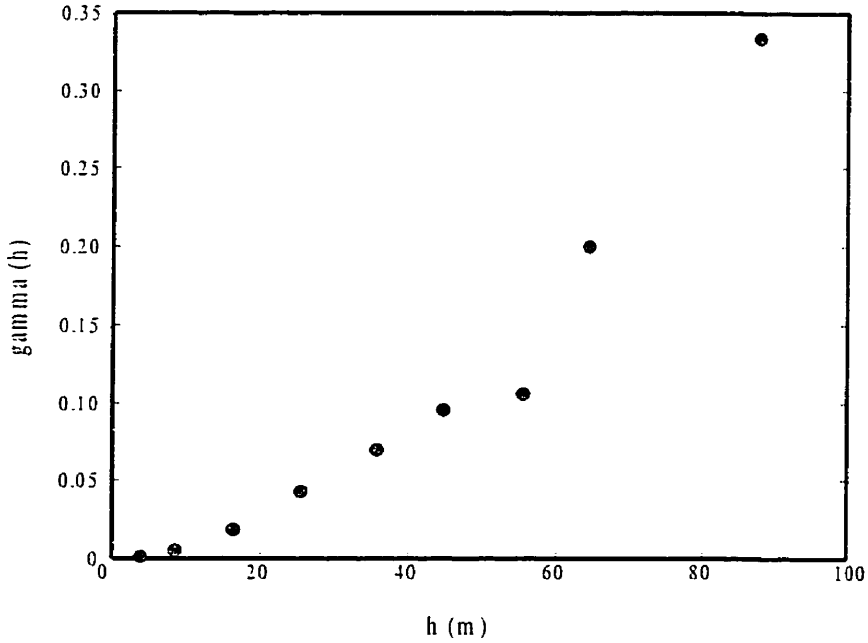


Figure 5.5 : Variogramme omnidirectionnel des charges hydrauliques

Il faut noter que le krigeage des charges hydrauliques ne permet pas d'obtenir une solution qui respectera les équations d'écoulement en tous points. Pour chaque maille de la grille, les débits d'entrée peuvent différer des débits de sortie. Dans le cas-ci, il existe même une maille qui ne montre que des débits d'entrée sur les quatre faces. La figure 5.6 présente le réseau d'écoulement krigé. Le carré noir sur la figure marque l'emplacement de la maille en question.

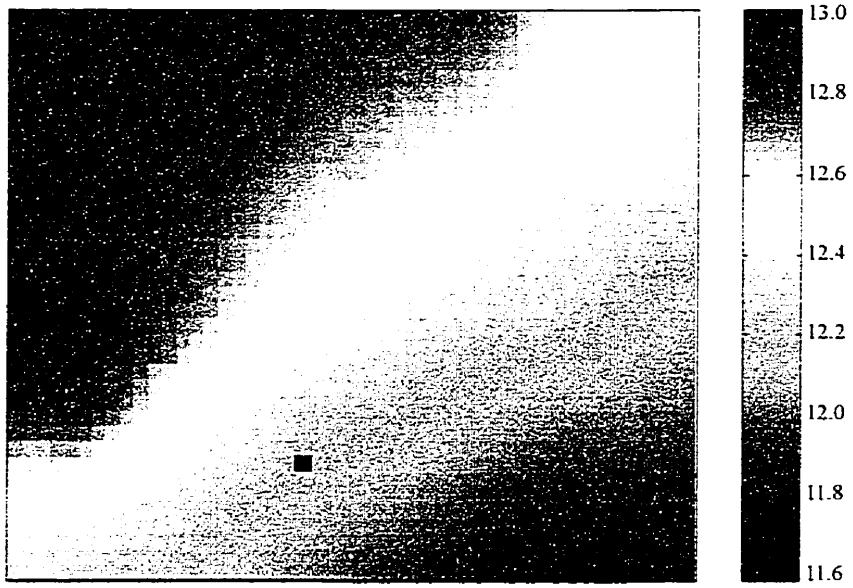


Figure 5.6 : Carte des charges hydrauliques krigées

5.7 OPTIMISATION

L'étape suivante a consisté en l'optimisation des champs de transmissivités initiaux simulés. On a choisi d'étudier deux scénarios d'échantillonnage pour le conditionnement aux charges hydrauliques. Le premier avec seulement 5 conductivités hydrauliques estimées dont l'emplacement a été déterminé aléatoirement, et le deuxième avec les 35 conductivités hydrauliques estimées. La figure 5.7 présente les deux scénarios d'échantillonnage.

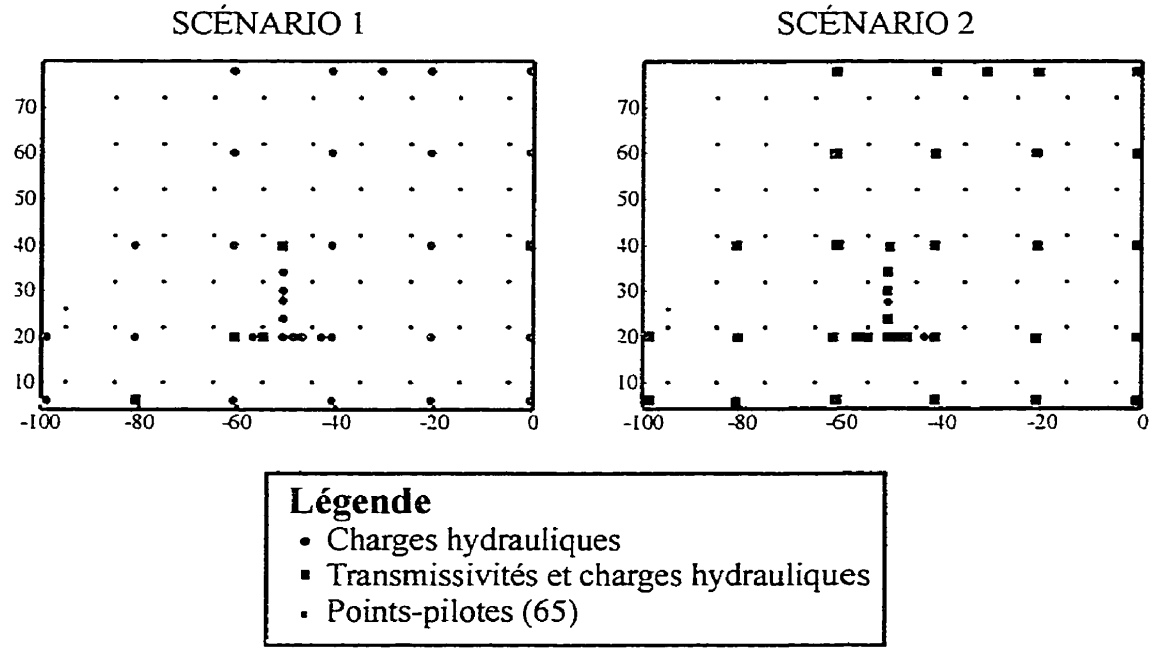


Figure 5.7 : Scénarios d'échantillonnage de l'aquifère de Lachenaie

Le nombre de points-pilotes utilisés pour l'optimisation a été fixé à 65, ce qui correspond approximativement à la même densité utilisée pour l'optimisation des aquifères synthétiques du chapitre 4. Les figures C.1 et C.2 de l'annexe présentent des exemples de conditionnement aux charges hydrauliques pour les deux scénarios considérés.

5.7.1 ÉVOLUTION DES FONCTIONS OBJECTIVES

La figure 5.8 présente les fonctions objectives finales en fonction des fonctions objectives initiales pour les deux scénarios considérés. Le tableau 5.2 présente les moyennes initiales et finales des fonctions objectives pour les 2 scénarios considérés.

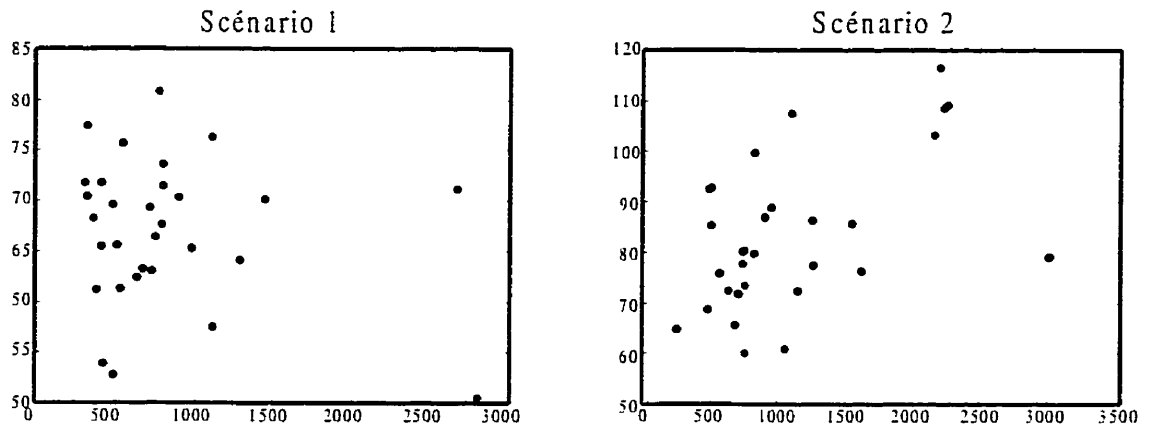


Figure 5.8 : Fonctions objectives finales en fonction des fonctions objectives initiales - aquifère de Lachenaie

Tableau 5.2 : Moyennes des fonctions objectives initiales et finales - aquifère de Lachenaie

	Scénario 1 5 conductivités estimées		Scénario 2 35 conductivités estimées	
Fonction objective	initiale	finale	initiale	finale
	810.68	66.93	1097.22	83.31

On peut voir que c'est le cas où seulement 5 conductivités hydrauliques initiales sont connues qui montre les meilleurs ajustements aux charges hydrauliques observées, et cela, aussi bien initialement qu'après le conditionnement. On peut en déduire que le fait de conditionner les conductivités hydrauliques avec des estimés qui sont entachés d'une erreur peut diminuer la précision des solutions initiales et des solutions finales.

On constate aussi que les valeurs des fonctions objectives finales sont très supérieures à celles des cas synthétiques traités au chapitre 4. Pour comprendre cet écart, il faut étudier la variation de la fonction objective aux points-observation. Le tableau C.2 de l'annexe présente, pour chaque noeud situé à l'intérieur de la grille, les pourcentages moyens initiaux et finaux de contribution à la valeur de la fonction objective. On constate que le piézomètre situé à la position (-57,20) contribue pour 61% de la valeur fonction objective finale pour le scénario 1 et 57% pour le scénario 2. Le niveau piézométrique de ce piézomètre est de 12.10 mètres. Or les deux piézomètres adjacents situés à 3 mètres à l'ouest et 3 mètres à l'est, (-61,20) et (-55,20) montrent des niveaux respectifs de 12.23 et 12.17 mètres (voir le tableau C.1). Le niveau du piézomètre semble donc faible par rapport aux deux autres puisqu'aucune solution conditionnée aux charges n'a retourné une valeur plus faible que 12.16 mètres à cet endroit pour les deux scénarios. On peut présumer une possible erreur de mesure du niveau d'eau ou du niveau du sommet du piézomètre. Si l'on ne tient pas compte de ce piézomètre, l'erreur moyenne associée à chaque piézomètre est d'environ 1.15 cm pour le scénario 1 et de

1.30 cm pour le scénario 2. Cette valeur est du même ordre de grandeur que la précision sur les charges hydrauliques.

5.7.2 EFFET DU CONDITIONNEMENT SUR LE VARIOGRAMME ET LES STATISTIQUES

La figure 5.9 montre les enveloppes des variogrammes des logarithmes des transmissivités et les variogrammes moyens initiaux et finaux pour les deux scénarios d'échantillonnage considérés. Comme il a été constaté pour les aquifères synthétiques, le conditionnement aux charges hydrauliques permet de conserver les caractéristiques spatiales des conductivités hydrauliques. La réduction de la dimension des enveloppes des variogrammes est cependant beaucoup moins nette que pour les deux aquifères synthétiques du chapitre précédent.

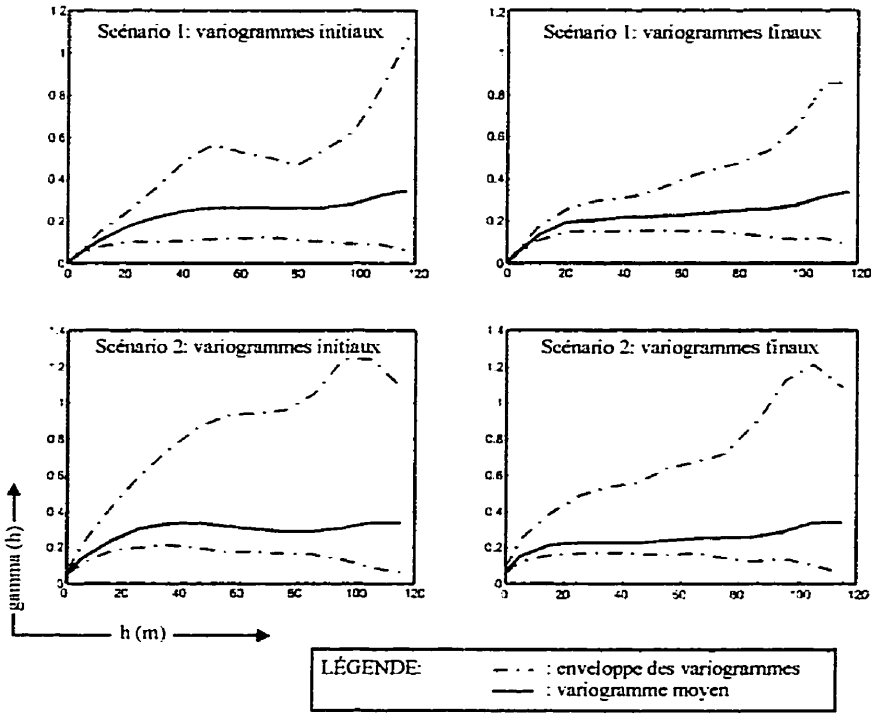


Figure 5.9 : Enveloppes des variogrammes et moyennes des variogrammes initiaux et finaux - aquifère de Lachenaie

La figure 5.10 présente les moyennes des logarithmes des conductivités hydrauliques finales en fonction des moyennes initiales et les écarts-types finaux en fonction des écarts-types initiaux. Pour le scénario 1 où 5 conductivités hydrauliques estimées sont observées, il y peu de variation entre les moyennes initiales et finales et les écarts-types initiaux et finaux. Dans le cas du scénario 2 où 35 transmissivités estimées sont utilisées, la moyenne augmente systématiquement et ce, d'autant plus que la moyenne initiale est faible. Les écarts-types diminuent aussi systématiquement.

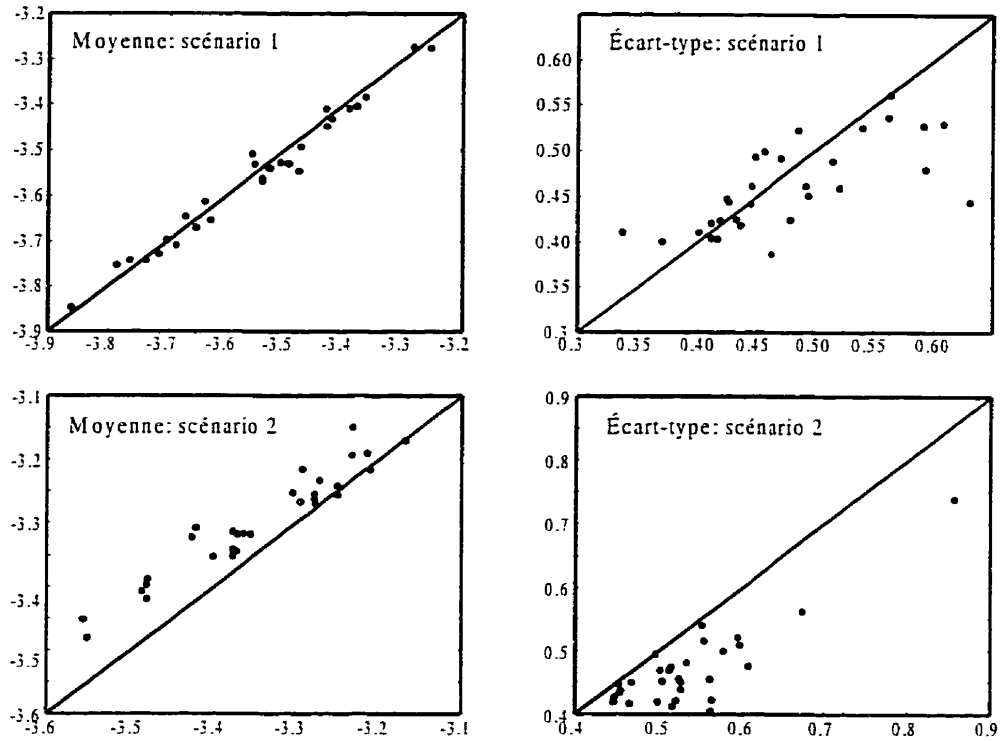


Figure 5.10 : Moyennes des logarithmes des conductivités hydrauliques finales en fonction des moyennes initiales et écarts-types finaux en fonction des écarts-types initiaux - aquifère de Lachenaie.

La figure C.3 présente les images des écarts-types des logarithmes de conductivités hydrauliques initiales et finales. On peut voir que dans le cas du scénario 1, les écarts-types initiaux sont plus faibles dans la zone qui contient des conductivités observées. Le conditionnement aux charges hydrauliques a pour effet de diminuer l'écart-type sur l'ensemble de la grille. Le scénario 2 présente des écarts-types plus faibles que le scénario 1 sur l'ensemble de la grille à cause du plus grand nombre de conductivités

hydrauliques qui conditionnent les simulations. Le conditionnement aux charges diminue faiblement les écarts-types sur les logarithmes des conductivités.

La figure C.4 présente les images des écarts-types des charges hydrauliques initiales et finales. Comme on pouvait s'y attendre, la zone la plus variable initialement se situe au centre de la grille, le plus loin possible des frontières. Les écarts-types des charges initiales sont plus faibles pour le scénario 2 que le scénario 1. Les écarts-types des charges finales sont faibles par rapport aux écarts-types initiaux. Les écarts-types aux points-observations sont plus faibles pour le scénario 1 (0.18 cm) que pour le scénario 2 (0.32 cm). Ceci s'explique par les moins bons conditionnements aux charges obtenus pour le scénario 2. Lorsque l'on s'éloigne des points-observations, les écarts-types des charges optimisées sont à peu près semblables pour les deux scénarios d'échantillonnage et varient entre 1 et 3 cm environ.

La figure C.5 présente les images des moyennes des logarithmes des conductivités. On peut voir que le scénario 1 montre initialement une image a peu près uniforme, sauf pour une petite zone en bas au centre où la moyenne est plus forte. Le conditionnement aux charges fait apparaître plusieurs contrastes de conductivités dans la zone centrale. On peut voir une bande verticale de faibles conductivités sur l'image initiale du scénario 2. Cette bande est pratiquement complètement disparue sur l'image finale où l'on voit plutôt apparaître le même genre de contrastes que pour le scénario 1.

La figure C.6 montre la moyenne des charges hydrauliques initiales et finales. On peut voir que les solutions moyennes initiales et finales pour le scénario 1 sont semblables. Pour le scénario 2, on peut voir que les isocontours 12.6 à 12.2 pour les simulations initiales sont assez fortement décalés vers le haut par rapport aux solutions conditionnées aux charges. Ceci implique qu'en moyenne, les charges initiales sont sous-estimées dans le centre de la grille.

Pour expliquer l'augmentation systématique des logarithmes des conductivités hydrauliques pour le scénario 2 qui a été observé à la figure 5.10, on se réfère aux observations qui ont été faites sur les figures C.3 à C.6. Puisque les charges sont sous-estimées systématiquement au centre de l'aquifère, le conditionnement a augmenté les conductivités dans la bande verticale de faible perméabilité visible à la figure C.5 de façon à diminuer la perte de charge dans cette zone. On peut supposer que la bande de faible perméabilité n'existe pas en réalité et est soit reliée à l'erreur d'interprétation des quatre essais in situ effectués dans cette zone (incertitude sur le coefficient de forme ou colmatage de la crépine), ou soit au manque de représentativité des essais situés dans cette zone (conductivités hydrauliques plus faibles que la valeur moyenne de la zone). Aussi, on ne peut exclure totalement la possibilité que certaines erreurs de mesure des charges soient à l'origine de la disparition de cette zone.

5.7.3 CHEMINEMENT DE PARTICULES

Pour chacune des simulations obtenues, une particule a été placée à la limite de l'étang à la position (-90,76), puis les trajets et les temps d'arrivée ont été obtenus à l'aide d'un simulateur. La figure C.7 de l'annexe C présente les trajets de particules non-réactives.

On peut voir que les positions d'arrivée initiales des particules pour le scénario 1 varient entre -40 et -20 environ tandis que les positions d'arrivée varient entre -40 et -25 environ lorsque les charges hydrauliques sont conditionnées. Pour le scénario 2, les positions d'arrivée initiales et optimisées sont semblables et se situent entre -40 et -25 approximativement. Toutefois, la bande de trajets est moins large dans le cas optimisé.

La figure C.8 présente les histogrammes des temps d'arrivée initiaux et optimisés. Le tableau 5.3 présente les statistiques initiales et finales des temps de parcours. Les temps de parcours sont exprimés en jours. Ces temps ont été calculés en considérant une porosité efficace uniforme de 0.38 qui correspond environ à la porosité moyenne du site (Chapuis, communication personnelle, 1998).

Tableau 5.3 : Statistiques sur les temps de parcours initiaux et finaux - aquifère de Lachenaie

	Moyenne		Écart-type	
Scénario 1	65.59	65.99	14.38	14.26
Scénario 2	70.16	64.99	19.56	18.68

On peut voir que pour le scénario 1 (figure C.8), la moyenne et l'écart-type des temps d'arrivée initiaux et finaux sont semblables. Les temps d'arrivée initiaux et finaux sont compris entre 40 et 100 jours. Dans le cas du scénario 2, initialement, la moyenne et l'écart-type des temps d'arrivée est supérieure au scénario 1. Le conditionnement aux charges hydrauliques diminue la moyenne et l'écart-type des temps d'arrivée. Ce résultat était prévisible puisque, comme il a été observé à la section précédente, la bande verticale de faible perméabilité disparaît avec le conditionnement. Les temps d'arrivée initiaux sont compris entre 40 et 136 jours initialement et 37 et 127 jours après le conditionnement.

CHAPITRE 6

CONCLUSIONS ET RECOMMANDATIONS

L'algorithme qui a été réalisé dans cette étude a permis d'obtenir des simulations conditionnelles aux transmissivités et aux charges hydrauliques observées. L'algorithme du gradient conjugué qui constitue le cœur du programme d'optimisation est particulièrement efficace et permet d'obtenir des solutions acceptables dans un nombre d'itérations restreint.

La méthode a été utilisée pour obtenir, à partir de deux aquifère synthétiques, 800 simulations qui ont permis de faire ressortir les caractéristiques suivantes.

Premièrement, une bonne solution initiale ne garantit pas que le conditionnement aux charges sera meilleur que pour une solution initiale dont les charges sont éloignées des charges hydrauliques observées. Plus le nombre de transmissivités observées est grand, plus la solution initiale et la solution finale sont bonnes. Aussi, plus la portée du variogramme des transmissivités est grande, plus le conditionnement final aux charges est grand. Ceci laisse croire que l'optimisation rencontre moins d'optimums locaux lorsque la portée est grande.

Le conditionnement aux charges n'affecte pas les paramètres du variogramme. La méthode conditionne même les simulations aux variogrammes expérimentaux des deux

«réalités» étudiées et ce, d'autant plus que le nombre de transmissivités et de charges hydrauliques connues augmente.

Le nombre de transmissivités observées a un effet conditionnant sur les transmissivités simulées et, dans une moindre mesure, sur les charges hydrauliques résultantes. Plus la portée du variogramme est grande et plus cet effet est fort. Le conditionnement aux charges fournit des solutions acceptables aux points-observations mais augmente peu le conditionnement dans les zones sans observations.

L'optimisation permet de reproduire en moyenne les contrastes de transmissivités qui contrôlent les patrons d'écoulement. Cet effet est plus visible lorsque la portée du variogramme est plus élevée. Aussi, plus le nombre de transmissivités est élevé et mieux les charges hydrauliques «réelles» sont reproduites en moyenne par l'optimisation.

Le conditionnement aux charges permet de réduire l'incertitude sur les trajets de particules non-réactives. La diminution de l'incertitude sur les chemins est maximale lorsque la portée du variogramme est grande et que seulement un petit nombre de transmissivités sont connues. Le conditionnement a peu d'effet sur l'incertitude des temps d'arrivée des particules.

Des essais de perméabilités in situ ont été réalisés sur l'aquifère de Lachenaie pour appliquer la méthode à un cas réel. Les simulations conditionnelles ont été effectuées sur

une grille de 0.67 mètres de côté afin de respecter la taille du support sur lequel les essais de perméabilité sont effectués. Le changement d'échelle entre la grille simulée et la grille utilisée au simulateur d'écoulement (2 mètres de côté) a été effectué en faisant une moyenne géométrique. Pour chacun des deux scénarios d'échantillonnage (5 conductivités hydrauliques et 37 charges hydrauliques connues et 35 conductivités hydrauliques et 37 charges hydrauliques connues), on a optimisé ces 30 simulations et étudié les résultats obtenus.

Le scénario 2 dans lequel 35 conductivités hydrauliques estimées sont utilisées pour le conditionnement présente de moins bons conditionnement aux charges que le scénario 1, où 5 conductivités hydrauliques seulement sont utilisées. Ce résultat est fort probablement relié au manque de représentativité des conductivités hydrauliques fournies par les essais in situ. Il n'est donc pas nécessairement avantageux d'utiliser un grand nombre de conductivités hydrauliques pour le conditionnement aux charges lorsque les conductivités hydrauliques sont entachées d'erreur.

Les solutions finales obtenues sont moins précises que celles obtenues pour les aquifères synthétiques. On peut relier une grande partie de ce résultat à un seul piézomètre qui est responsable à lui seul de près de 60% de la valeur de la fonction objective finale pour les 2 scénarios. Le niveau piézométrique mesuré semble faible par rapport à deux autres mesures situées trois mètres de part et d'autre. On peut donc penser qu'une erreur de

mesure cause cet effet. Si l'on ne tient pas compte de cette mesure, l'erreur moyenne associée à chaque piézomètre est d'environ 1.15 cm pour le scénario 1 et de 1.30 cm pour le scénario 2, ce qui est de l'ordre de grandeur de la précision des mesures de charge.

On dénote une augmentation systématique de la perméabilité moyenne lors de l'optimisation pour le scénario 2. Cette augmentation est associée à une bande verticale de faible perméabilité qui est effacée par le conditionnement aux charges. On peut donc supposer que cette bande est un artefact créé par la faible représentativité des valeurs de conductivité hydraulique fournies par les essais in situ dans cette zone. Cette disparition a pour effet de diminuer les temps de parcours des particules pour le scénario 2.

Les conditions frontières (4 frontières à charges constantes) utilisées pour les simulations conditionnent déjà fortement les paramètres de l'écoulement. Malgré cela, on dénote une diminution de l'incertitude sur les trajets pour le scénario 1. Dans le cas du scénario 2, cette diminution est plus faible.

Le programme d'optimisation qui a été réalisé pourrait servir dans le cadre d'études similaires. Il serait fort intéressant de faire une étude avec des simulations en écoulement transitoire. Si la méthode se révélait efficace, une étude de cas pourrait être réalisée en utilisant les données de l'essai de pompage qui a été effectué sur le site de Lachenaie.

Ceci permettrait de comparer les résultats obtenus pour le régime transitoire et le régime permanent. Pour réaliser cette étude, il faudrait utiliser un logiciel de simulation d'écoulement opérant aussi bien en régime transitoire qu'en régime permanent.

L'ensemble des résultats obtenus sur les aquifères synthétiques et sur Lachenaie tendent à montrer l'utilité moindre d'effectuer de nombreux tests de conductivités hydrauliques par rapport à des mesures de charge, qui sont en général plus précises. Les charges permettent bien sûr de mieux définir les trajets et aussi, par la procédure d'optimisation présentée, les contrastes de conductivité hydraulique. Une valeur moyenne de conductivité hydraulique, obtenue par quelques tests, ou préférablement par un essai de pompage, permet ensuite de donner un ordre de grandeur sur les temps de parcours d'une particule non-réactive. Le fait de connaître plusieurs conductivités hydrauliques ne permet pas vraiment de décroître l'incertitude sur les temps de parcours.

CHAPITRE 7

BIBLIOGRAPHIE

ANDERSON, M.P. et WOESSNER, W.W. (1992). Applied groundwater modeling, simulation of flow and advective transport, Academic press, 381 p.

AHMED, S. et DE MARSILY, G. (1987). Comparison of geostatistical methods for estimating transmissivity using data on transmissivity and specific capacity, Water Resources Research, Vol 23, No 9, 1717-1737.

BOUWER, H. et RICE, R.C. (1976). A slug test for determining hydraulic conductivity of unconfined aquifers with completely or partially penetreting wells, Water Resources Research, Vol. 12, No 3, 423-428.

BOUWER, H. (1989). The bouwer and rice slug test - an update, Ground Water, Vol. 27, No 3, 304-309.

BORGMAN, L., TAHERI, M. et HAGAN, R. (1984). Three dimensional frequency domain simulation of geological variables, Geostatistics for Natural Resource Characterisation, Part 1, D. Reidel Publishing, 517-541

CARRERA, J. MEDINA, A. et SANCHEZ-VILA, X. (1992). Geostatistical formulation of groundwater coupled inverse problems, Geostatistics Troia 92, Amilcar Soares Editor, 779-792

CHAPUIS, R.P. (1989). Shape factors for permeability tests in boreholes and piezometers, Ground Water, Vol. 27, No 5, 647-654

CLIFTON, P.M. et NEUMAN, S.P. (1982). Effects of kriging and inverse modeling on conditional simulation of the avra valley aquifer in southern arizona, Water Resources Research, Vol. 18, No 4, 1215-1234.

COOLEY, R.L. (1977). A method of estimating parameters and assessing reliability for models of steady-state groundwater flow, Water Resources Research, Vol. 13, No 2, 318-324.

DAGAN, G. (1985). Stochastic modeling of groundwater flow by unconditional and conditional probabilities: the inverse problem, Water Resources Research, Vol. 21, No 1, 65-72.

DAGAN, G. et RUBIN, Y. (1988). Stochastic identification of recharge, transmissivity, and storativity in aquifer transcient flow: a quasi-steady approach, Water Resources Research, Vol. 24, No 10, 1698-1710.

DAVIS, M.W. (1987). Production of conditional simulations via the LU triangular decomposition of the covariance matrix, Mathematical Geology, Vol. 19, No 2, 91-98.

DELFINER, P. et DELHOMME, J.P., (1973). Optimum interpolation by kriging. Display and Analysis of Spatial Data, J.C. Davis and M.J. McCullagh, John Wiley, New York, 96-114.

DELHOMME, J.P. (1978). Kriging in hydrosciences, Advances in Water Resources, Vol. 1, No 1, 251-266.

DELHOMME, J.P. (1979). Spatial variability and uncertainty in groundwater flow parameters: a geostatistical approach, Water Resources Research, Vol. 15, No 2 269-280.

DE MARSILY, G. (1981). Quantitative hydrogeology (groundwater hydrology for engineers), Academic Press, 440 p.

DE MARSILY, G., LAVEDAN, G., BOUCHER, M. et FASANINO, G. (1984). Interpretation of interference tests in a well field using geostatistical techniques to fit the permeability distribution in a reservoir model, Geostatistics for Natural Resources Characterization, D. Reidel Publishing Co, Hingham (Mass.), 831-849.

DESBARATS, A.J. (1987). Numerical estimation of effective permeability in sand-shale formations, Water Resources Research, Vol. 23, No 2,273-286.

DESBARATS, A.J. et SRIVASTAVA, R.M. (1991). Geostatistical characterization of groundwater flow parameters in a simulated aquifer, Water Resources Research, Vol. 27, No 5,687-698.

DEUTSCH C.V. et JOURNEL, A.G. (1992). GSLIB : Geostatistical software library and user's guide, Oxford University Press,

ECHAABI, J., TROCHU, F. et GAUVIN, R. (1995). A general strenght theory for composite materials based on dual kriging interpolation, Journal of Reinforced Plastics and Composites, Vol. 14, No 3. 211-232.

EASLEY, D.H., BORGMAN, L.E. et SHIVE, P.N. (1990). Geostatistical simulation for geophysical applications-part 1: simulation, Geophysics, Vol. 55, No 11, 1435-1440.

FREEZE, A.R. et CHERRY, J.A (1979). Groundwater, Prentice-Hall inc, Englewood Cliffs, 604 p.

GAMBOLATI, G. et VOLPI, G. (1979a). Groundwater contour mapping in venice by stochastic interpolators 1. Theory, Water Resources Research, Vol. 15, No 2., 281-290.

GAMBOLATI, G. et VOLPI, G. (1979b). A conceptual deterministic analysis of the kriging technique in hydrology, Water Resources Research, Vol. 15, No 3, 625-629.

GELHAR, L.W. (1993). Stochastic subsurface hydrology, Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 390 pages.

GILBERT J.C. et NOCEDAL, J. (1992). Global convergence properties of conjugate gradients methods for optimisation, SIAM Journal of Optimisation, Vol. 2, No 1, 21-42

GOHIN, F. (1988). Analyse structurale de la température de l'eau de surface de la mer, Geostatistics for Natural Resource Characterisation, Part 2, D. Reidel Publishing Co., 433-444.

GOMEZ-HERNANDEZ, J.J., CAPILLA, J.E. et SAHUQUILLO, A. (1996). Inverse conditional simulation, Wollongong 1996, Part 1, E.Y. Baafi and N.A. Schofield ed., 282-291.

GROLEAU, P. (1995). Feuille de calcul EXCEL pour les essai in situ, Rapport de stage, École Polytechnique de Montréal, Canada

GUARASCIO, M. (1975). Improving the uranium deposits estimations (the novazza case), Advanced Geostatistics in the Mining Industry, D. Reidel Publishing Co., Holland, 351-367

HAAS, A., DUBRULE, O. (1994). Geostatistical inversion-a sequential method of stochestic reservoir modelling constrained by seismic data, first break, Vol 12, No 11, 561-569

HOEKSEMA, R.J. et KITANIDIS, P.K. (1984). An application of the geostatistical approach to the inverse problem in two-dimensional groundwater modeling, Water Resources Research, Vol. 20, No 7, 1003-1020.

HOEKSEMA, R.J. et KITANIDIS, P.K. (1985). Comparison of gaussian conditional mean and kriging estimation in the geostatistical solution of the inverse problem, Water Resources Research, Vol. 21, No 6.

HUGHSON, L., HUNTLEY, D. et RAZACK, M. (1996). Cokriging limited transmissivity data using widely sampled specific capacity from pump tests in an alluvial aquifer, Ground Water, Vol. 34, No 1, 12-18

JOURNEL,A.G. et HUIJBREGTS, E.G. (1978). Mining geostatistics, Academic Press, London, England, 600 p.

JUPP, D.L.B., STRAHLER, A.H. et WOOKCOCK, C.E. (1988). Autocorrelation and regularisation in digital images part 1. basic theory, IEEE Transcations on Geosciences and Remote Sensing, Vol. 26, No 4, 463-473.

JUPP, D.L.B., STRAHLER, A.H. et WOOKCOCK, C.E. (1989). Autocorrelation and regularisation in digital images part 2., IEEE Transcations on Geosciences and Remote Sensing, Vol. 27, No 3, 247-258.

KEIDSER, A., ROSBJERG, D. , JENSEN, K.H et BITSCH, K. (1990). A joint kriging and zonation approach to inverse groundwater modelling, IAHS Publication no 195, 171-184.

KEIDSER, A. et ROSBJERG, D. (1991). A comparison of four approaches to groundwater flow and transport parameter identification, Water Resources Research, Vol. 27, No 9, 2219-2232.

KIRKPATRICK, S., GELATT, C.D. et VECCHI, M.P. (1983). Optimisation by simulated annealing, Science, Vol. 220, No 4598, 671-680.

KITANIDIS, P.K. et VOMVORIS, E.G. (1983). A geostatistical approach to the inverse problem in groundwater modeling (steady-state) and one-dimensional simulations, Water Resources Research, Vol. 19, No 3, 677-690.

LÉVY, P., (1937). Théorie de l'addition des variables aléatoires, Gauthier-Villars, Paris, 328 p.

LI, J., ELSWORTH, D. (1995). A modified gauss-newton method for aquifer parameter identification, Ground Water, Vol. 33, No 4, 662-668.

LITCHY, R.W. et KARLINGER, M.R. (1990). Climate factor for small-basin flood frequency, Water Resources Bulletin, Vol. 26, No 4, 577-586

LUENBERGER, D.G., (1973). Introduction to linear and nonlinear programming, Addison-Wesley Publishing Company, Readings, Mass. 356 p.

MARSH LA VENUE, A. et PICKENS, J.F. (1992). Application of a coupled adjoint sensitivity and kriging approach to calibrate groundwater flow model, Water Resources Research, Vol. 28, No 6, 1543-1569

MATHERON, G. (1962). Traité de géostatistique appliquée, Éditions Technip, Paris, 331 p.

MATHERON, G. (1965). Les variables régionalisées et leur estimation, Masson, Paris, 305 p.

MATHERON, G. (1971). La théorie des variables régionalisées et ses applications, Les cahiers du centre de morphologie mathématique, Fasc. 5, Fontainebleau, 212 p.

MATHERON, G. (1973). The intrinsic random functions and their applications. Advances in Applied Probability, Vol. 5, 439-468.

MIZELL, S.A. (1980). Stochastic analysis of spatial variability in two-dimensional groundwater flow with implications for observation-well-network design, Thèse présentée au New Mexico Institute of Mining and Technology, Socorro, New Mexico, Etats-Unis.

MIZELL, S.A., GUTJAHR, A.L. et GELHAR, L.W. (1982). Stochastic analysis of spatial variability in two-dimensional steady groundwater flow assuming stationary and nonstationary heads, Water Resources Research, Vol. 18, No 4, 1053-1067.

NEUMAN, S.P. (1984). Role of geostatistics in subsurface hydrology, Geostatistics for Natural Resource Characterisation, Part 2, D. Reidel Publishing, 787-816.

PRESS, W.H.,TEUKOLSKY, S.A., VETTERLING, W.T. et FLANNERY, B.P. (1986). Numerical recipes in FORTRAN, Cambridge University Press, 963 p.

RAUTMAN, C.A. et ISTOK, J.D. (1996). Probabilistic assessment of ground-water contamination: 1. geostatistical framework, Ground Water, Vol. 34, No 5, 899-909.

ROUHANI, S. (1985). Variance reduction analysis, Water Resources Research, Vol. 21, No 6, 837-846.

RUBIN, Y. et DAGAN, G. (1987). Stochastic identification of transmissivity and recharge in steady groundwater flow. 1. theory, Water Resources Research, Vol. 23, No 7, 1185-1192.

RUBIN, Y. et DAGAN, G. (1987). Stochastic identification of transmissivity and recharge in steady groundwater flow. 2. case study, Water Resources Research, Vol. 23, No 7, 1193-1200.

RUBIN, Y. et GOMEZ-HERNANDEZ, J.J. (1990). A stochastic approach to the problem of upscaling of conductivity in disordered media: theory and unconditional numerical simulations, Water Resources Research, Vol. 26, No. 4, 691-701.

SAMPER, J., CUCHI, J.-C. et PONCELA, R. (1992). Estimation of spatial cross-covariances by maximum likelihood cross-covalidation: application to hydraulic heads and transmissivities in a sandy aquifer, Geostatistics Troia 92, Amilcar Soares Editor, 721-732

SAMRA, J.S., RICHTER, J., GILL, H.S. et ANLAUF, R. (1990). Spatial dependence of soil sodicity and tree growth in a natric haplustalf, Soil Science Society of America Journal, Vol. 54, No 5, 1228-1233.

SCHAFMEISTER-SPIERLING, M.-TH. et BURGER, H. (1989). Spatial simulation of hydraulic parameters for fluid flow and transport models, Geostatistics, Vol. 2, M. Armstrong (ed.), 629-638.

SHIVE, P.N., LOWRY, T., EASLEY, D.H. et BORGMAN, L.E. (1990). Geostatistical simulation for geophysical applications-Part II: geophysical modeling, Geophysics, Vol. 55, No 11, 1441-1446.

SILLIMAN, S.E. et WRIGHT, A.L. (1988). Stochastic analysis of paths of high hydraulic conductivity in porous media, Water Resources Research, Vol. 24, No 11, 1901-1910.

SINCLAIR, A.J. et WERNER, L.J. (1978). Geostatistical investigation of the kutcho creek chrysotile deposit, northen B.C., Mathematical Geology, Vol. 10, No 3, 273-288.

SOULIÉ, M. (1984). Geotechnical applications in geotechnics, Geostatistics for Natural Resource Characterisation, Part 2, D. Reidel Publishing Co., 703-730.

SINCLAIR, A.J. et DERAIME, J.R. (1980), A 2-dimensional geostatistical study of a skarn deposit, Yukon territory, Canada, Advanced Geostatistics in the Mining Industry, D. Reidel Publishing Co., Holland, 369-379

VILLENEUVE, J.-P., MORIN, G., BOBEE, B., LEBLANC, D. et DELHOMME, J.-P. (1979). Kriging in the design of streamflow sampling networks, Water Resources Research, Vol. 15, No. 2, 1833-1840.

VOLPI, G. et GAMBOLATI, G. (1979). Groundwater contour mapping in venice by stochastic interpolators 2. results, Water Resources Research, Vol. 15, No 2, 291-297.

WELLMER, F.-W. et GIROUX, G.H. (1980). Statistical and geostatistical methods applied to the exploration work of the Nanisivik Zn-Pb mine, Baffin island, Canada. Mathematical Geology, Vol. 12, No 4, 321-337

WEN, X.-H., GOMEZ-HERNANDES, J.J., CAPILLA, J.E. et SAHUQUILLO, A. (1996). Significance of conditioning to pieziometric head data for predictions of mass transport in groundwater modeling, Mathematical Geology, Vol. 28, No 7, 951-968.

YEH, T.-C.J., GUTJAHR, A.L. et JIN, M. (1995). An iterative cokriging-like technique for groudwater flow modeling, Ground Water, Vol. 33, No 1, 33-41

YEH, T.-C.J. et MOCK, P.A. (1996). A structured approach for calibrating steady-state groundwater flow models, Ground Water, Vol. 34, No 3, 444-450.

YEH, W.W.-G., YOON, Y.S. et LEE, K.S. (1983). Aquifer parameter identification with kriging and optimum parameterization, Water Resources Research, Vol. 19, No 1, 225-233.

ANNEXE A

PROGRAMME D'INVERSION

Description du fonctionnement du programme NLIN.FOR

Problématique

La transmissivité, la charge hydraulique et les conditions frontières sont les paramètres qui permettent de définir les conditions d'écoulement dans un aquifère donné. Tandis que les conditions frontières et les charges hydrauliques sont généralement bien connues, les transmissivités hydrauliques sont pour leur part beaucoup plus difficiles et coûteuses à estimer.

Les simulations conditionnelles ou non conditionnelles permettent de reproduire les caractéristiques statistiques des conductivités hydrauliques ou des transmissivités dans un champ donné. Cependant, rien ne garantit que le champ de transmissivités simulé permettra de reproduire les charges hydrauliques qui sont observées sur ce champ une fois soumis à un simulateur d'écoulement.

Objectifs

On cherche donc une méthode qui permettrait de simuler les transmissivités avec leurs paramètres statistiques dans un champ donné tout en respectant les contraintes de charges hydraulique qui peuvent être imposées sur le champ.

Méthodologie

Il s'agit de combiner les simulations géostatistiques avec un simulateur d'écoulement (MODFLOW) dans un processus itératif.

Partant d'une simulation géostatistique (conditionnelle ou non) il s'agit de modifier chaque point simulé du champ de manière à s'approcher des charges observées.

Programme NLIN - Description

Le programme principal NLIN relie les différentes sous-routines de MODFLOW et la routine de minimisation de la fonction objective par la méthode du gradient conjugué. Le programme MODFLOW a été modifié de telle sorte que l'ensemble des opérations répétitives ne soit exécuté qu'une fois (lecture des fichiers paramètres, allocation de l'espace mémoire, définition des conditions frontières, etc.). L'appel de certaines sous-routines de MODFLOW se fait donc directement dans le programme principal avant la minimisation de la fonction objective.

Le programme NLIN est divisé en douze parties qui sont décrites en détail dans les pages qui suivent. Certaines variables ou commandes du programme principal qui sont marquées d'une astérisque, font référence au programme MODFLOW et ne sont mentionnées que sommairement dans la description. Le lecteur est invité à consulter le manuel de MODFLOW pour des explications plus détaillées de ces commandes ou variables.

1 - DÉCLARATION DES VARIABLES GLOBALES ET LOCALES

1.1 - VARIABLES GLOBALES

Les variables globales sont celles qui sont communes à plusieurs sous-routines. Elles sont inclues dans les blocs COMMON. La liste suivante contient l'ensemble des variables du programme principal qui sont déclarées dans un COMMON.

COMMON x(60000)

NLIN MODF

EVALOBJ

GRADIENT

ECOUL

ECOUL2

X: Le vecteur X contient l'ensemble des variables nécessaires au fonctionnement de MODFLOW. De manière générale, X doit être 10 à 20 fois plus grand que le nombre de noeuds de la simulation.

COMMON/CBAS1DF/ ISUM, ITMUNI, NCOL, NROW, NLAY, NODES, INBAS, IOUT, NPER, IUNIT(24), TOTIM, HEADNG

NLIN *MODF*

EVALOBJ

GRADIENT

ECOUL

ECOUL2

ISUM: Indique le nombre du plus petit élément de X qui n'a pas été alloué. Après chaque appel de MODF, il faut réinitialiser ISUM à sa valeur après la sous-routine BAS1RP.

ITMUNI: Code pour le unités de temps dans MODFLOW. Généralement assigné à zéro pour unités non définies.

NCOL: Nombre de colonnes dans la grille, au maximum 50.

NROW: Nombre de rangées de la grille, au maximum 50.

NLAY: Nombre de couches de la grille. Le programme est conçu pour ne supporter qu'une seule couche.

NODES: Nombre de cellules de la grille.

INBAS: Numéro d'unité dans lequel est lu le fichier paramètre .BAS de MODFLOW. Dans notre cas, INBAS = 1.

IOUT: Numéro d'unité pour les sorties de MODFLOW. Le simulateur d'écoulement a été modifié de telle sorte qu'aucune sortie de MODFLOW n'est allouée pour plus de rapidité d'exécution.

NPER: Nombre de périodes dans la simulation, est généralement fixé à 1.

IUNIT(24): Unité d'entrée dans chaque option de MODFLOW, 11 pour le fichier d'entrée .BCF qui contrôle les paramètres de la simulation et 19 pour le fichier d'entrée .SIP qui contrôle les paramètres de la sous-routine de solution des équations linéaires.

TOTIM: Temps écoulé dans la simulation.

HEADNG: Titre de la simulation imprimé dans le fichier de sortie. Cette variable est lue dans le fichier d'entrée .BAS mais n'est pas utilisée par le suite.

COMMON/CBAS1AL/ LENX, LCHNEW, LCHOLD, LCIBOU, LCCR, LCCC, LCV, LCHCOF, LCRHS, LCDELR, LCDELC, LCSTRT, LCBUFF, LCIOFL, ISTRT

NLIN *MODF*

EVALOBJ

GRADIENT

ECOUL

ECOUL2

LENX: Longueur du vecteur X, dans notre cas LENX = 60000.

LCHNEW: Position du premier élément de la matrice HNEW dans le vecteur X.

LCHOLD: Position du premier élément de la matrice HOLD dans le vecteur X.

LCIBOU: Position du premier élément de la matrice IBOUND dans le vecteur X.

LCCR: Position du premier élément de la matrice CR dans le vecteur X, qui représente la conductivité le long des rangées de la grille.

LCCC: Position du premier élément de la matrice CC dans le vecteur X, qui représente la conductivité le long des colonnes de la grille.

LCCV: Position du premier élément de la matrice CV dans le vecteur X, qui représente la conductivité verticale de la grille.

LCHCOF: Position du premier élément de la matrice HCOF dans le vecteur X.

LCRHS: Position du premier élément de la matrice RHS dans le vecteur X.

LCDELR: Position du premier élément de la matrice DELR dans le vecteur X.

LCDELC: Position du premier élément de la matrice DELC dans le vecteur X.

LCSTRT: Position du premier élément de la matrice STRT dans le vecteur X.

LCBUFF: Position du premier élément de la matrice BUFF dans le vecteur X.

LCIOFL: Position du premier élément de la matrice IOFLG dans le vecteur X.

ISTRT: Identificateur qui est égal à 0 si les rabattements ne sont pas sauvés ou à tout autre chiffre si les rabattements doivent être sauvés. Dans notre cas, ISTRT = 1.

COMMON/CBCF3AL/ LCSC1, LCHY, LCBOT, LCTOP, LCSC2, LCTRPY, ISS, IBCFBC, LCWETD, IWDFLG, LCCVWD, WETFCT, IWETIT, IHDWET, HDRY, IBCB

NLIN *MODF*

EVALOBJ

GRADIENT

ECOUL

ECOUL2

LCSC1: Position du premier élément de la matrice SC1 dans le vecteur X.

LCHY: Position du premier élément de la matrice HY dans le vecteur X.

LVBOT: Position du premier élément de la matrice BOT dans le vecteur X.

LCTOP: Position du premier élément de la matrice TOP dans le vecteur X.

LCSC2: Position du premier élément de la matrice SC2 dans le vecteur X.

LCTRPY: Position du premier élément de la matrice TRPY dans le vecteur X.

ISS: Identificateur qui est lu dans le fichier d'entrée .BCF, si ISS = 0, la simulation est en transitoire, si ISS est égal à tout e autre valeur, la simulation est en régime permanent. Actuellement, ISS = 1 et le programme n'a pas été testé en transitoire.

IBCFBC: Identificateur qui détermine si le terme d'écoulement par cellule doit être enregistré dans le fichier de sortie. Dans notre cas, IBCFBC = 0, pas d'enregistrement. Pour plus de détails, voir le manuel de MODFLOW section sur le BLOC CENTERED FLOW PACKAGE.

LCWETD: Nouvelle variable qui vient d'une modification du module BCF. Le manuel décrit le module BCF1 tandis que le programme utilise BCF3.

COMMON/CBAS1RP/VBVL, IHEFDM, IDDNFM, IHEDUN, IDDNUN

NLIN *MODF*

EVALOBJ

GRADIENT

VBVL: Entrée pour le budget volumique. Voir la description du module BAS1RP.

IHEFDM: Code pour déterminer le format dans lequel les charges sont sauvées. Dans notre cas, ce n'est pas utilisé.

IDDNFM: Code pour déterminer le format dans lequel les rabattements sont sauvées. Dans notre cas, ce n'est pas utilisé.

IHEDUN: Numéro d'unité dans lequel sauvegarder les charges hydrauliques sans les formater. Dans notre cas, ce n'est pas utilisé.

IDDNUN: Numéro d'unité dans lequel sauvegarder les rabattements sans les formater. Dans notre cas, ce n'est pas utilisé.

COMMON/CBAS1ST/ NSTP, DELT, TSMULT, PERTIM, KKPER

NLIN *MODF*

EVALOBJ

GRADIENT

NSTP: Nombre de sauts de temps dans chaque période de stress.

DELT: Longueur du saut de temps.

TSMULT: Multiplicateur qui sert à aller d'un saut de temps à un autre.

PERTIM: Temps écoulé durant la période de stress.

KKPER: Compteur de périodes de stress.

COMMON/CSBAS1D/ RES_H(50,50), IT

NLIN *SBAS1D*

LIRE

EVALOBJ

GRADIENT

RES_H: Dimension(50,50), contient les charges hydrauliques pour chaque cellule de la grille.

IT: Variable qui contient un identificateur de position dans le vecteur X de MODFLOW. Avant chaque appel de MODFLOW on doit réassigner la valeur de ISUM à IT.

COMMON/CSIMUL/ SIMUL(50,50), PI(625), SE2, EPS, VRAICH(50,50), OBS(200), SIGMA, PEN, PACK, HEAD, DRAW

NLIN *MODF*

EVALOBJ *KRIGE*

GRADIENT *KRIGE*

SIMUL: Dimension(50,50), contient la grille de transmissivités simulées initiales. Chaque itération de la routine d'optimisation modifie les transmissivités jusqu'à la solution finale.

PI: Dimension(625), contient les transmissivités initiales des points-pilotes.

SE2: Contient la valeur de la fonction objective. C'est la sommation des erreurs au carré entre la charge hydraulique réelle et simulée aux noeuds de la grille ou elles est connue.

EPS: Epsilun qui est ajouté aux points-pilotes pour le calcul du gradient. On a avantage à utiliser une valeur qui est du même ordre de grandeur que le critère de convergence de MODFLOW.

VRAICH: Dimension(50,50), contient les charges hydrauliques "vraies", qui proviennent des transmissivités "vraies".

OBS: Dimension(200), contient les transmissivités observées (qui ne changeront pas tout au long de l'optimisation) et les points-pilotes (dont les valeurs changent au long de l'optimisation).

SIGMA: Contenait la variance de krigeage de chaque point de la grille pour le tirage de valeurs aléatoires dans la version du programme d'optimisation qui utilisait le simulated annealing. Dans notre cas, elle n'est plus utilisée.

PEN: Facteur multiplicatif qui sert dans la fonction de pénalité de la fonction objective. Selon la version du programme utilisée, cette variable peut ne pas être utilisée.

PACK: Dimension(24*30), contient les noms des fichiers de paramètres de MODFLOW.

COMMON/ISIMUL/ ICODE(2500), INM(100,3), INO(200,3), XDIM, YDIM, NBM, NNN, KKK, ICOUNT

NLIN *MODF*

EVALOBJ *KRIGE*

GRADIENT *KRIGE*

MAT_K

ECOUL

ECOUL2

ICODE: Dimension(2500), contient les indices de chaque noeud de la grille qui décrit la nature de chaque noeud. 1 étant les transmissivités et charges observées, 2 étant les points-pilotes, 4 les charges hydrauliques observées et 0, le reste des points à estimer.

INM: Dimension(100,3), contient les indices des points-pilotes. Dans la première colonne, on a les indices du vecteur, dans la deuxième et la troisième colonne, on retrouve les indices des noeuds.

INO: Dimension(200,3), contient les indices des points-pilotes et des observations. Dans la première colonne, on a les indices du vecteur, dans la deuxième et la troisième colonne, on retrouve les indices des noeuds.

XDIM: Nombre de colonnes de la grille de transmissivités.

YDIM: Nombre de rangées de la grille de transmissivités.

NBM: Nombre de noeuds de la grille de transmissivités.

NNN: Nombre de points-pilotes de la grille.

KKK: Nombre de points-pilotes et de transmissivités observées de la grille.

ICOUNT: Compteur du nombre d'itération effectué par la sous-routine d'optimisation. Est utilisé pour que EVALOBJ ne s'exécute pas à la première itération.

COMMON/CKRIGE/ PKM(100,100), C0, C, A

NLIN *KRIGE*

MAT_K

GAUSS_J

PKM: Dimension(100,100), contient la matrice K du krigeage. Cette matrice ne change jamais tout au long de l'optimisation puisque toutes les observations sont utilisées pour le krigeage de chaque point.

C0: Effet pépite du variogramme des transmissivités.

C: Plateau du variogramme des transmissivités.

A: Portée du variogramme des transmissivités.

1.2 - VARIABLES LOCALES

Les variables locales sont celles qui ne sont utilisées que par le programme principal, ou qui sont envoyées comme paramètres lors des appels des différentes sous-routines. Il faut noter que certaines variables globales sont déclarées dans la partie des variables locales, comme par exemple les variables contenant des caractères (CHARACTER) ou les variables entières (INTEGER) qui ne respectent pas les attributions par défaut de FORTRAN.

VRAI: Dimension(50,50), contient les valeurs de la grille de transmissivités "vraies", qui servent à calculer les charges hydrauliques "vraies".

B: Dimension(226,1),

P: Dimension(625), contient les logarithmes des transmissivités des points-pilotes qui sont donnés en entrée à la sous-routine de gradient conjugué.

DT Dimension(50,50), contient les résultats du krigeage des différences de transmissivités de chaque noeud de la grille.

SE2: Sommation des erreurs au carré.

UNIT: Variable contenant successivement l'indice de la position de l'écriture du nom du fichier de paramètres .BCF et l'index de la position de l'écriture du nom du fichier de paramètres .SIP de MODFLOW, lors de la lecture du fichier NLIN.PAR.

NBM: Nombre de noeuds de la grille de transmissivités.

VNAME: Nom du fichier dans lequel sont lues les transmissivités réelles.

SNAME: Nom du fichier dans lequel sont lues les transmissivités simulées.

BASPAC: Nom du fichier de paramètres .BAS de MODFLOW.

PACK: Dimension(24*30), vecteur de caractères contenant les noms des fichiers de paramètres de MODFLOW aux positions correspondant a leurs numéro d'unité.

RESULT: Nom du fichier dans lequel sont écrit les résultats finaux de l'optimisation. Actuellement, cette variable n'est pas utilisée.

MASTER: Nom du fichier de codification des transmissivités identifiant les points-pilotes et les observations.

HEADNG: Dimension(32), contient l'en-tête du fichier de paramètres .BAS de MODFLOW.

2 - LECTURE DU FICHIER DE PARAMÈTRES NLIN.PAR

Le fichier de paramètre NLIN.PAR contient l'ensemble des informations sur les noms de fichier à utiliser, les critères de convergences et les paramètres géostatistiques de l'optimisation. Cette section présente un fichier de paramètres type utilisé par NLIN.

NLIN.PAR	VARIABLE	DESCRIPTION
VTRANS.DAT	VNAME	Nom du fichier des log des transmissivités réelles
STRANS.DAT	SNAME	Nom du fichier de des log des transmissivités des simulées
MASTER.DAT	MASTER	Nom du fichier de codification de transmissivités

50 50	XDIM YDIM	Nombre de rangées et nombre de colonnes de la grille
MODFLOW.BAS	BASPAC	Nom du fichier .BAS de MODFLOW
11 MODFLOW.BCF	UNIT. PACK(UNIT)	Unité de lecture et nom du fichier .BCF de MODFLOW
19 MODFLOW.SIP	UNIT. PACK(UNIT	Unité de lecture et nom du fichier .SIP de MODFLOW
OUTPUT.OUT	RESULT	Nom du fichier de sorties de l'optimisation
0.0001	FTOL	Facteur de convergence
.001	EPS	Facteur epsilon qui est utilisé pour le calcul du gradient
0 1 10	C0. C. A	Paramètres géostatistiques de la grille en unités de grille

3 - PRÉPARATION DE L'OPTIMISATION

La troisième étape du programme principal consiste lire les fichiers de données et définir les variables utilisées par le programme d'optimisation (3.1 et 3.2) ou par MODFLOW (3.3). La section comportant sur MODFLOW est vue sommairement dans ce texte, le

lecteur peut se référer au manuel de MODFLOW pour une description détaillée des différentes sous-routines du simulateur d'écoulement.

3.1 - LECTURE DES FICHIERS DE DONNÉES

La lecture de la matrice des transmissivités "vraies" et simulées, de même que la matrice de codification se fait dans un fichier sans FORMAT. Les 3 fichiers ne contiennent pas d'en-tête.

- Lecture des transmissivités "vraies" dans le fichier VNAME et écriture dans la matrice VRAI.

- Lecture des transmissivités simulées dans le fichier SNAME et écriture dans la matrice SIMUL

- Lecture de la matrice de codification des transmissivités simulées dans le fichier MASTER et écriture dans la matrice icode, les code étant:

  0 : noeuds à estimer

  1 : noeuds échantillons (transmissivités et charges)

  2 : points-pilotes

  4 : noeuds échantillons (charges seulement)

3.2 - DÉFINITION DES VARIABLES DE L'OPTIMISATION

Cette partie du programme initialise les différentes variables nécessaires à l'optimisation, soit le vecteur contenant les points-pilotes initiaux, le vecteur contenant les points-pilotes qui seront optimisés, les vecteur contenant les divers indices des positions dans la matrice et le vecteur des observation et des points-pilotes qui servira à calculer la matrice de krigeage K. Le déroulement s'effectue comme suit:

- Pour chaque noeud de la grille SIMUL, si le noeud de codification correspondant est égal à 2, placer la transmissivité dans le vecteur des points-pilotes initiaux PI et dans le vecteur des points-pilotes P. Enregistrer les indices de la position dans la grille dans la matrice INM.

- Pour chaque noeud de la grille SIMUL, si le noeud de codification correspondant est égal à 1 ou 2, placer la transmissivité dans le vecteur des observation OBS et l'indice de sa position dans la matrice INO

- Construire la matrice de krigeage K (sous-routine MAT_K).

- Inverser la matrice de krigeage K (sous-routine GAUSSJ)

3.3 - DÉFINITION DES VARIABLES DE MODFLOW

Cette section renferme l'ensemble des opérations de MODFLOW qu'il n'est pas nécessaire de répéter pour chaque résolution du système d'écoulement. Cette

modification du code original de MODFLOW a pour effet d'accélérer l'exécution du programme. Chaque étape fait l'objet d'une description sommaire qui peut être complété par une lecture du manuel de MODFLOW. À cet effet, le lecteur trouva les références aux sections concernées. Les opérations se déroulent comme suit:

- Définir la longueur du vecteur X, 60000 dans notre cas
- Définir le numéro d'unité de lecture du fichier .BAS et (1 dans notre cas) et ouvrir le fichier .BAS (BASPAC).
- Lire les premières variables du fichier .BAS et initialiser certains compteurs (MODFLOW, BAS1DF, pp77-80).
- Allouer l'espace dans le vecteur X pour différentes variables (MODFLOW,BAS!AL,pp81-84).
- Lire les premières variables du fichier .BCF, allouer l'espace nécessaire aux variables et initialiser certains compteurs (MODFLOW,BCF1AL, pp159-164)[1].

---

[1] Le manuel de MODFLOW décrit une version plus ancienne de ce module, certaines modifications y ont été apportées pour supporter de nouvelles fonctions.

- Lire les codes de conditions frontières (négatif si le noeud est à charge constante, zéro si le noeud est inactif et positif si le noeud est à charge variable). Lire les charges de départ (MODFLOW, BAS1RP, pp85-88).

- Lire les transmissivité le long des rangées et les coefficients d'emmagasinement(MODFLOW, BCF1RP, pp165-170)[2].

- Lire une partie des paramètres du fichier .BAS et initialise les variables utilisées pour calculer le temps écoulé et la longueur des intervalles de temps(MODFLOW, BAS1ST, pp89-92).

- Fermer les fichier des paramètres de MODFLOW.

4 - OPTIMISATION ET SAUVEGARDE DES RÉSULTATS

La quatrième étape du programme principal consiste à minimiser la valeur de la fonction objective (sommation de l'erreur entre les charges hydrauliques observées et simulées au carré). Le champ de transmissivités "vraies" est soumis au simulateur d'écoulement pour trouver le champ de charges hydrauliques "vraies". Ensuite, le champ de transmissivités simulées est soumis au simulateur pour trouver le champs des charges simulées. Puis, la valeur de la fonction objective initiale est calculée en considérant seulement les noeuds

---

[2] Le manuel de modflow présente une version plus ancienne du module.

observés tels que définis par le vecteur ICODE (4.2). Après, la valeur de la fonction objective est minimisée avec l'aide de la sous-routine de gradient conjugué. Finalement, les résultats sont sauvegardés. Les sous-routines qui sont appelées dans cette section sont décrites plus loin dans le texte. Les opérations se déroulent comme suit:

- Soumettre la grille de transmissivités "vraies" à MODFLOW (sous-routine ECOUL).
- Assigne les charges "vraies" à la variable VRAICH (sous-routine LIRE).
- Soumettre la grille de transmissivités simulées à MODFLOW (sous-routine ECOUL)
- Calculer la valeur de la fonction objective initiale (sous-routine OBJECT).
- Initialiser le compteur d'itération ICOUNT à 0.
- Minimiser la fonction objective à l'aide de la méthode du gradient conjugué (sous-routine FRPRMN).
- Calculer la valeur finale de la fonction objective (sous-routine OBJECT).
- Enregistrer les résultats finaux. Les transmissivités dans le fichier OUT.TRS et les charges hydrauliques dans le fichier OUT.CH.

SOUS-ROUTINE MAT_K

La sous-routine MAT_K crée la matrice de covariance K (variable PKM) en fonction des paramètres géostatistiques des transmissivités, soit l'effet pépite, la plateau et la portée du variogramme. Il faut noter que la sous-routine est conçue en fonction d'un modèle sphérique isotrope et que les paramètres géostatistiques sont donnés en unités de grille (1 unité = distance séparant 2 noeuds). Cependant, le lecteur familier avec la géostatistique constatera que le code de cette sous-routine est facilement modifiable pour s'adapter à tout autres modèles avec des paramètres plus complexes. La sous-routine effectue les opérations suivantes:

- Calculer la matrice de distance séparant les paires d'observations et de points-pilotes qui sont dans la matrice INO et les assigner à leur position respective dans PKM.

- Pour chaque paires de distance de la matrice trouver la valeur de la covariance correspondante.

- Compléter la matrice avec un vecteur colonne de 1 et un vecteur rangée de 1 pour obtenir la matrice de krigeage ordinaire.

SOUS-ROUTINE GAUSSJ

La sous-routine GAUSSJ provient du module GEOSTATISTICAL SFOFTWARE LIBRARY (GSLIB). Cette routine effectue l'inversion de la matrice des covariances K (PKM), qui servira par la suite au krigeage de la grille de transmissivités simulées lors

de l'optimisation. La sous-routine utilise la méthode de Gauss-Jordan pour réaliser l'inversion. Bien qu'il existe des algorithmes plus efficaces et plus stables que celui-ci, il a été retenu pour sa simplicité et sa facilité d'utilisation.

SOUS-ROUTINE ECOUL

La sous-routine ECOUL réalise l'appel au simulateur d'écoulement et retourne la grille de charges hydrauliques résultantes. Les opérations se déroulent comme suit:

- Assigner les transmissivités le long des colonnes à leurs position dans le vecteur X et remettre les transmissivités le long des rangées à zéro (X(LCCC) et X(LCCR).
- Transformer les transmissivités en conductances (sous-routine SBCF3N).
- Initialiser ISUM à sa valeur après l'appel de BCF3AL.
- Réaliser la simulation (sous-routine MODF).

SOUS-ROUTINE OBJECT

La sous-routine OBJECT calcule la valeur de la fonction objective (sommation des erreurs entre les charges observées et simulées). Le programme se déroule comme suit:

- Pour chaque noeud de la grille de charges "vraies", si le noeud est une observation (si IXM = 1), additionner le carré de la différence entre la charge observée et simulée à la sommation des erreurs au carré (SE2).

SOUS-ROUTINE KRIGE

La sous-routine krige effectue le krigeage Dual des noeuds de la grille en fonction des observations et des points-pilotes en considérant la différence entre la valeur initiale du master point et la valeur lors de l'appel de la sous-routine.

Le krigeage Dual a l'avantage de réduire le nombre d'opérations requises pour estimer un noeud, lorsque le voisinage est unique, comme dans notre cas puisque l'on considère toutes les observation pour estimer chaque point[3]. Le lecteur peut se référer au chapitre 3 pour une description du krigeage Dual.

Les opérations du programme se déroulent selon les étapes suivantes:

- Créer le vecteur Z contenant la différence entre les observations initiales contenues dans OBS (points échantillons et points-pilotes) et les valeurs actuelles des observations OB.

- Calculer le vecteur B du krigeage Dual qui reste constant pour tous les estimés a effectuer sur la grille.

Pour chaque point a estimer sur la grille:

---

[3] Rappel: Le système de krigeage ne dépend pas des valeurs observées mais de leur arrangement spatial

- Calculer le vecteur K_0, qui représente la covariance entre les observations et le noeud à estimer.

- Calculer l'estimé du noeud (B' * K_0) et l'assigner à l'endroit correspondant à ses coordonnées dans la matrice DT.

SOUS-ROUTINE ECOUL2

La sous-routine ECOUL2 réalise l'appel au simulateur d'écoulement pour les sous-routines EVALOBJ et GRADIENT et retourne la grille de charges hydrauliques résultantes. Les opérations se déroulent comme suit:

- Assigner les transmissivités initiales SIMUL et la grille de différence DT le long des colonnes à leurs position dans le vecteur X (X(LCCC)) et remettre les transmissivités le long des rangées à zéro et(X(LCCR)).

- Transformer les transmissivités en conductances (sous-routine SBCF3N).

- Initialiser ISUM à sa valeur après l'appel de BCF3AL.

- Réaliser la simulation (sous-routine MODF).

SOUS-ROUTINE GRADIENT

La sous-routine gradient retourne un vecteur contenant le gradient au module d'optimisation.

Il faut noter qu'à cause des restrictions sur les valeurs que peuvent prendre transmissivités dans MODFLOW, on doit faire une certaine forme de normalisation sur le vecteur gradient. Lorsque le vecteur gradient est retourné au module d'optimisation, la première étape que celui-ci réalise est de trouver les bornes entre lequel le minimum de la fonction objective dans cette direction se trouve (sous-routine MNBRAK). Or cette sous-routine recherche le minimum dans un domaine incompatible avec le simulateur d'écoulement si le gradient est trop élevé.

- Évaluer la fonction objective initiale (sous-routine EVALOBJ)

- Si ICOUNT > 0, effectuer le krigeage des différences (sous-routine KRIGE) et additionner au transmissivités simulées (SIMUL +DT). On obtient ainsi la nouvelle grille de transmissivités simulées dont il faut trouver le gradient.

- Remplacer les anciennes valeurs des points-pilotes dans le vecteur OBS par les nouvelles qui ont été trouvées dans cette direction, qui sont contenues dans le vecteur P.

  Pour chaque master point de la grille de transmissivités, effectuer les opérations suivantes:

- Ajouter un epsilun (P+EPS) à la valeur du master point et effectuer le krigeage des différences (sous-routine KRIGE).

- Effectuer le calcul des charges résultantes pour la somme des transmissivités initiales et des différences (SIMUL+DT, sous-routine ECOUL2), calculer la fonction objective résultante et y ajouter s'il y a lieu le résultat de la fonction de pénalité.

- Calculer le gradient dans la direction du master point (XI(K) = (D - SE2)/EPS).

- Si la valeur du gradient rencontré dans cette direction est la plus grande rencontrée jusqu'à présent, assigner DENOM à cette valeur.

- Diviser le vecteur gradient par DENOM pour normaliser le vecteur et le retourner au module d'optimisation.

SOUS-ROUTINE EVALOBJ

La fonction EVALOBJ est appelée par le module de routines de gradient conjugué de NUMERICAL RECIPES afin d'estimer la valeur de la fonction objective. La fonction retourne la valeur de la fonction objective étant donné la grille de transmissivités qui lui est soumise. Le programme se déroule comme suit:

- Si ICOUNT = 0, ne pas estimer la fonction objective et retourner la valeur actuelle de SE2 (pour éviter d'exécuter MODFLOW sans en avoir besoin lors du premier appel d'EVALOBJ).

- Si ICOUNT > 0, effectuer le krigeage sur les différences (KRIGE).

- Calculer le champs de charges hydrauliques résultant en fonction des nouvelles transmissivités (ECOUL2).

- Calculer la valeur de la fonction objective, y additionner la valeur de la fonction de pénalité et retourner le résultat.

ANNEXE B

APPLICATIONS

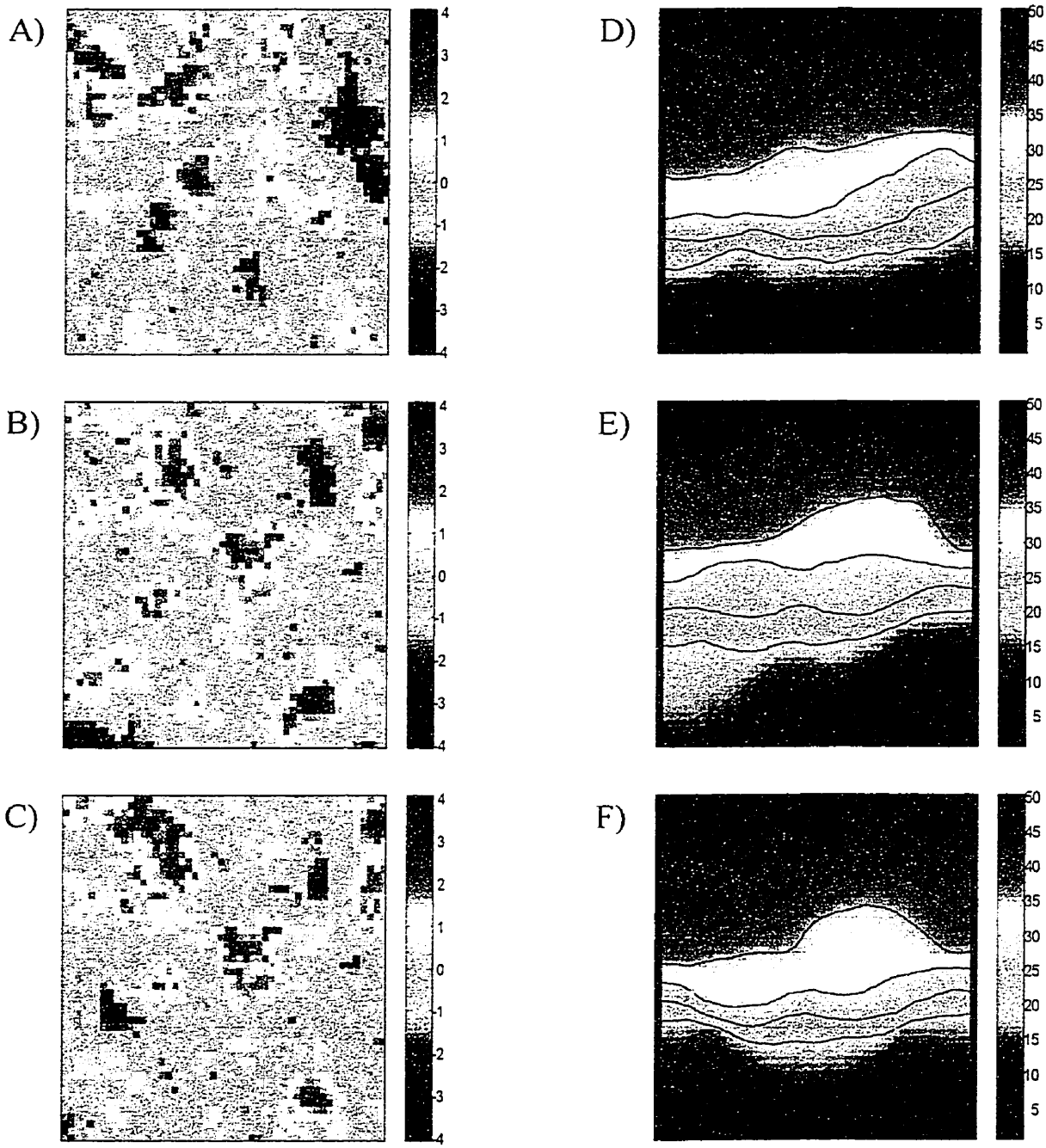


Figure B.1: Optimisation, aquifère 1, 0 transmissivités et 30 charges hydrauliques observées. Transmissivités réelles (A), initiales (B) et optimisées (C), charges hydrauliques réelles (D), initiales (E) et optimisées (F).

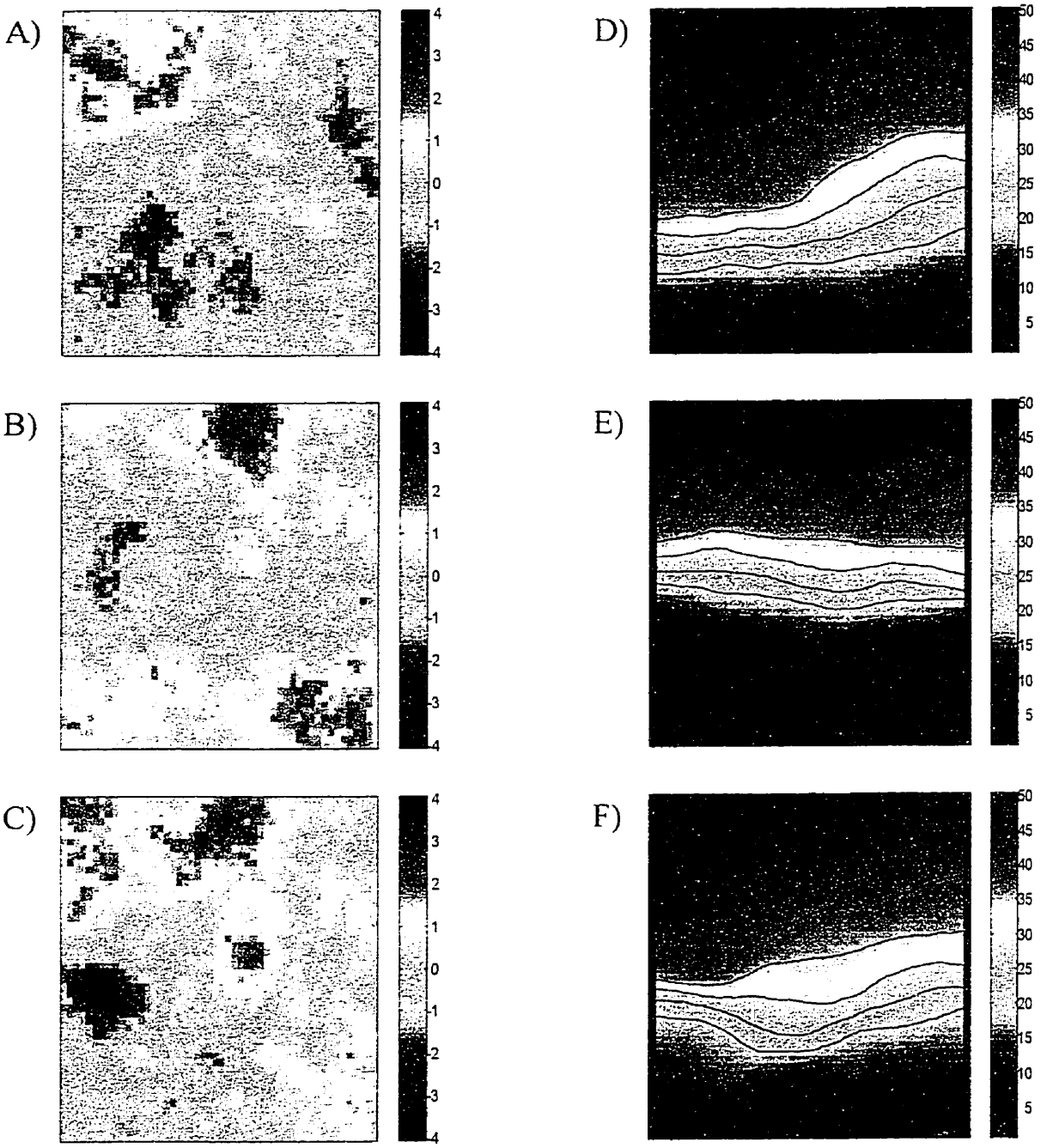


Figure B.2: Optimisation, aquifère 2, 0 transmissivités et 30 charges hydrauliques observées. Transmissivités réelles (a), initiales (B) et optimisées (C), charges hydrauliques réelles (D), initiales (E) et optimisées (F).

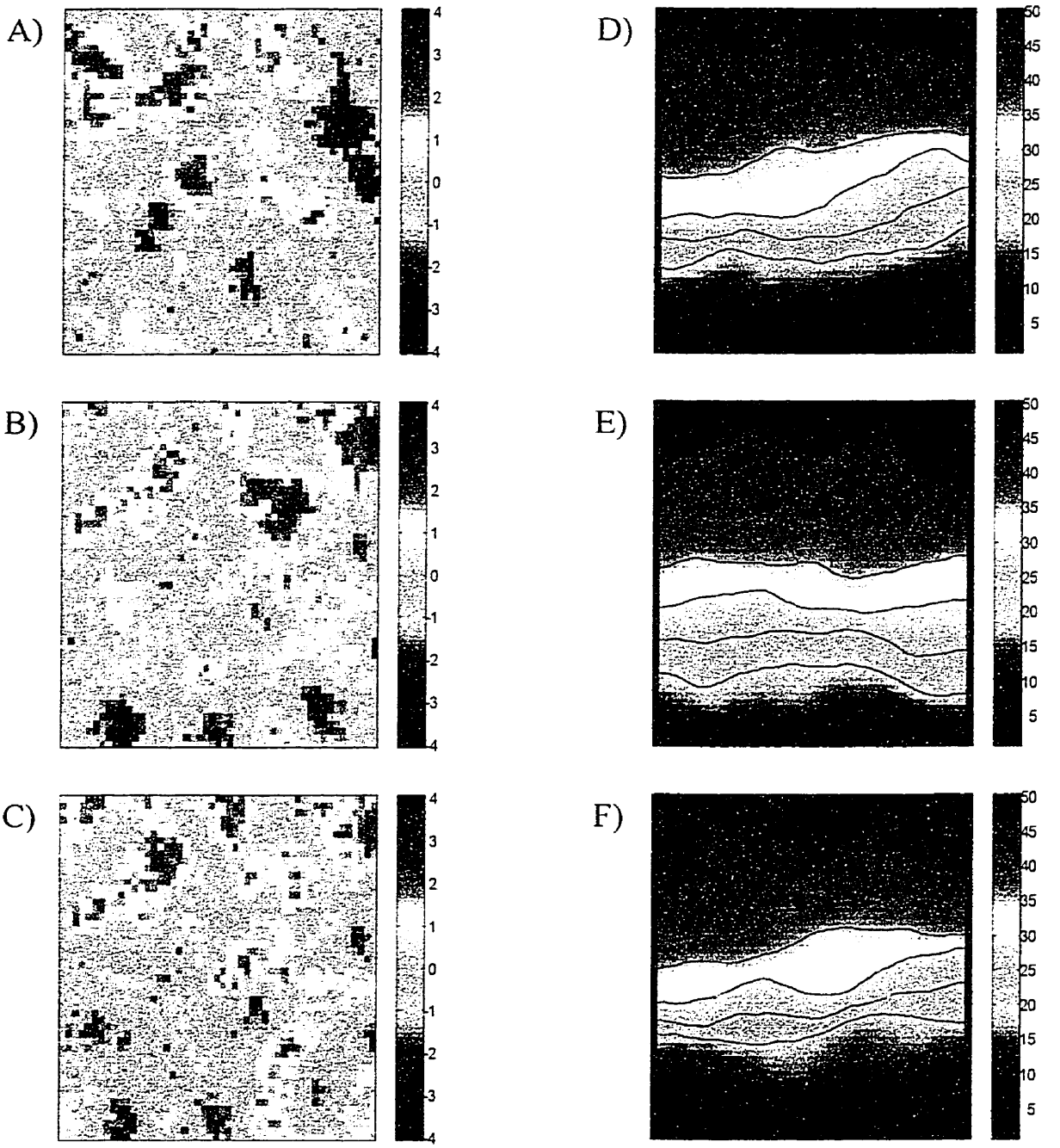


Figure B.3: Optimisation, aquifère 1, 10 transmissivités et 30 charges hydrauliques observées. Transmissivités réelles (A), initiales (B) et optimisées (C), charges hydrauliques réelles (D), initiales (E) et optimisées (F).

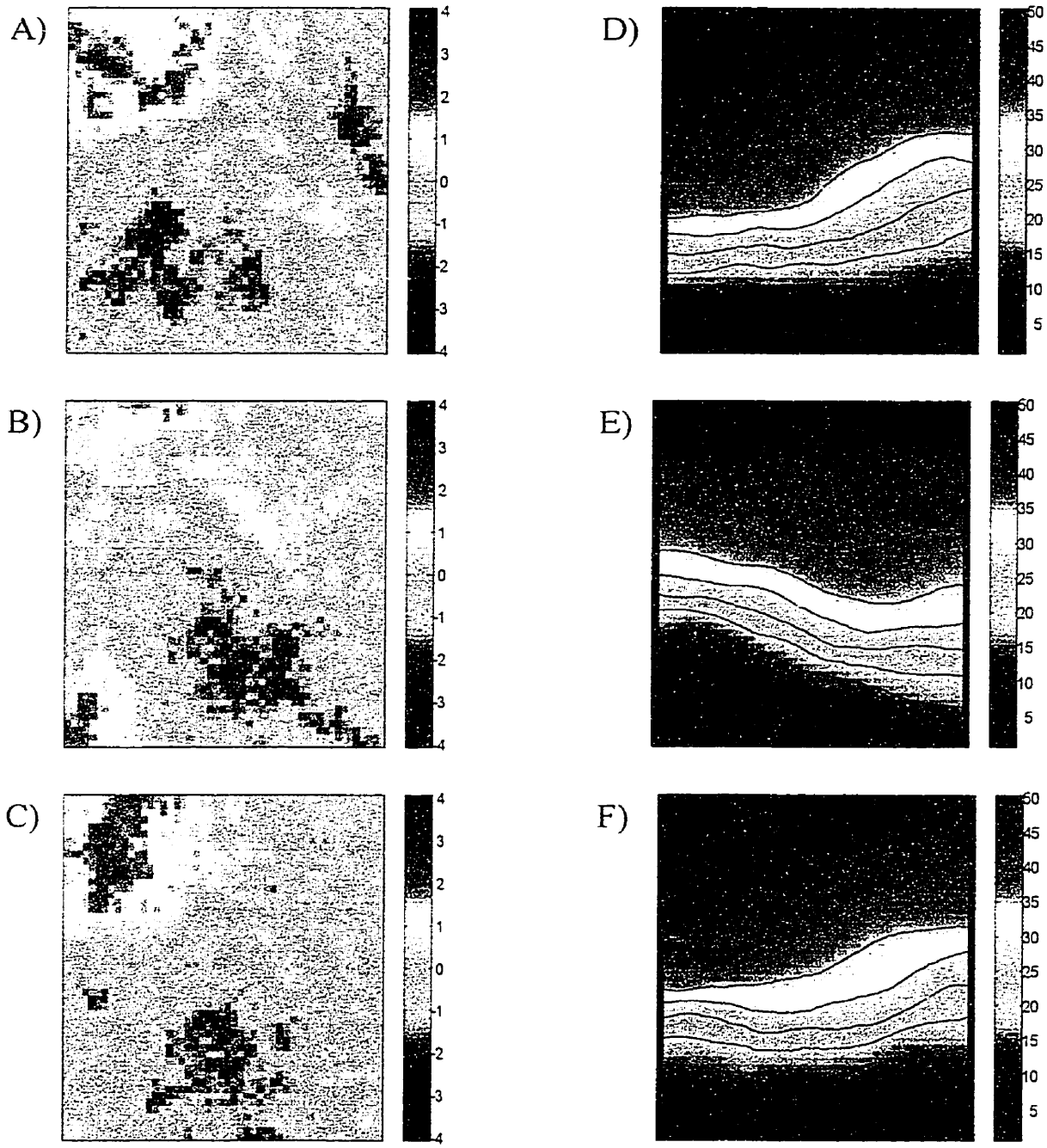


Figure B.4: Optimisation, aquifère 2, 10 transmissivités et 30 charges hydrauliques observées. Transmissivités réelles (A), initiales (B) et optimisées (C), charges hydrauliques réelles (D), initiales (E) et optimisées (F).

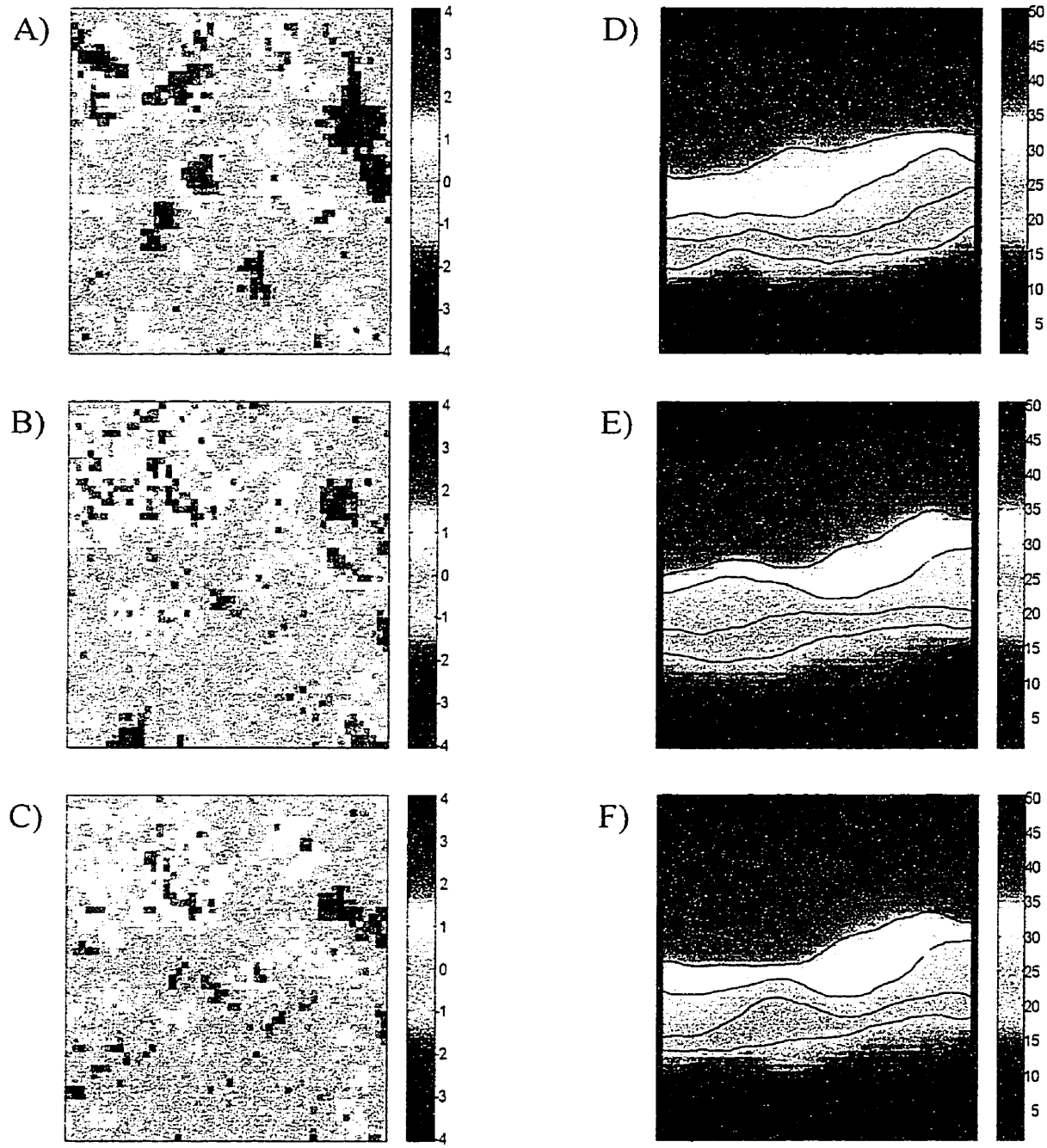


Figure B.5: Optimisation, aquifère 1, 30 transmissivités et 30 charges hydrauliques observées. Transmissivités réelles (A), initiales (B) et optimisées (C), charges hydrauliques réelles (D), initiales (E) et optimisées (F).

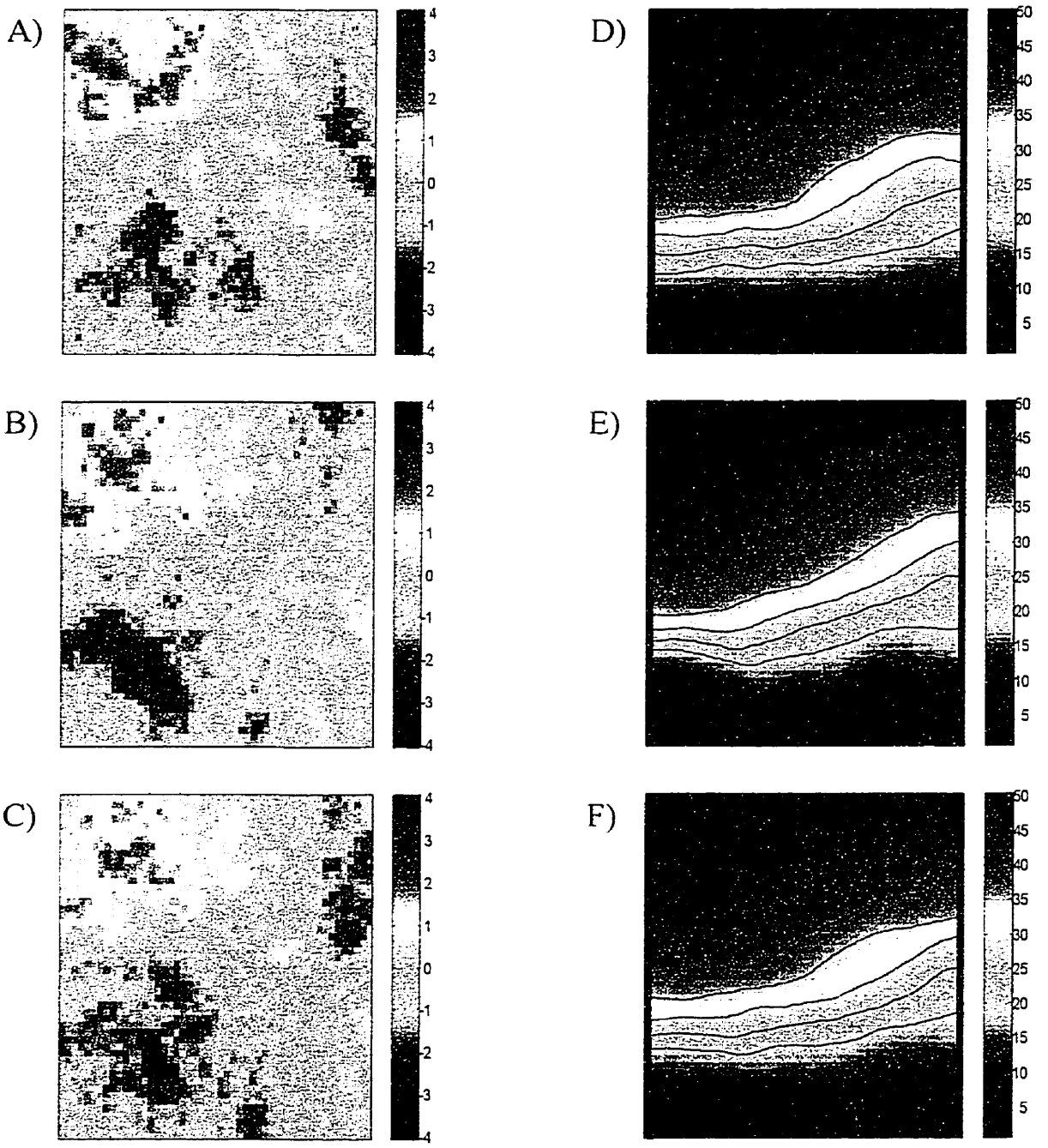


Figure B.6: Optimisation, aquifère 2, 30 transmissivités et 30 charges hydrauliques observées. Transmissivités réelles (A), initiales (B) et optimisées (C), charges hydrauliques réelles (D), initiales (E) et optimisées (F).

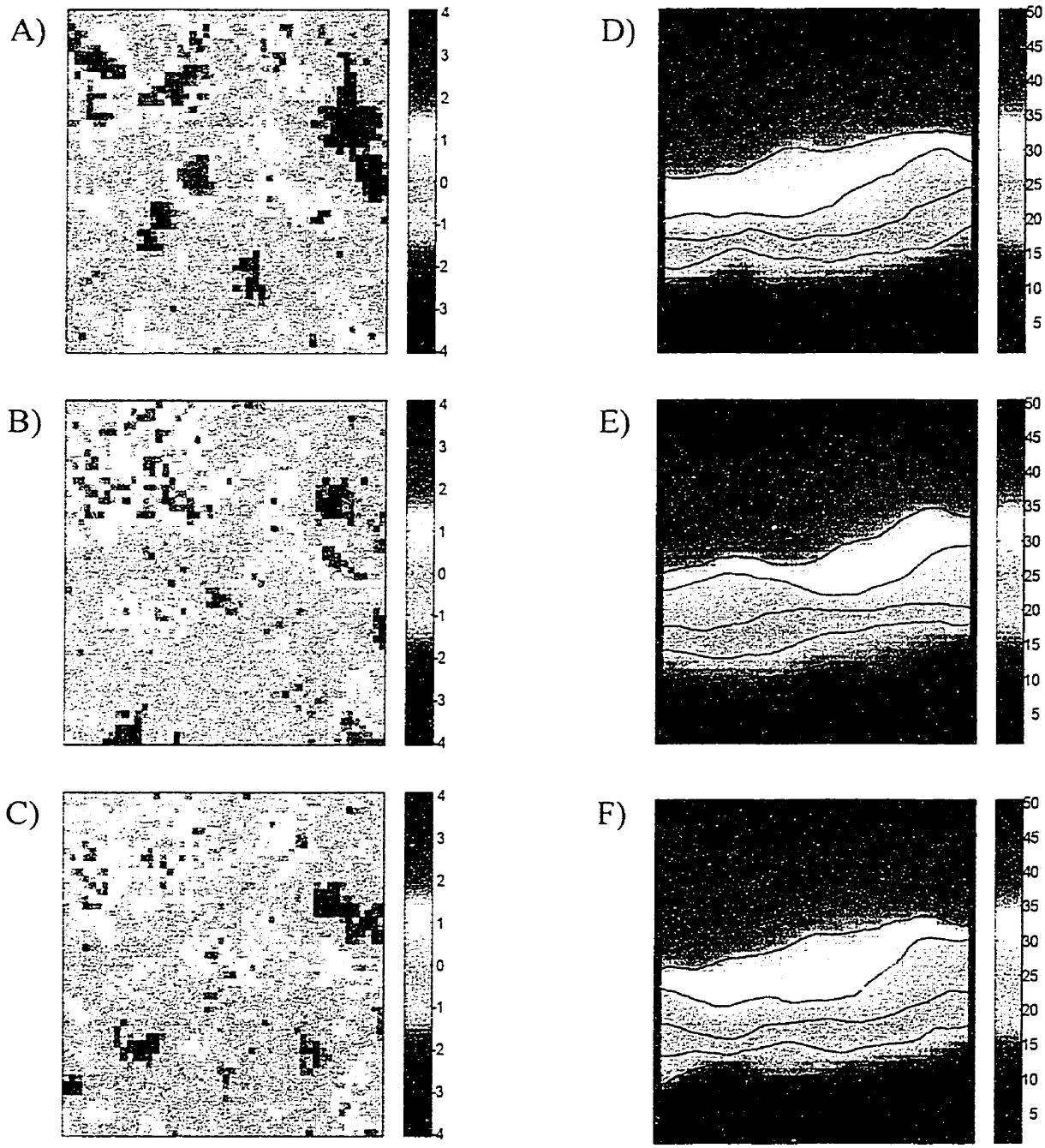


Figure B.7: Optimisation, aquifère 1, 30 transmissivités et 60 charges hydrauliques observées. Transmissivités réelles (A), initiales (B) et optimisées (C), charges hydrauliques réelles (D), initiales (E) et optimisées (F).

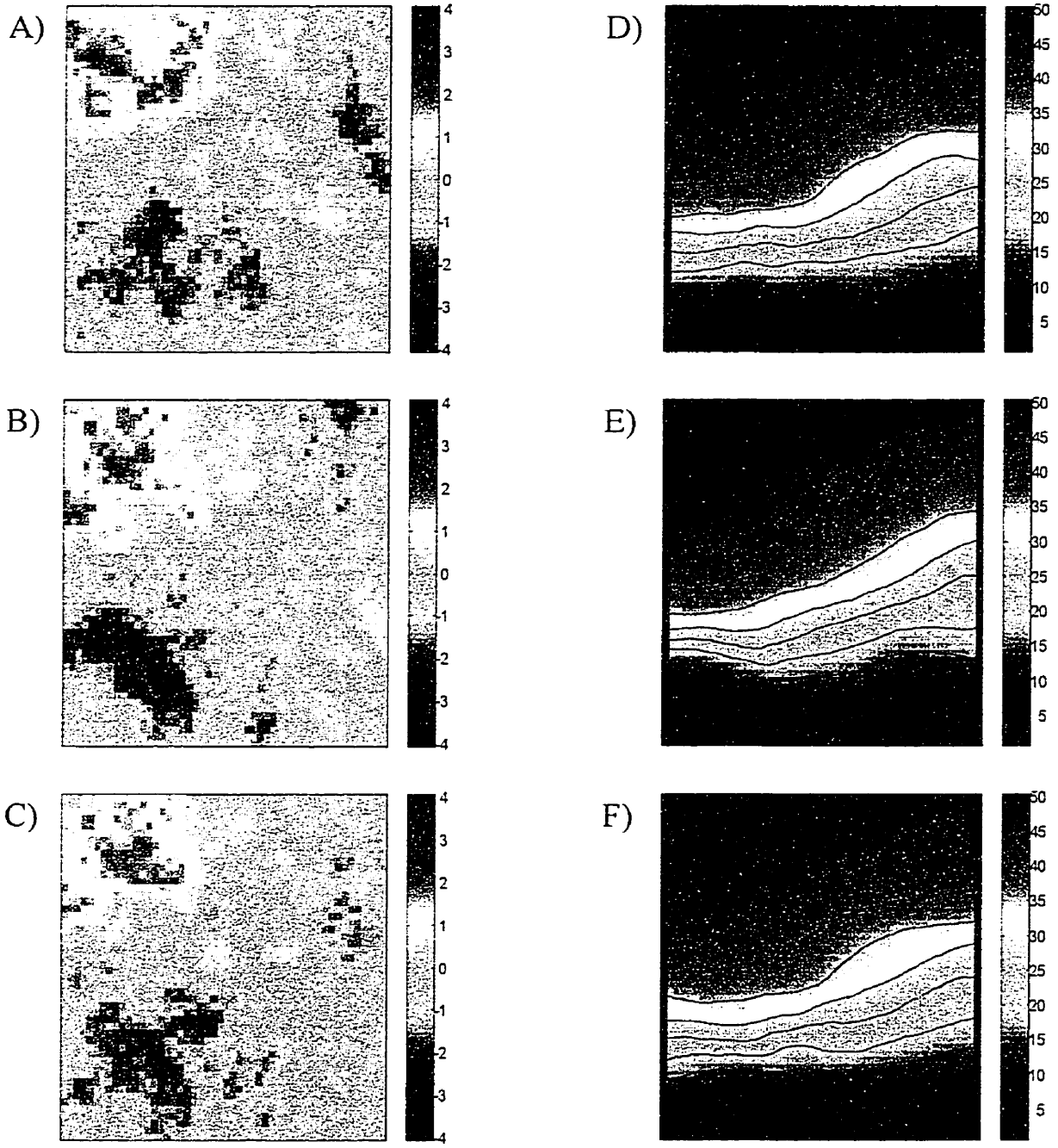


Figure B.8: Optimisation, aquifère 2, 30 transmissivités et 60 charges hydrauliques observées. Transmissivités réelles (A), initiales (B) et optimisées (C), charges hydrauliques réelles (D), initiales (E) et optimisées (F).

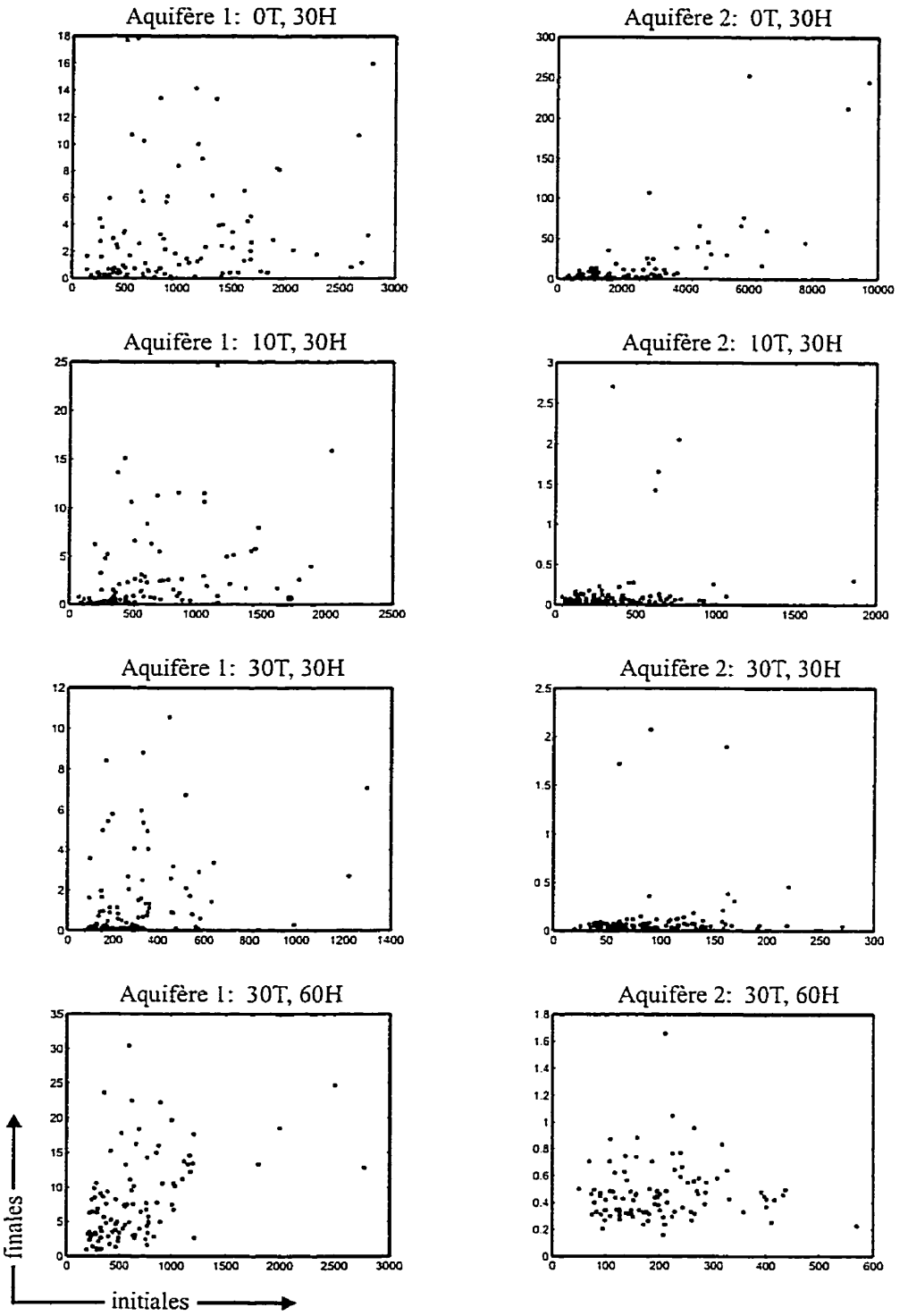


Figure B.9: Fonctions objectives finales versus les fonctions objectives initiales

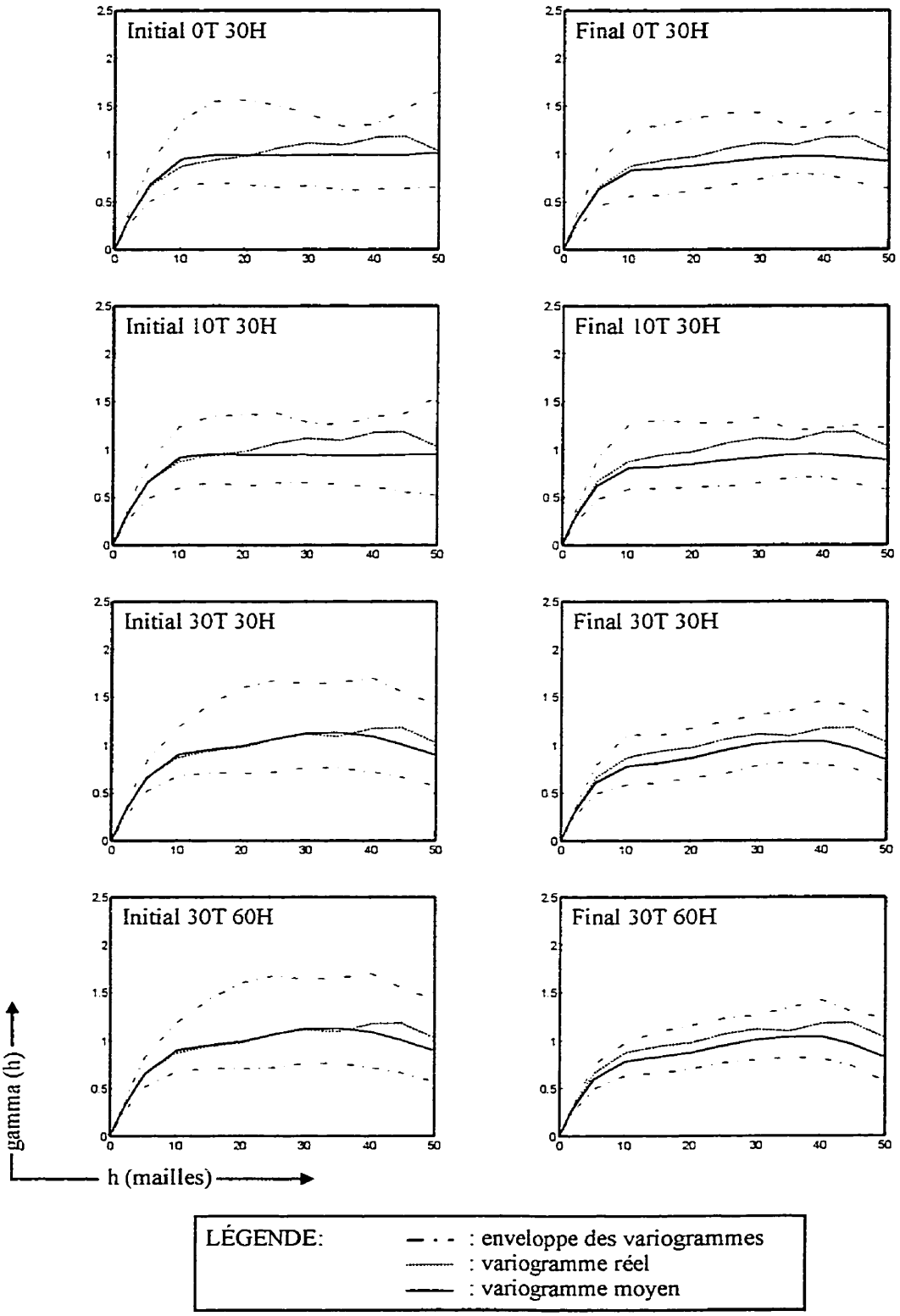
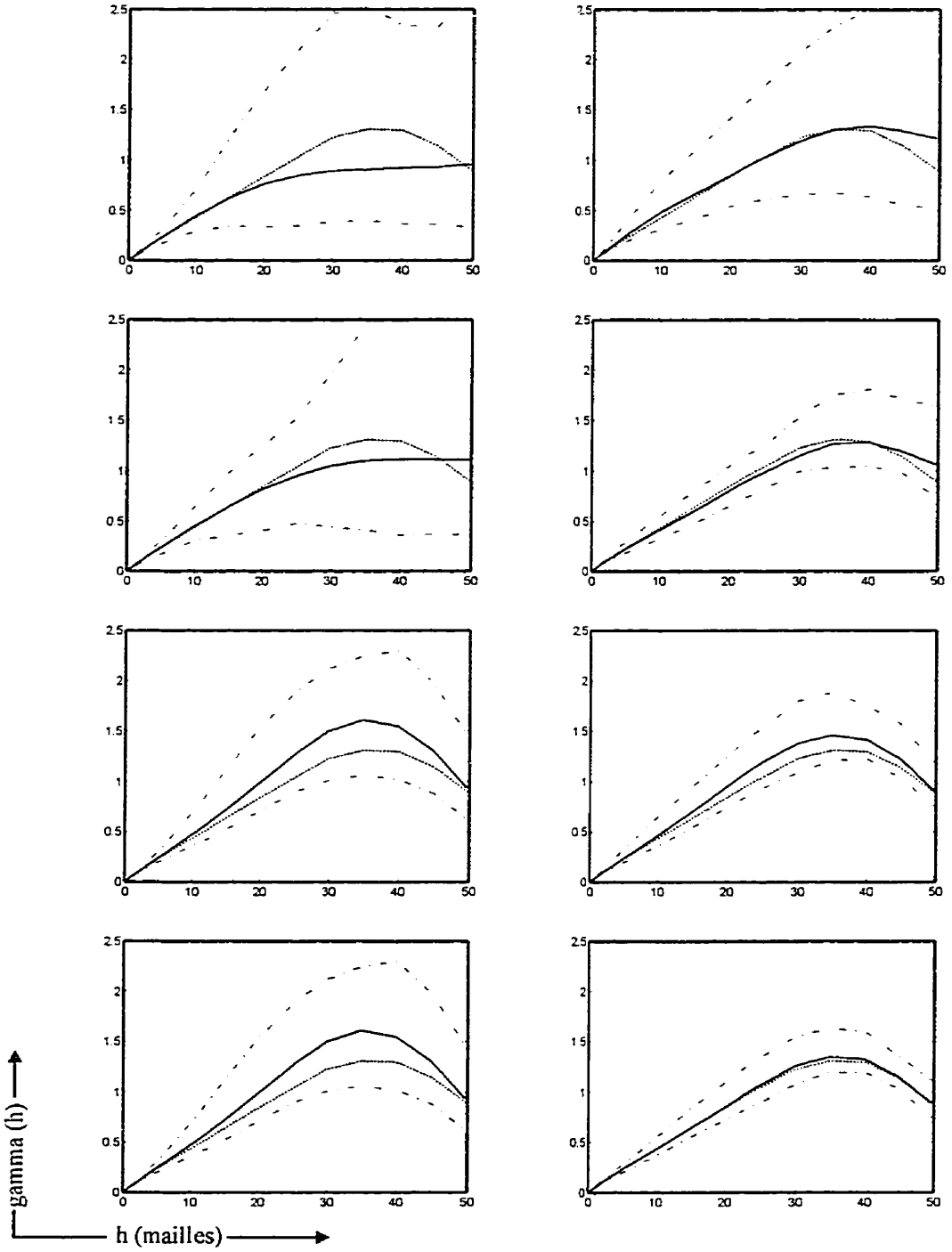


Figure B.10: Enveloppes des variogrammes et moyennes des variogrammes expérimentaux initiaux et finaux pour l'aquifère synthétique numéro 1



LÉGENDE:
- - - - : enveloppe des variogrammes
..... : variogramme réel
——— : variogramme moyen

Figure B.11: Enveloppes des variogrammes et moyennes des variogrammes expérimentaux initiaux et finaux pour l'aquifère synthétique numéro 2

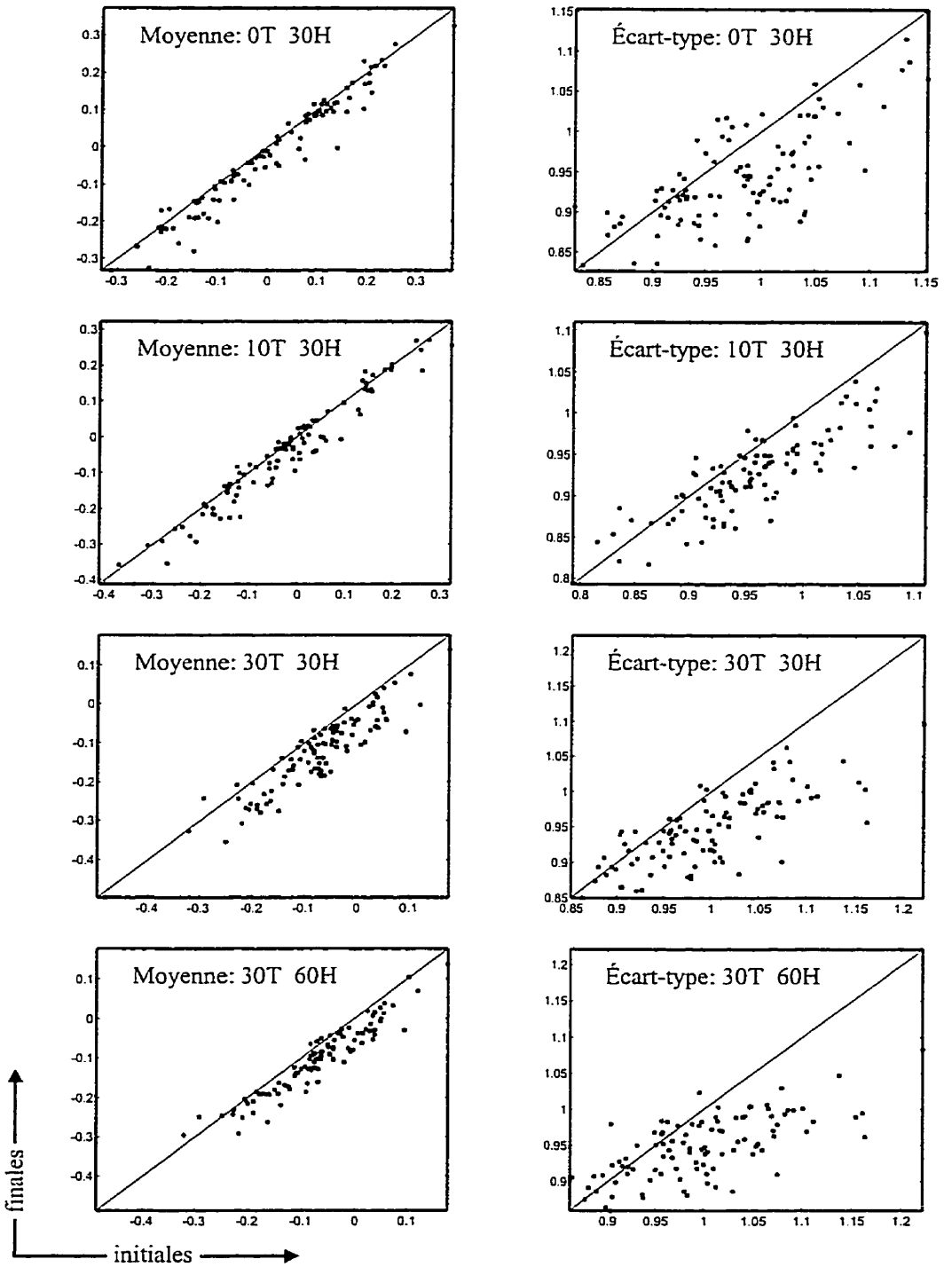


Figure B.12: Moyenne des logarithmes des transmissivités finales en fonction des moyennes initiales et écart-types finaux en fonction des écart-types initiaux pour l'aquifère synthétique numéro 1

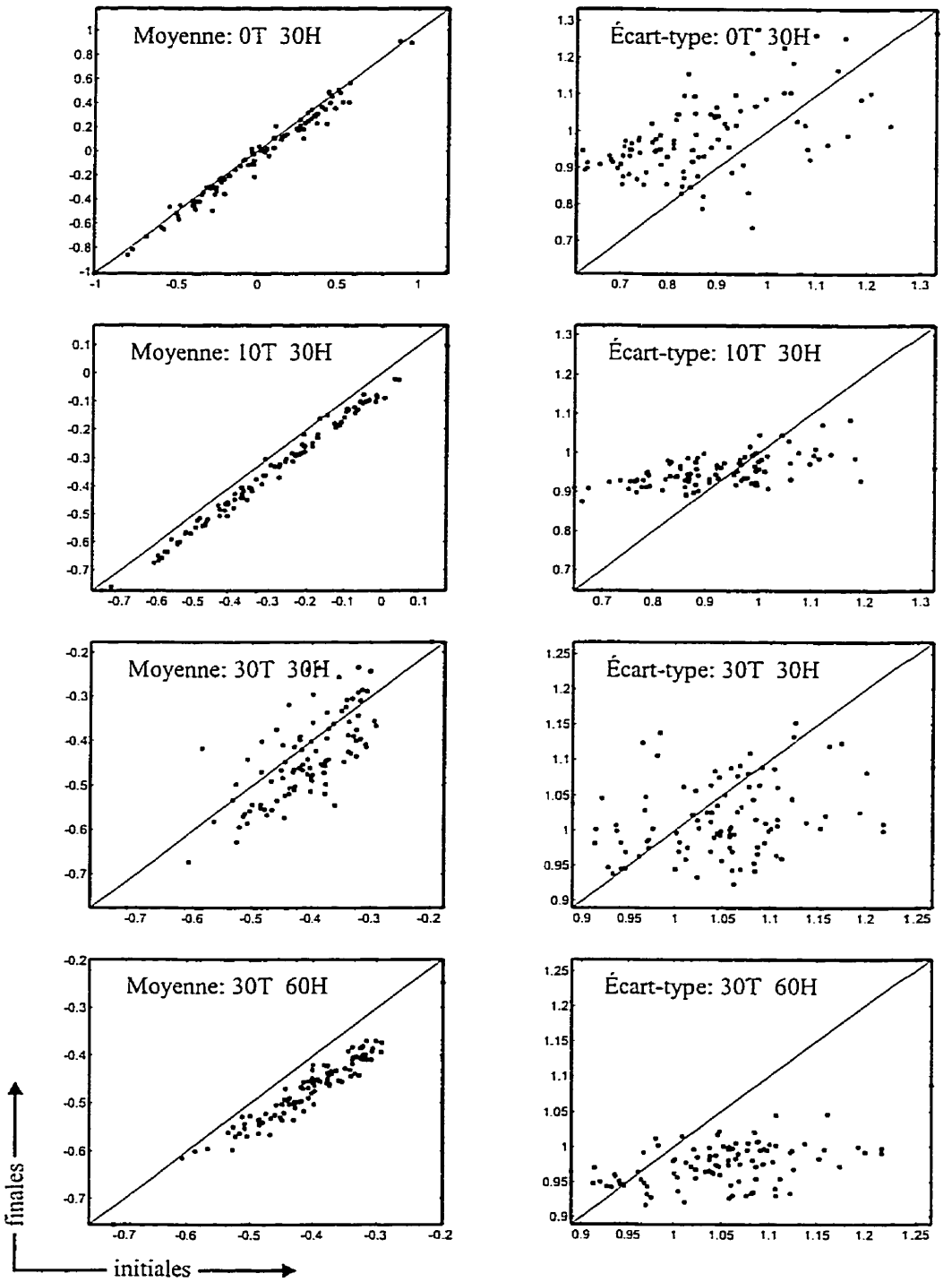


Figure B.13: Moyenne des logarithmes des transmissivités finales en fonction de moyennes initiales et écart-types finaux en fonction des écart-types initiaux pour l'aquifère synthétique numéro 2

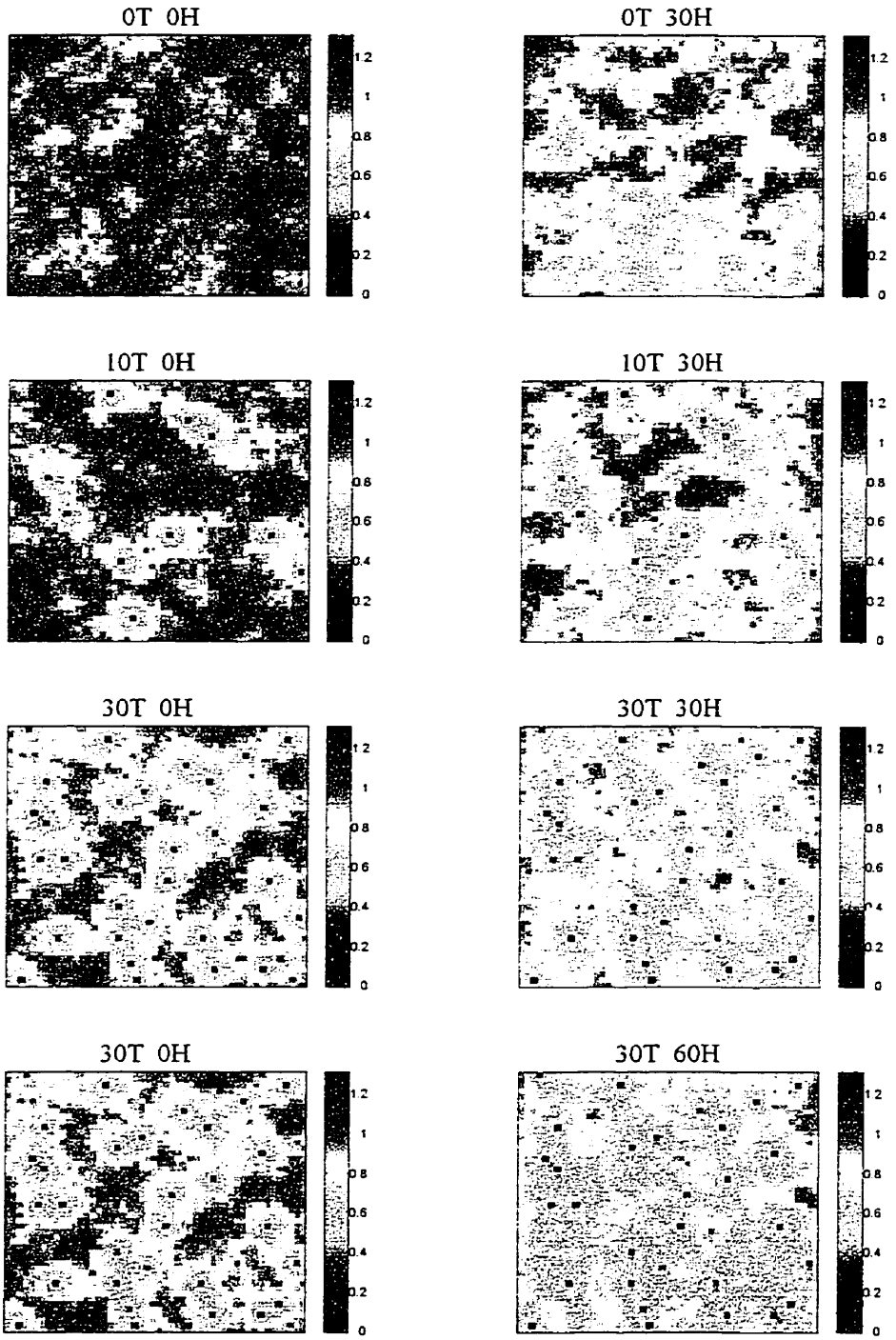


Figure B.14: Images des écart-types des transmissivités initiales et finales pour l'aquifère synthétique numéro 1

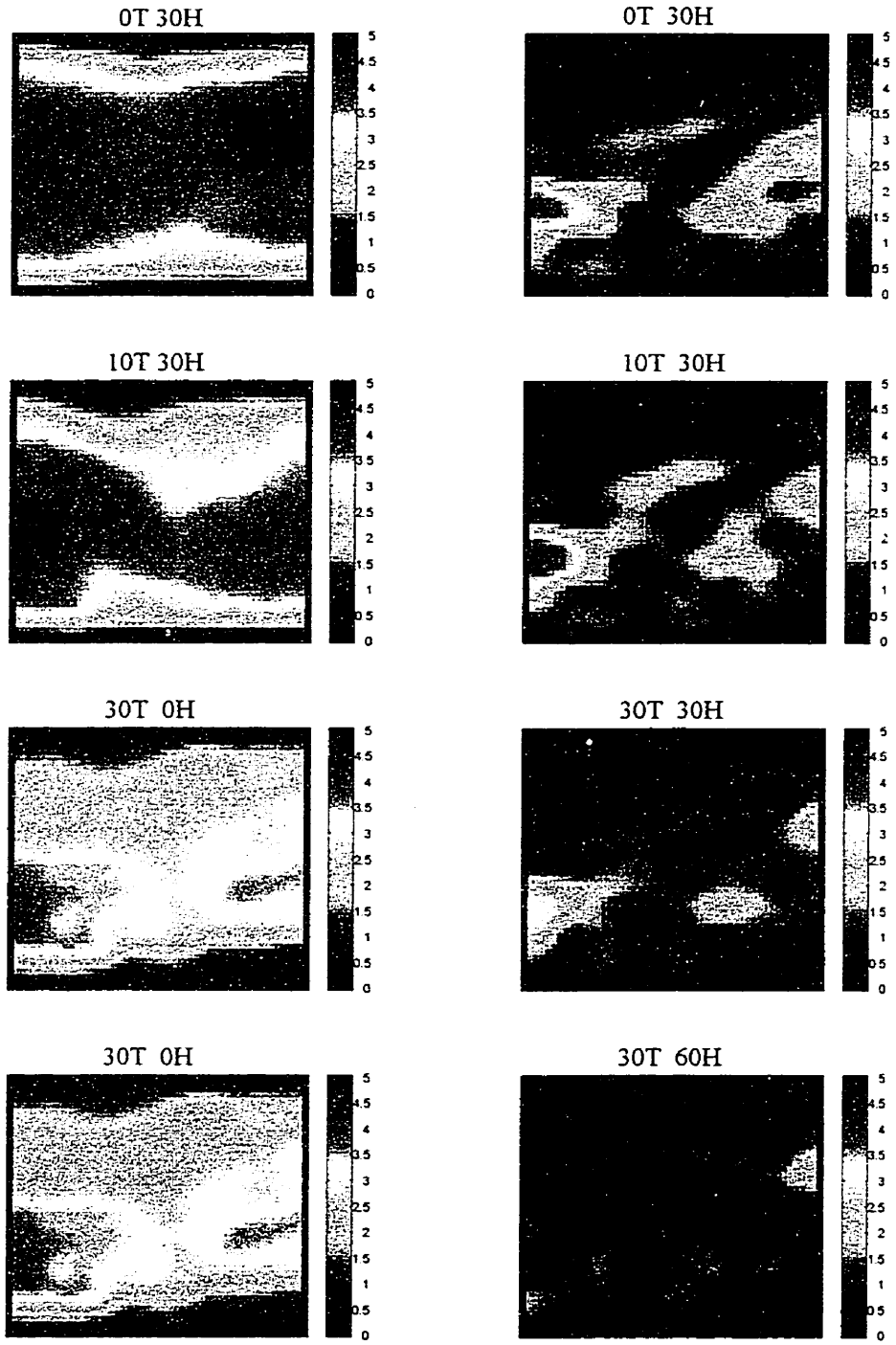


Figure B.15: Images des écart-types des charges hydrauliques initiales et finales pour l'aquifère synthétique numéro 1

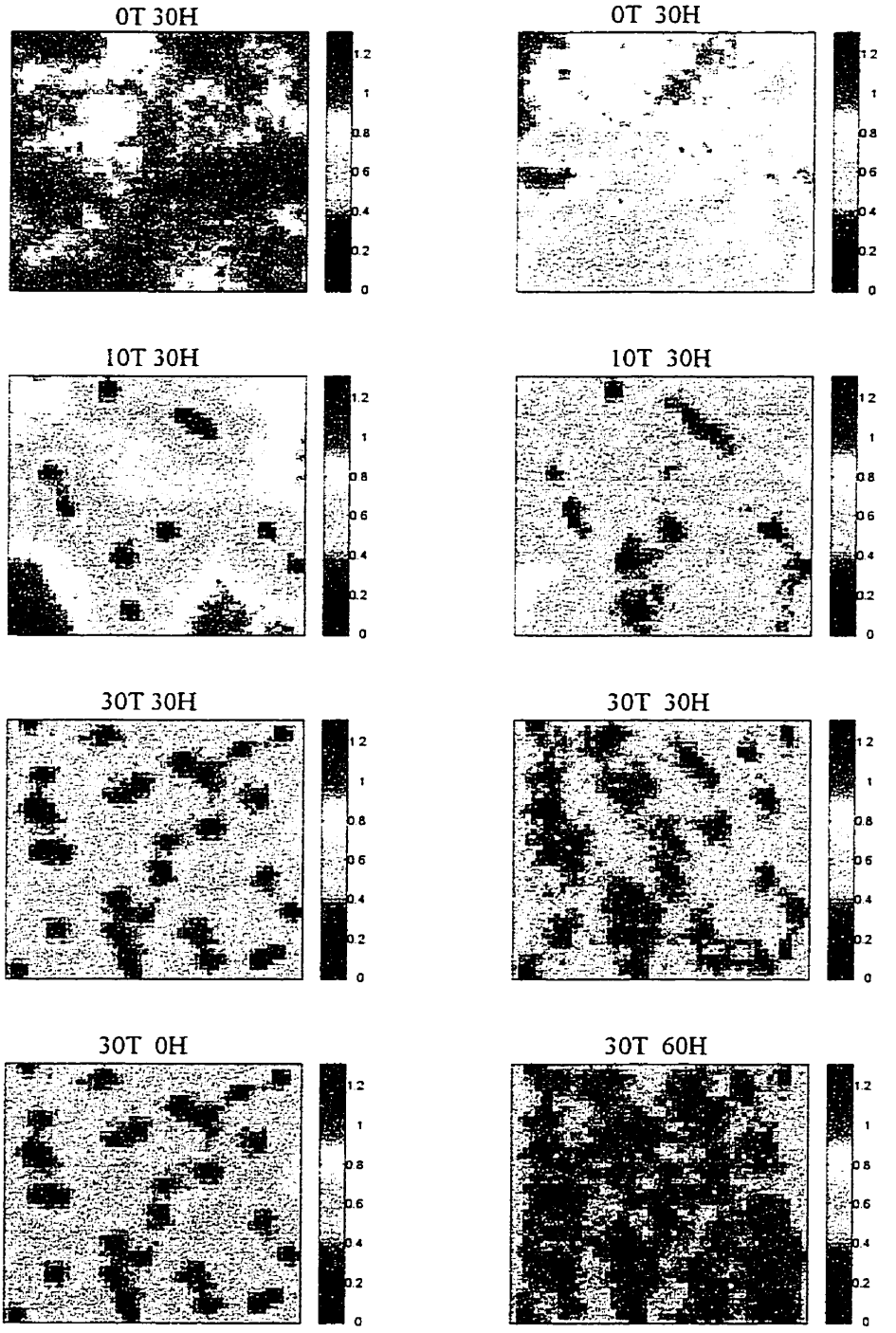


Figure B.16: Images des écart-types des transmissivités initiales et finales pour l'aquifère synthétique numéro 2

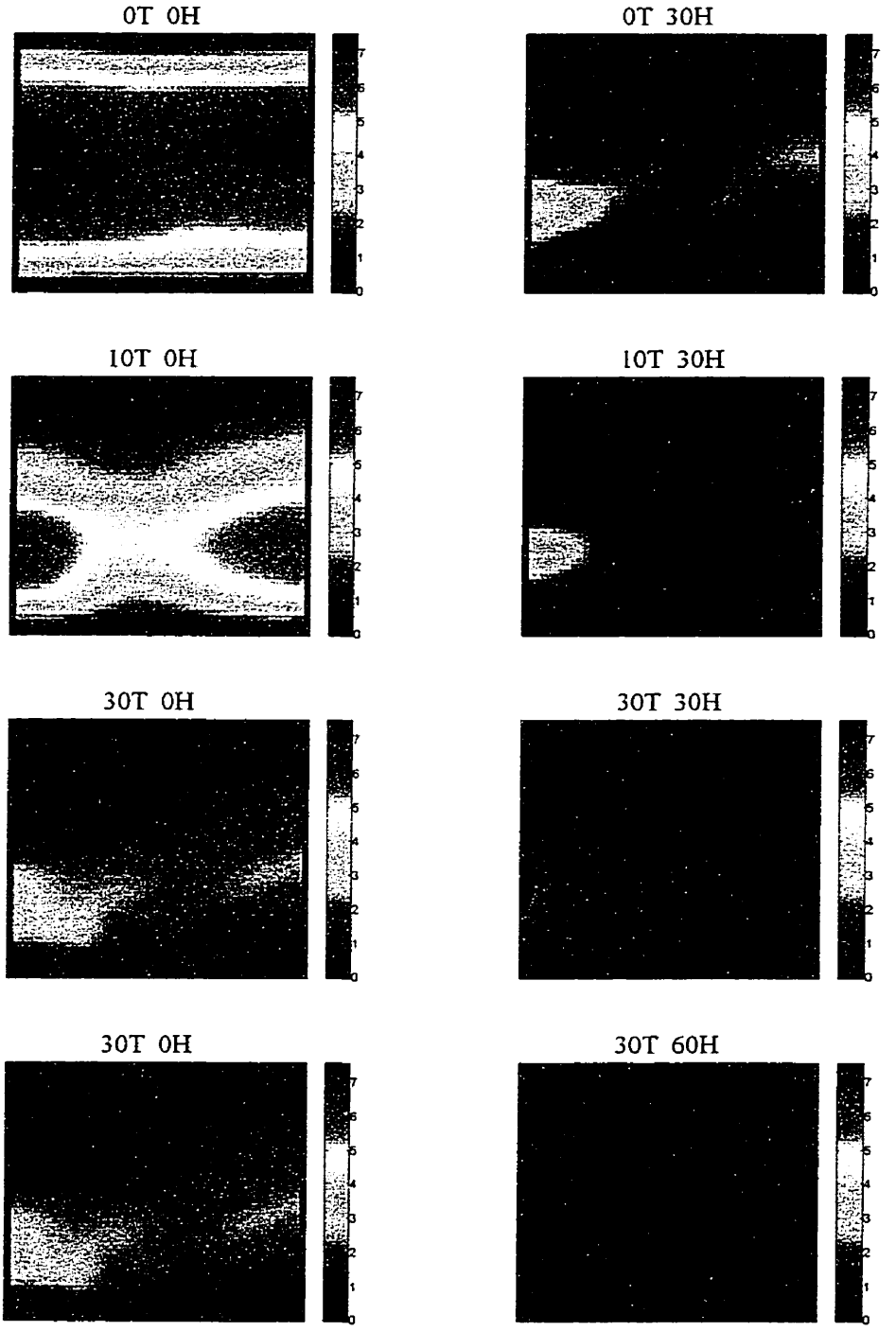


Figure B.17: Images des écart-types des charges hydrauliques initiales et finales pour l'aquifère synthétique numéro 2

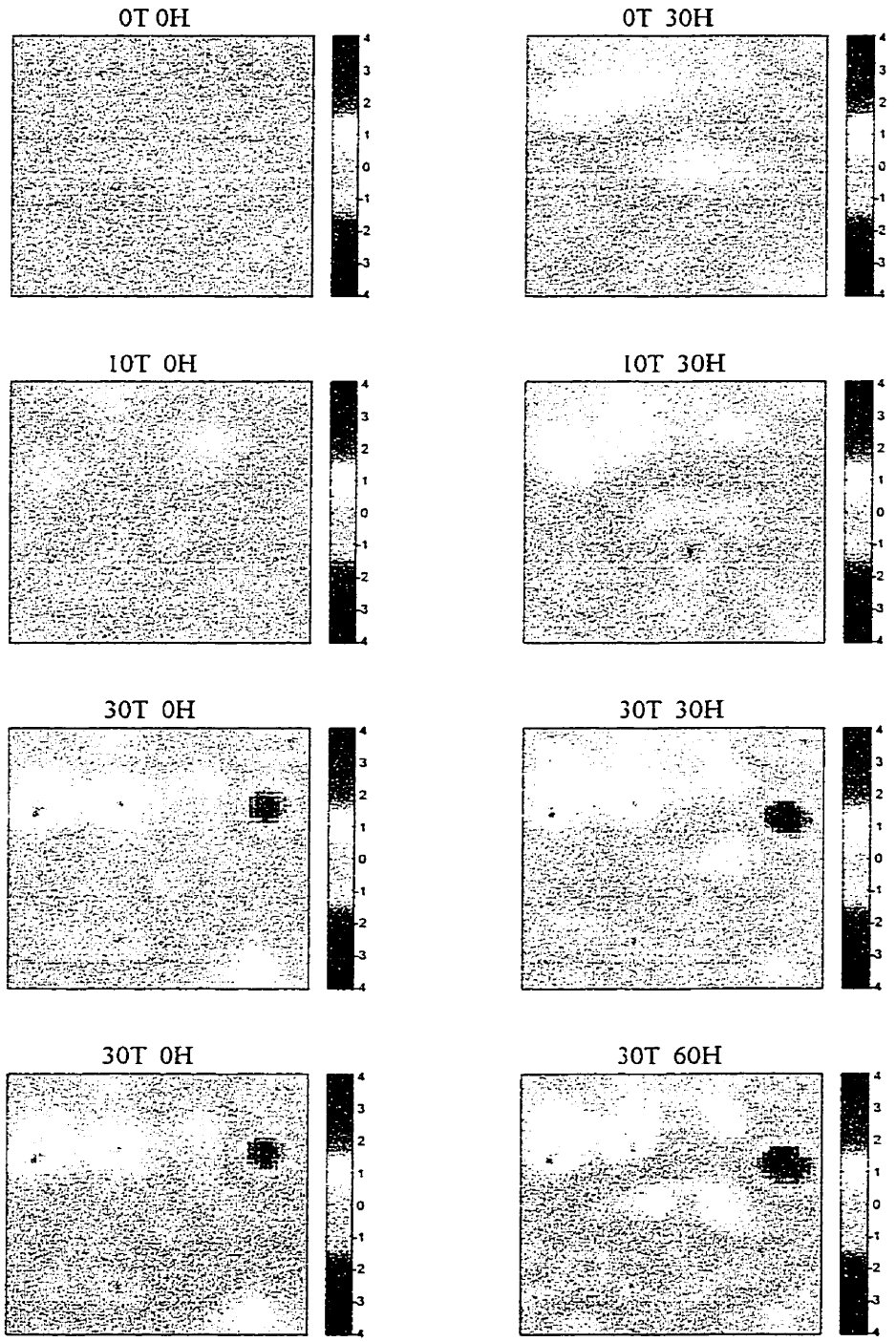


Figure B.18: Images des moyennes des transmissivités initiales et finales pour l'aquifère synthétique numéro 1

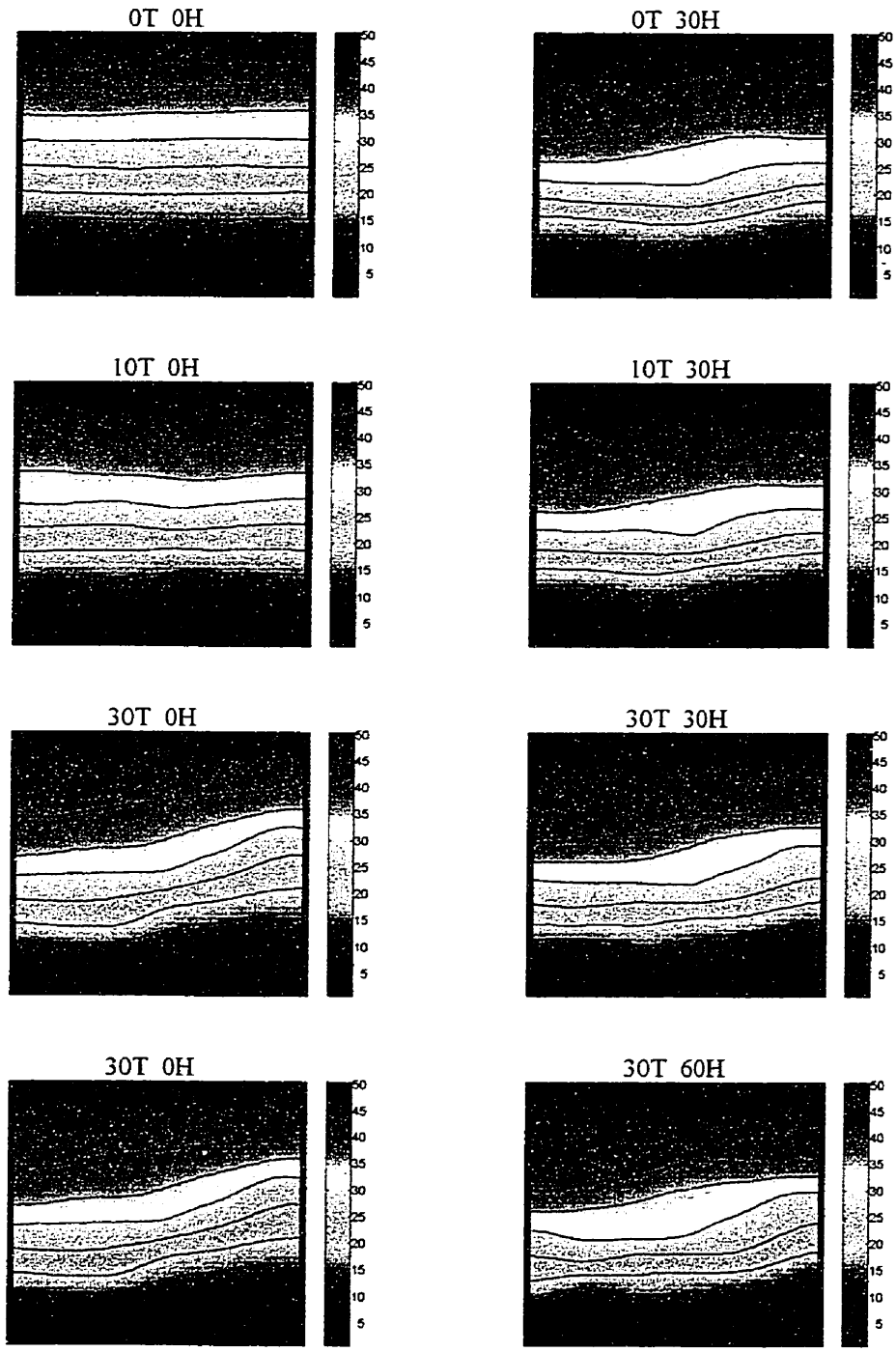


Figure B.19: Images des moyennes des charges hydrauliques initiales et finales pour l'aquifère synthétique numéro 1

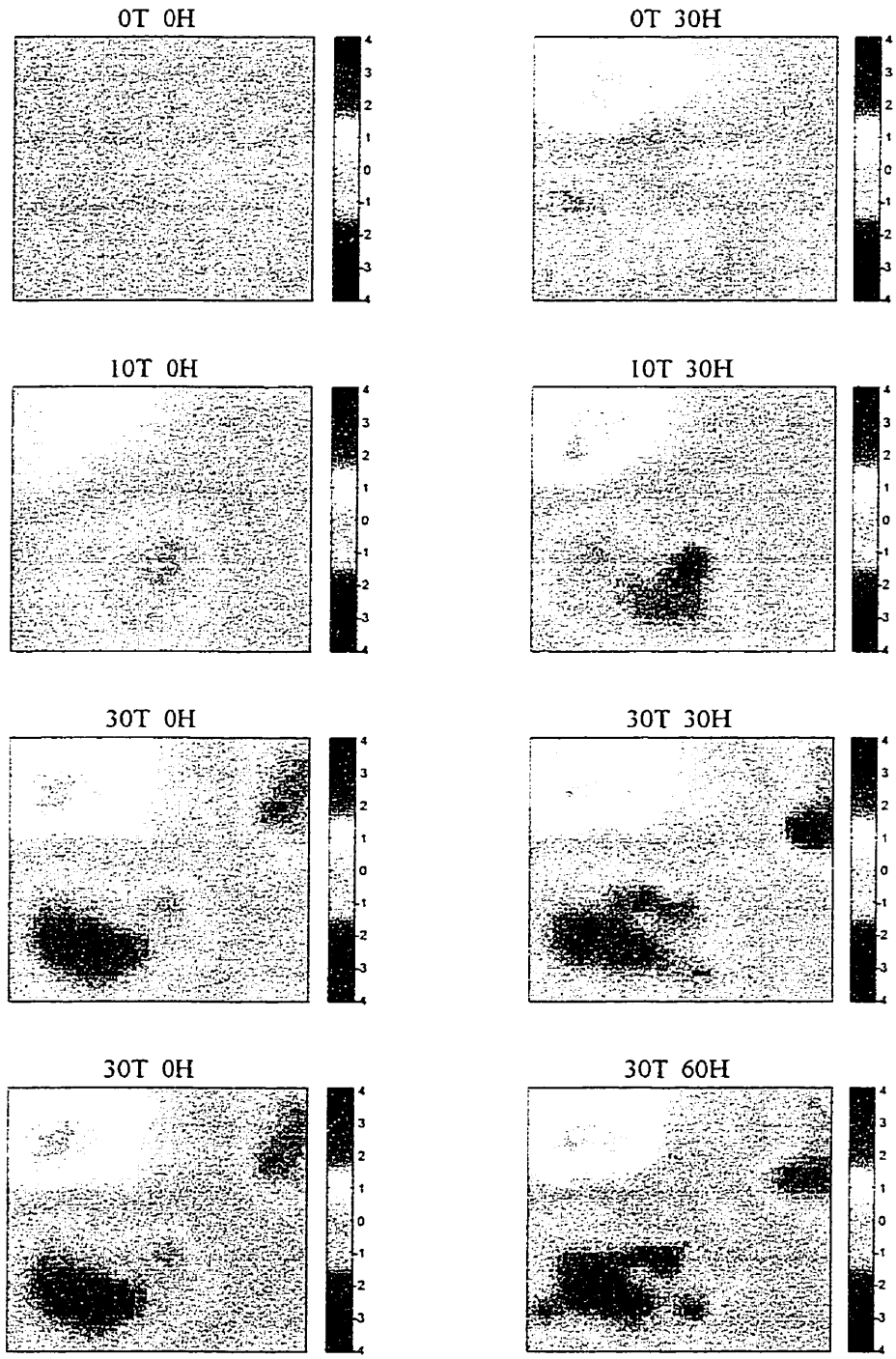


Figure B.20: Images des moyennes des transmissivités initiales et finales pour l'aquifère synthétique numéro 2

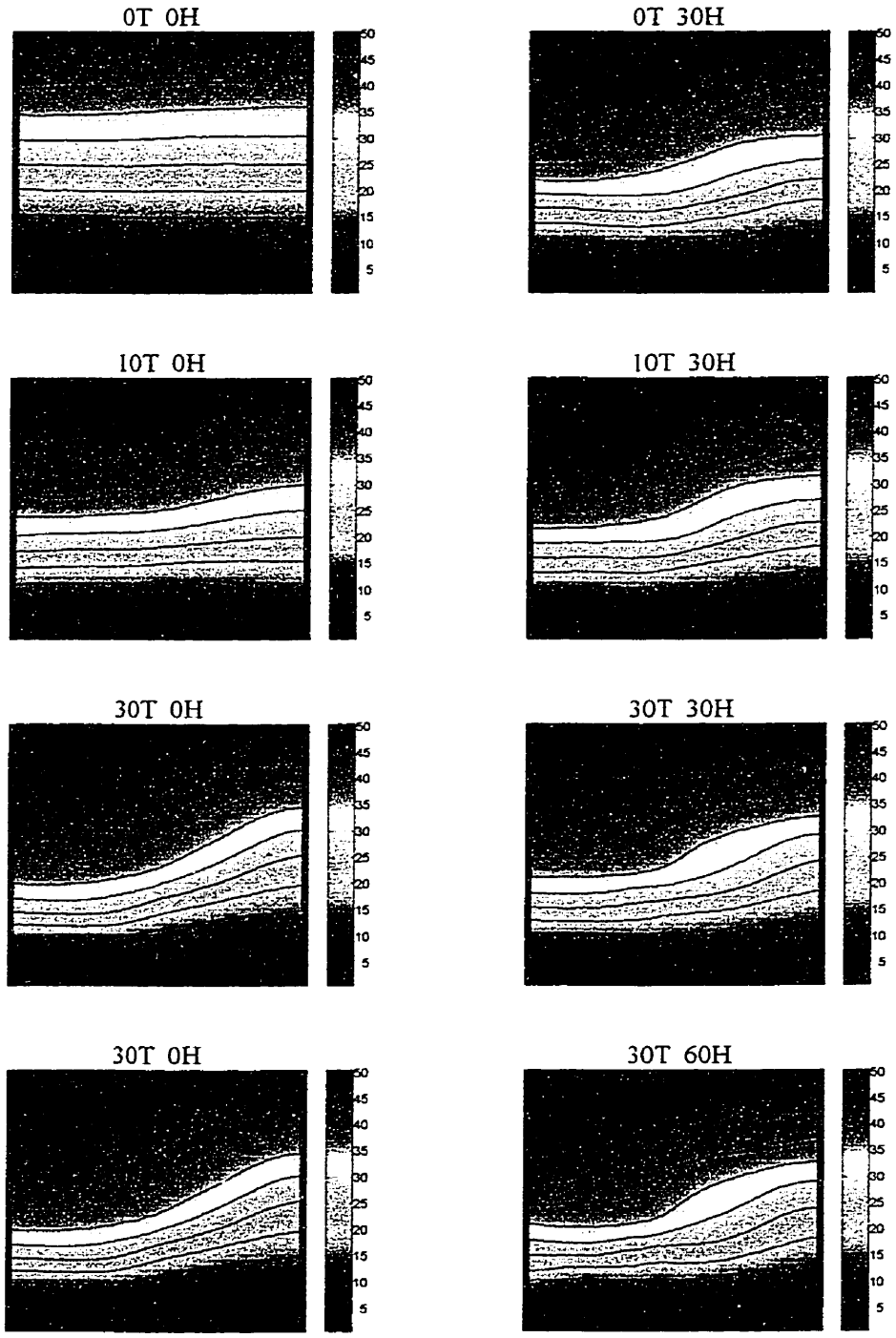


Figure B.21: Images des moyennes des charges hydrauliques initiales et finales pour l'aquifère synthétique numéro 2

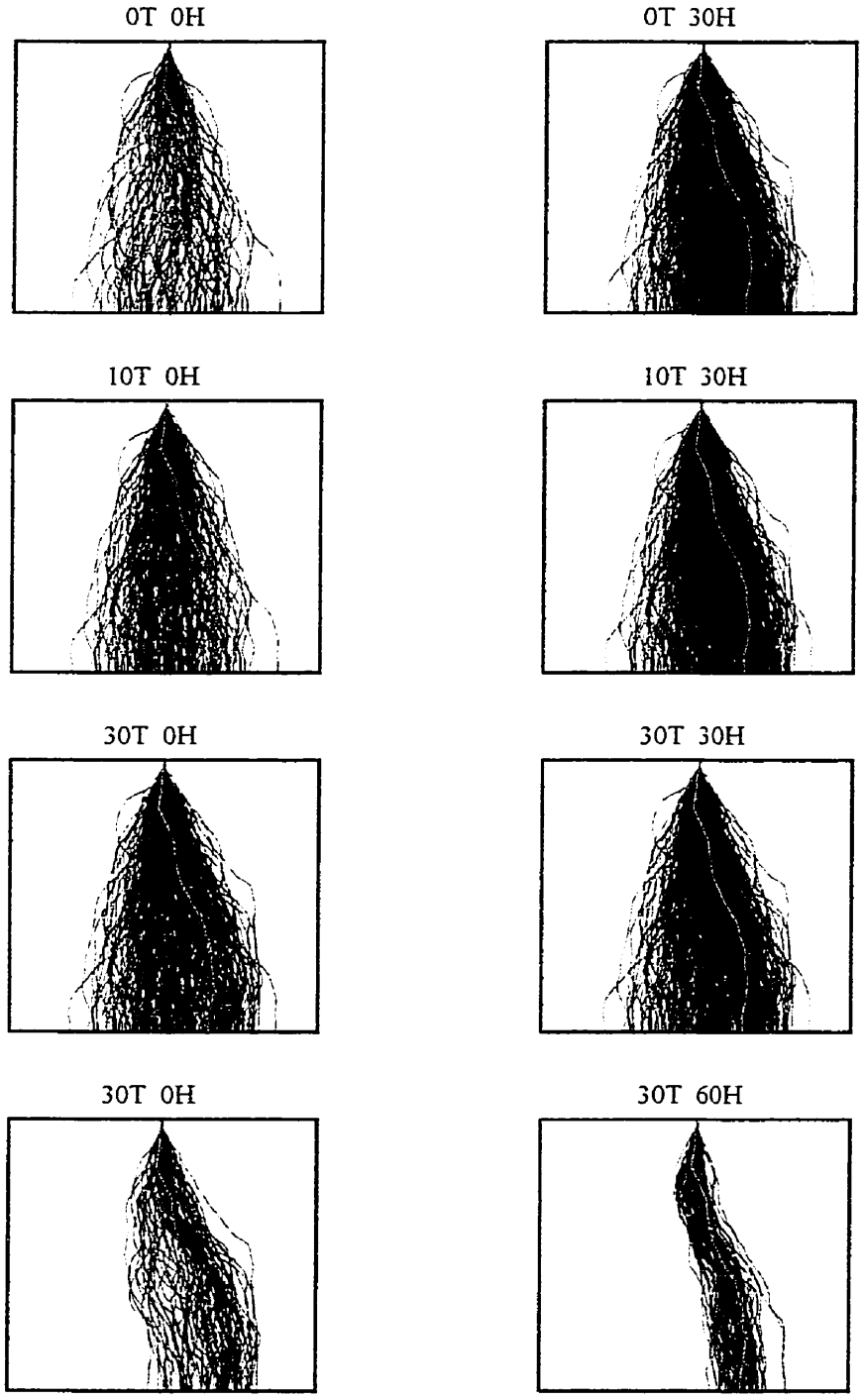


Figure B.22: Trajets initiaux et finaux des particules dans l'aquifère synthétique numéro 1

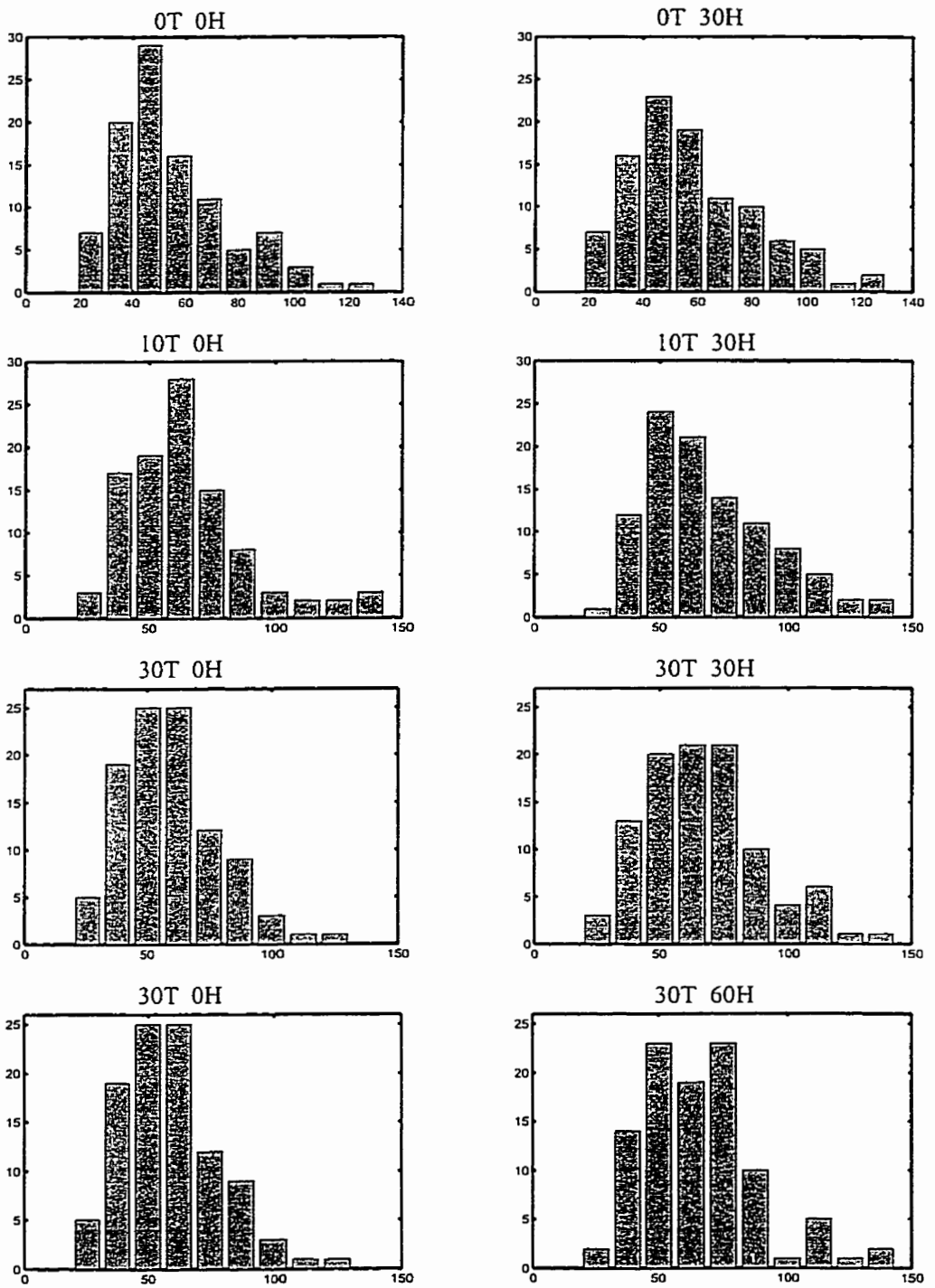


Figure B.23: Histogrammes des temps d'arrivée initiaux et finaux des particules dans l'aquifère synthétique numéro 1

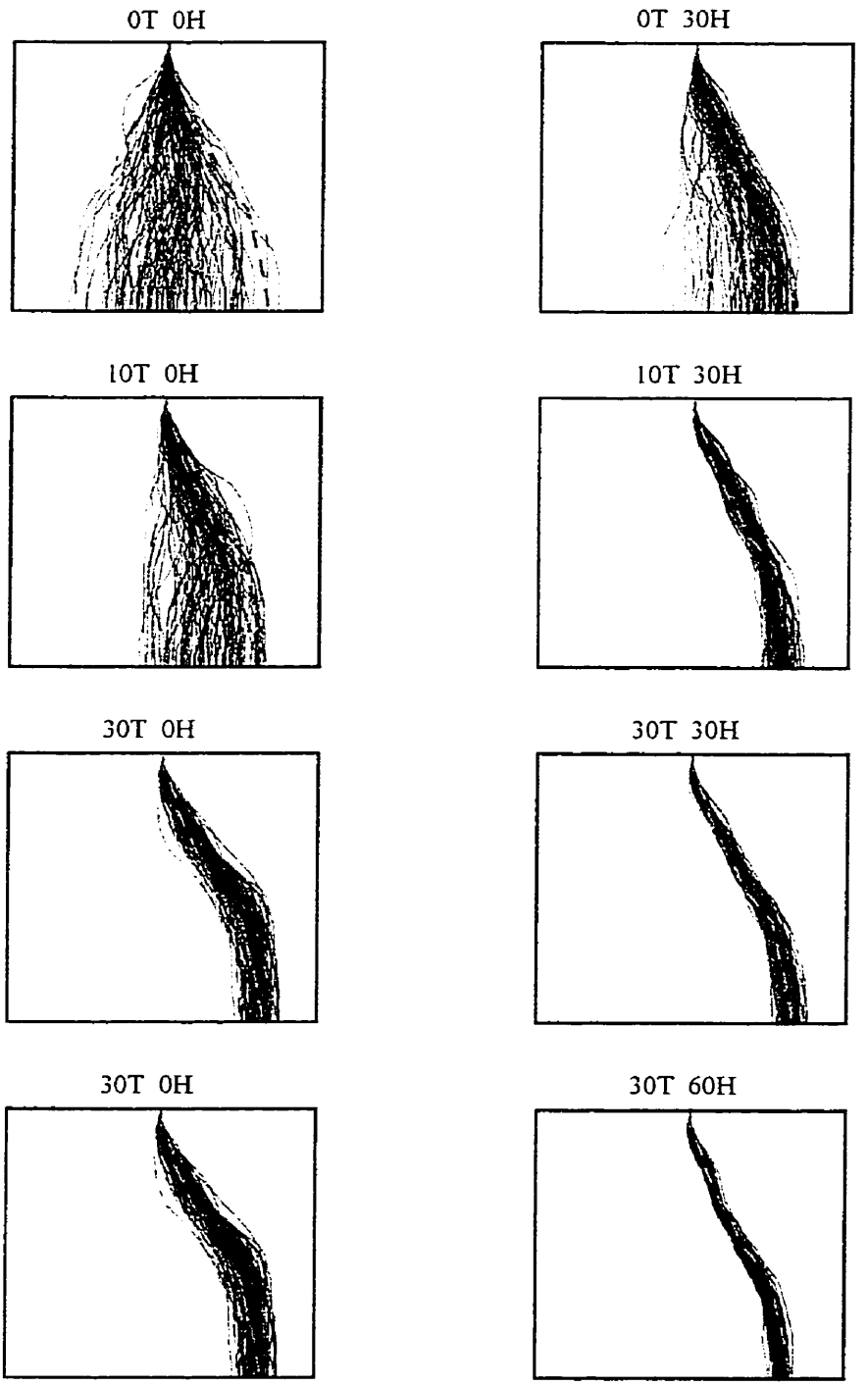


Figure B.24: Trajets initiaux et finaux des particules dans l'aquifère synthétique numéro 2

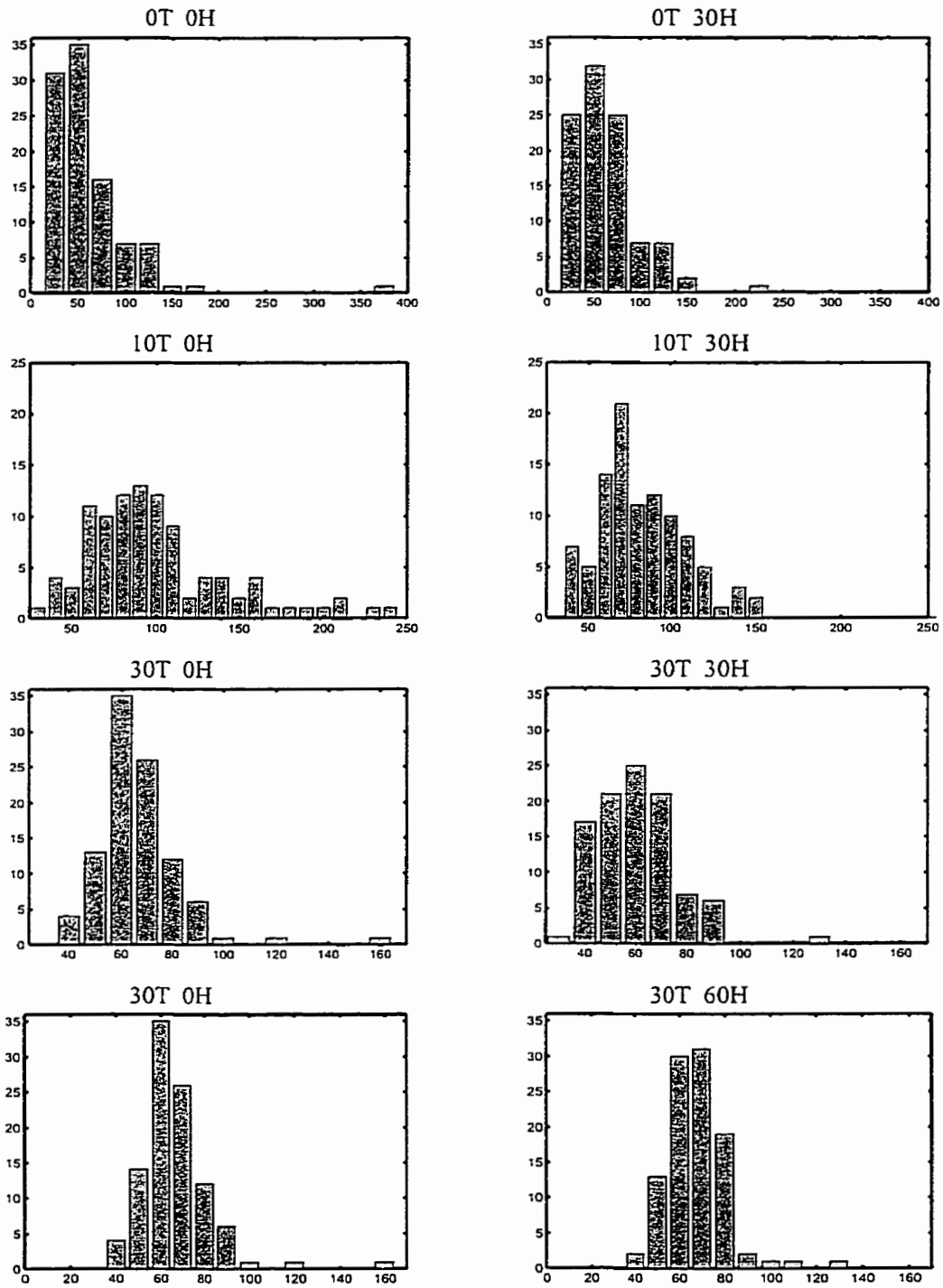


Figure B.25: Histogrammes des temps d'arrivée initiaux et finaux des particules dans l'aquifère synthétique numéro 2

ANNEXE C

ÉTUDE DE CAS

Tableau C.1 : Caractéristiques des piézomètres

Y	X	Él.piéz. (m)	S.tuyau (m)	Él.sol (m)	L.piéz. (m)	L.crép. (m)	K (cm/s)	Él.argile (m)	n. piéz. (m)
80	5	14,056	0,04	14,016	1,990	0,400	1.8e-2	-	12.20
100	5	13,736	0,06	13,676	3,610	0,585	4.4e-2	10,126	12.33
100	20	13,923	0,31	13,613	3,670	0,470	1.5e-1	10,253	12.60
100	28	13,285	0,08	13,205	1,230	0,420	--------	-	--------
80	20	13,880	0.06	13.820	1,885	0,380	1.6e-2	-	12.44
60	20	14,119	0,19	13,929	3,850	0,310	2.4e-2	10,269	12.23
60	5	13,989	0,1	13,889	3,940	0,555	1.1e-1	10,049	12.03
40	5	14,286	0,27	14,016	3,880	0.270	1.1e-1	10,406	11.88
20	5	13,757	0,07	13,687	2,765	0,260	3.3e-2	10,992	11.77
1	5	14,008	0,4	13,608	3,840	0,655	5.6e-2	10,168*	11.71
1	20	13,800	0,1	13,700	2,740	0,350	3.4e-2	11,060	11.94
20	20	13,897	0,09	13,807	2,255	0,380	2.3e-2	11,642*	11.94
40	20	14,133	0,275	13,858	3,890	0,440	5.1e-2	10,243	12.09
43	20	14,277	0,34	13,937	3,821	1,200	--------	10,456	12.12
46	20	14,094	0,18	13,914	3,645	0,340	6.4e-2	10,449	12.13
49	20	14,020	0,11	13,910	3,690	0,357	1.2e-1	11,330	12.14
50	20	13,981	0,08	13,901	3,690	2,100	--------	10,291	12.16
51	20	14,247	0,37	13,877	3,890	0,350	8.3e-2	10,357	12.16
54	20	14,246	0,36	13,886	3,830	0,365	6.8e-2	10.416	12.17
57	20	14,153	0,35	13,803	3,780	0,410	5.7e-2	10,373	12.10
50	21	14,070	0,12	13,950	3,720	0,353	7.2e-2	10,350	12.16
50	27	15,160	0,13	15,030	4,280	0,300	--------	10,880	12.25
50	30	14,874	0,18	14,694	4,210	0,340	8.9e-2	10,664	12.29
50	34	13,972	0,12	13,852	3,555	0,385	2.9e-2	10,417	12.37
50	40	13,822	0,33	13,492	3,500	0,365	2.1e-2	10,322	12.48
60	40	13,792	0,33	13,462	3,500	0,450	1.6e-2	10,182	12.54
40	40	13,964	0,18	13,784	3,400	0,320	6.6e-2	10,564	12.35

Tableau C.1 (suite) : Caractéristiques des piézomètres

Y	X	Él.piéz. (m)	S.tuyau (m)	Él.sol (m)	L.piéz. (m)	L.crép. (m)	K (cm/s)	Él.argile (m)	n. piéz. (m)
80	40	13,667	0,05	13,617	1,150	0,330	4.7e-2	-	12.81
60	60	13,719	0,08	13,639	1,780	0,380	1.0e-2	-	12.72
60	80	14,072	0.18	13,892	3,410	0,380	5.1e-2	10,712	12.91
90	80	13,742	0,38	13,362	1,190	0,350	--------	-	13.00
40	80	13,794	0,05	13,744	1,805	0,370	1.6e-2	-	12.79
30	80	13,848	0,1	13,748	3,340	0,320	7.9e-2	10,508	12.79
20	80	13,842	0,07	13,772	1,960	0,400	3.1e-2	-	12.60
1	80	13,732	0,12	13,612	3,400	0,365	2.7e-2	10,332	12.61
1	60	14,174	0,07	14,104	2,195	0,450	2.9e-2	-	12.40
20	60	13,664	0,11	13,554	1,670	0,350	5.4e-2	-	12.47
1	40	14,657	0,08	14,577	2,820	0,350	3.0e-2	-	12.40
20	40	14,895	0,07	14,825	3,360	0,500	4.6e-2	11,535*	12.28
50	24	14,609	0,36	14,249	3,855	0.364	1.2e-1	10,754	12.22
100	-25	13,163	0,03	13,133	0,620	0,200	--------	-	11.54
1	-25	12,861	0,03	12,831	0,800	0,250	--------	-	11.23
-74	0	13,341	0	13,341	1,700	1,450	--------	-	--------
40	60	13,687	0,09	13,597	1,610	0,325	4.9-2	-	12.60
-66	80	13,250	0,07	13,180	1,760	0,450	--------	-	--------
28	167	13,538	0,39	13,148	1,180	0,350	--------	-	--------

Tableau C.2 : Contribution des observations à la valeur de la fonction objective

Position des piézomètres		Scénario 1		Scénario 2	
X (m)	y(m)	initial (%)	final (%)	initial (%)	final (%)
-80	40	2.03	0.13	0.96	0.15
-80	20	5.94	0.06	5.53	0.35
-60	60	1.54	0.07	0.79	0.25
-60	40	6.99	0.35	9.03	1.26
-60	20	2.67	19.03	2.79	12.59
-57	20	16.32	**60.96**	3.10	**57.23**
-55	20	4.43	0.31	0.65	1.32
-50	40	11.37	1.58	19.93	5.00
-50	34	7.56	0.17	13.05	3.18
-50	30	4.79	1.02	7.53	0.65
-50	28	4.04	0.30	6.13	0.65
-50	24	2.93	5.54	4.77	4.32
-50	20	2.00	7.06	2.45	2.86
-49	20	2.05	0.41	1.70	0.22
-47	20	1.99	0.11	1.91	0.19
-43	20	2.16	0.10	2.36	0.88
-40	60	2.38	0.07	3.98	0.35
-40	40	6.35	0.55	6.33	6.52
-40	20	1.90	1.68	1.59	0.55
-20	60	1.73	0.10	0.92	0.50
-20	40	6.25	0.16	3.10	0.25
-20	20	2.58	0.21	1.38	0.72

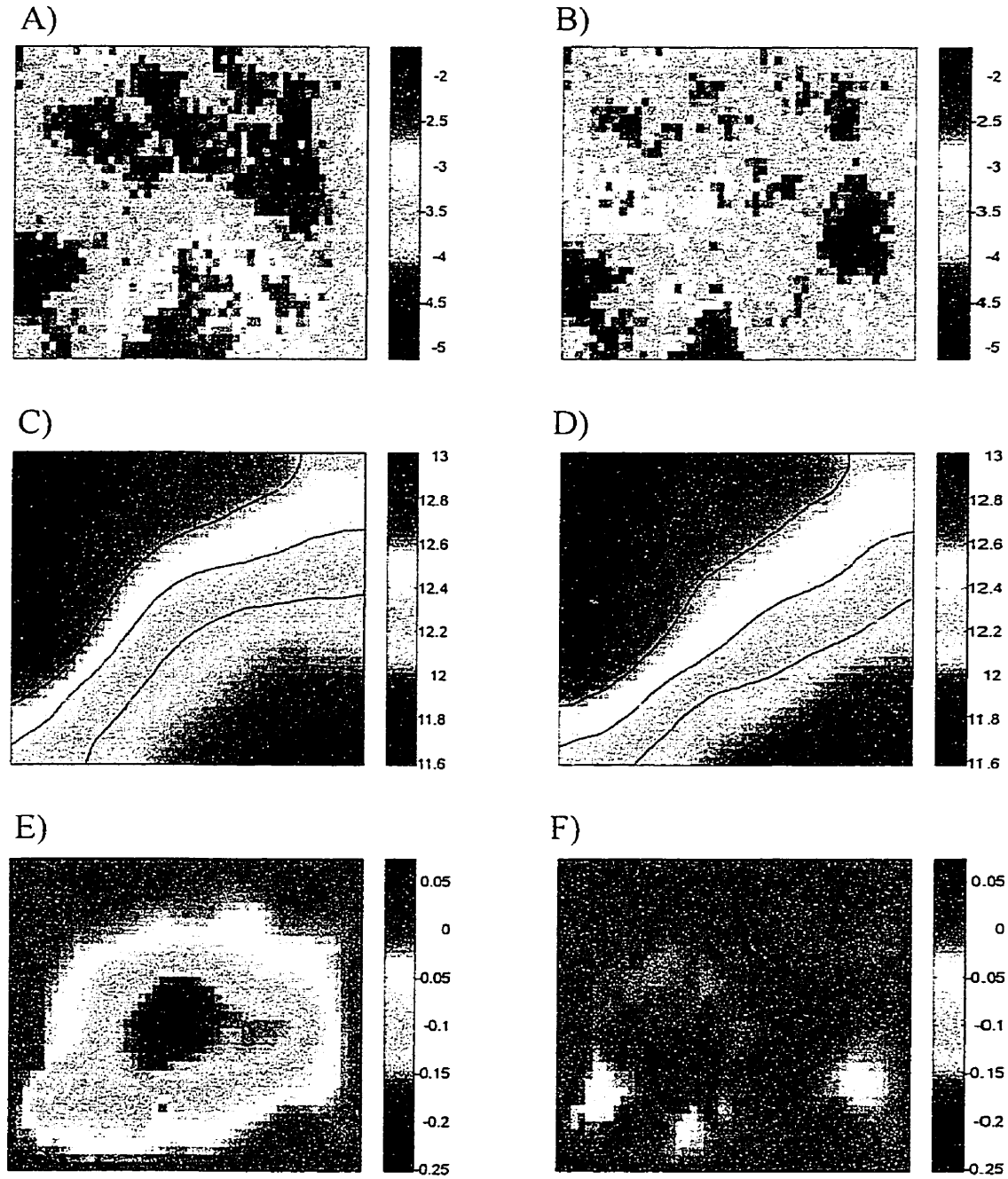


Figure C.1: Optimisation, Lachenaie, scénario 1. Transmissivités simulées (A) et optimisées (B), charges hydrauliques initiales (C) et optimisées (D), charges initiales - charges krigées (E) et charges optimisées - charges krigées (F).

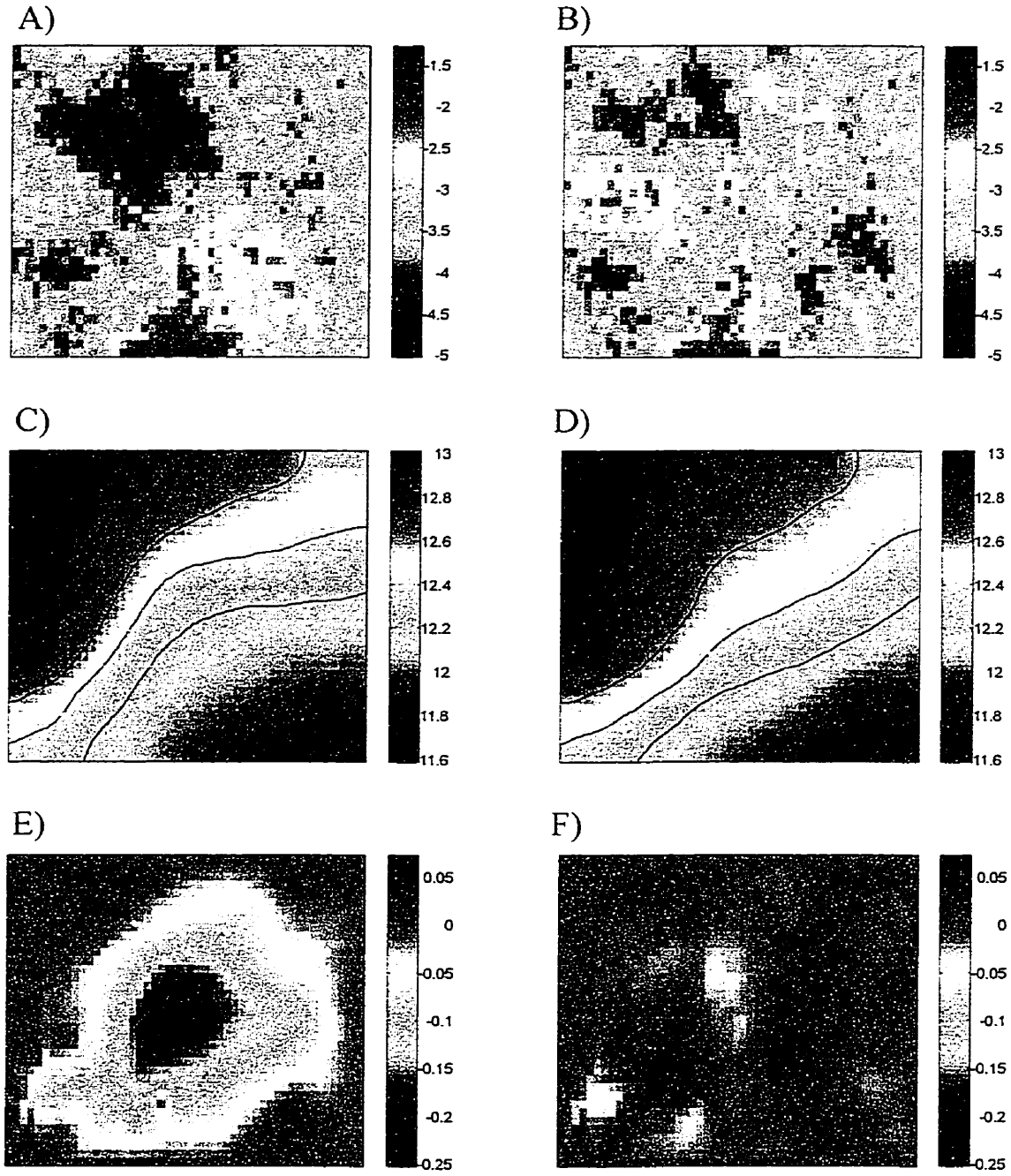


Figure C.2: Optimisation, Lachenaie, scénario 2. Transmissivités simulées (A) et optimisées (B), charges hydrauliques initiales (C) et optimisées (D), charges initiales - charges krigées (E) et charges optimisées - charges krigées (F).

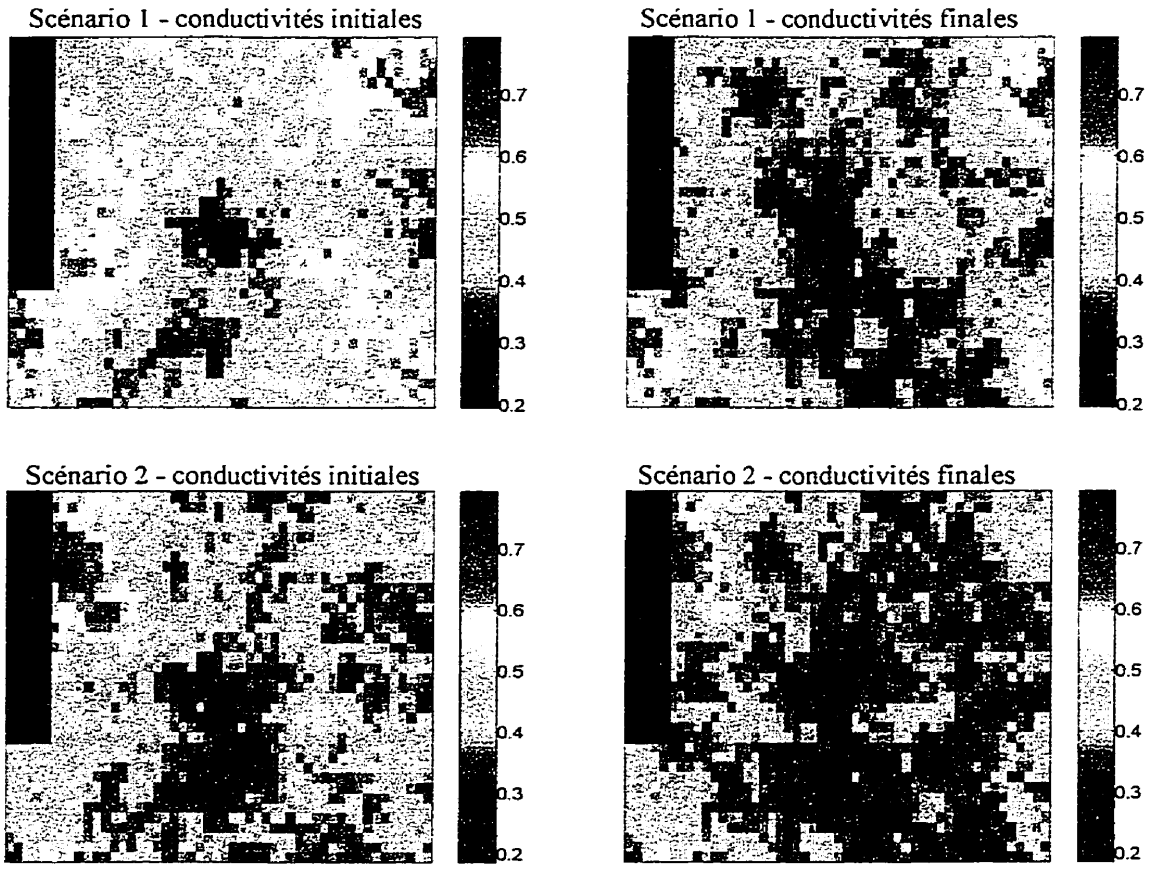


Figure C.3: Images des écart-types des conductivités hydrauliques initiales et finales - aquifère de Lachenaie

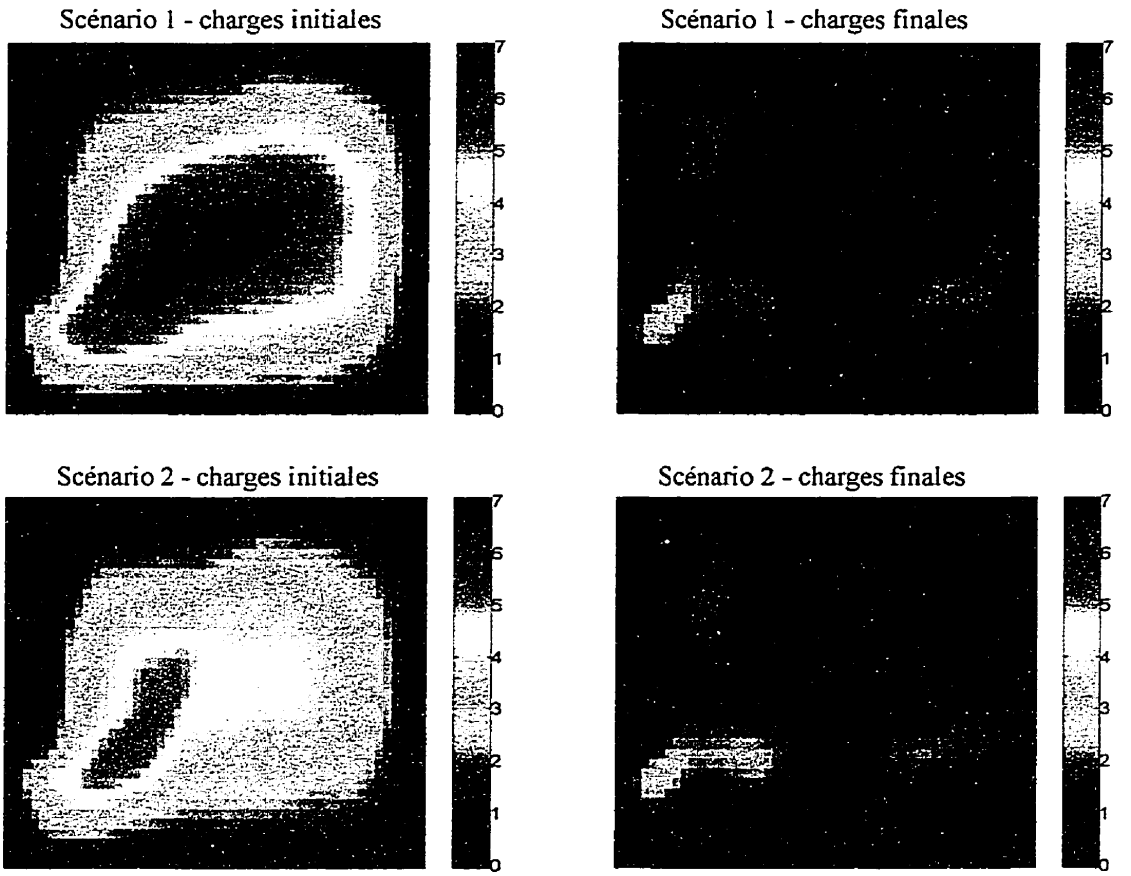


Figure C.4: Images des écart-types des charges hydrauliques initiales et finales - aquifère de Lachenaie

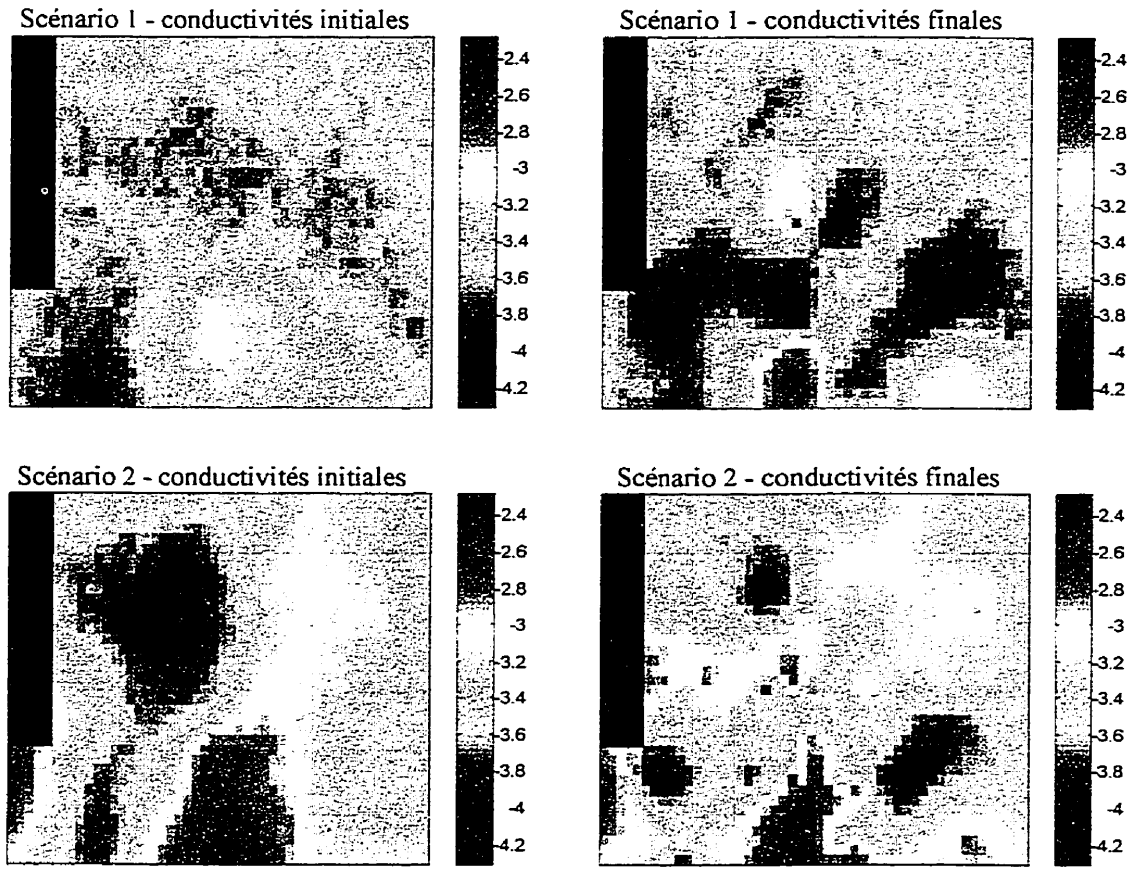


Figure C.5: Images des moyennes des conductivités hydrauliques initiales et finales - aquifère de Lachenaie

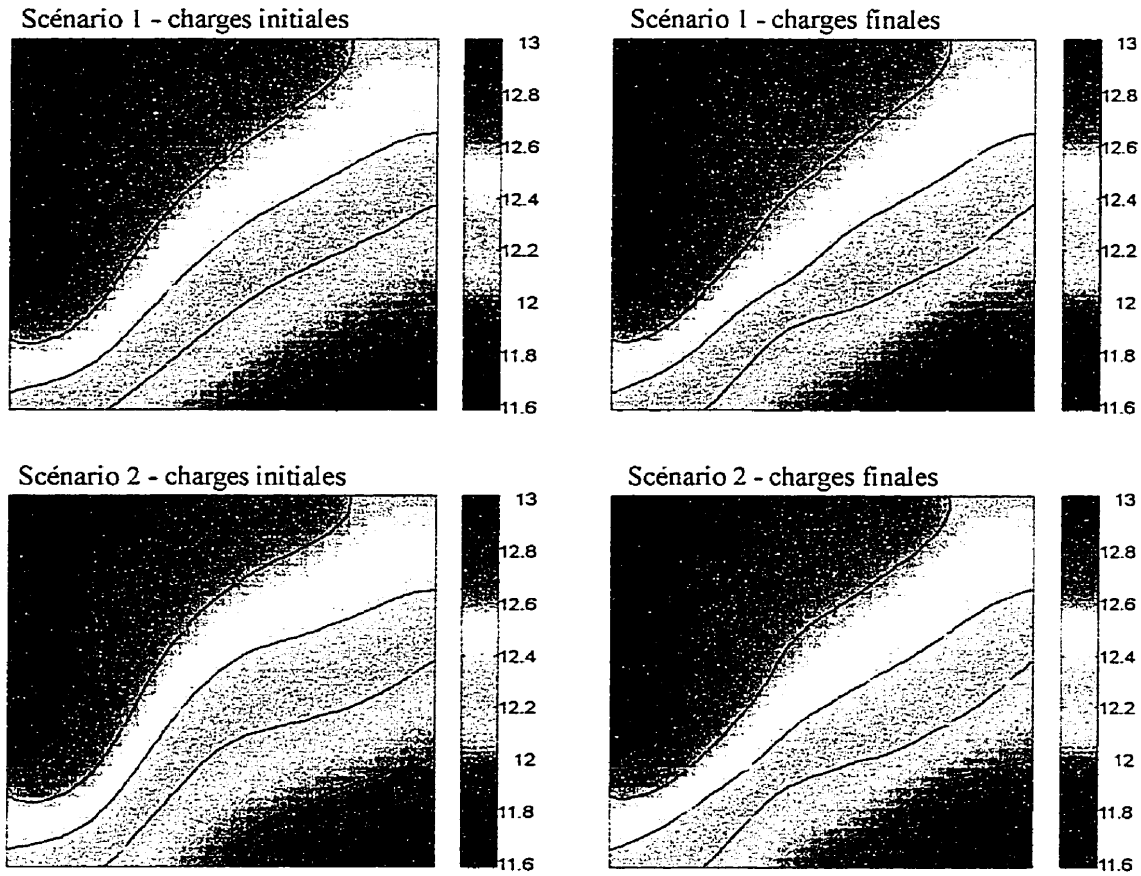


Figure C.6: Images des moyennes des charges hydrauliques initiales et finales - aquifère de Lachenaie

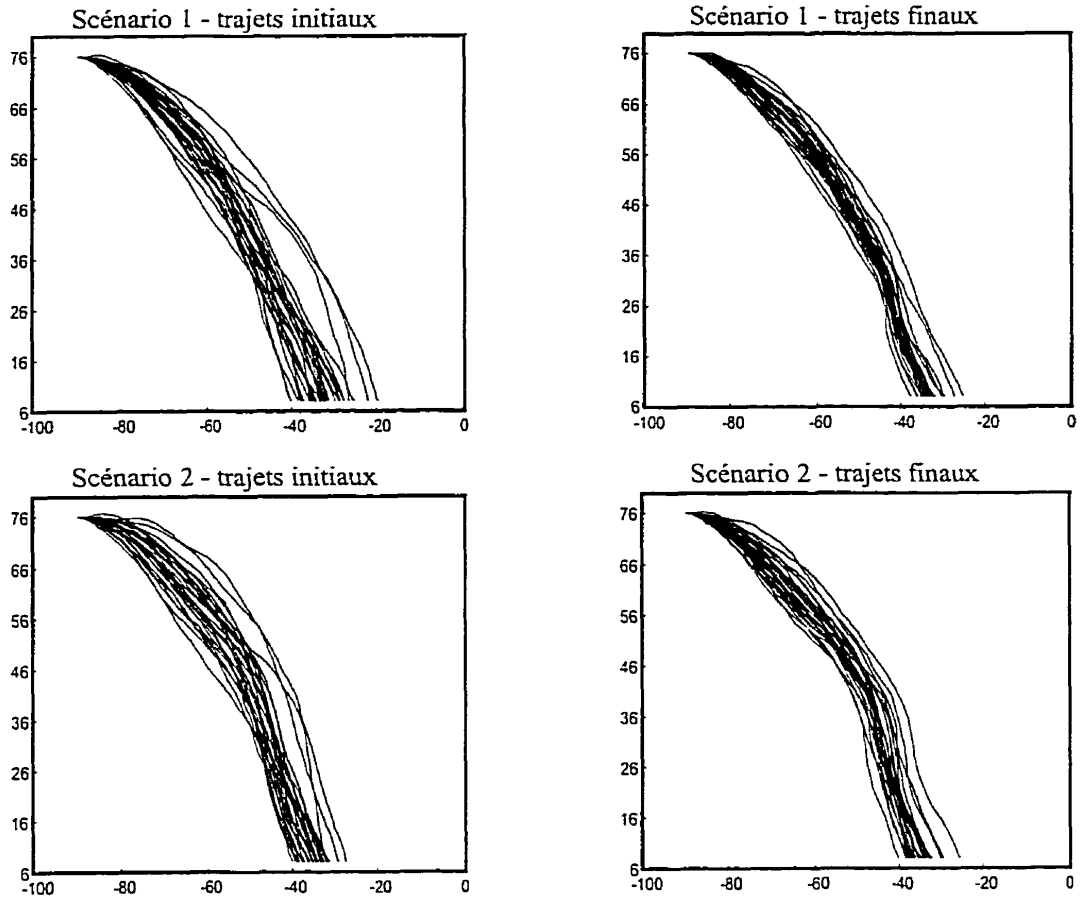


Figure C.7: Trajets initiaux et finaux des particules - aquifère de Lachenaie

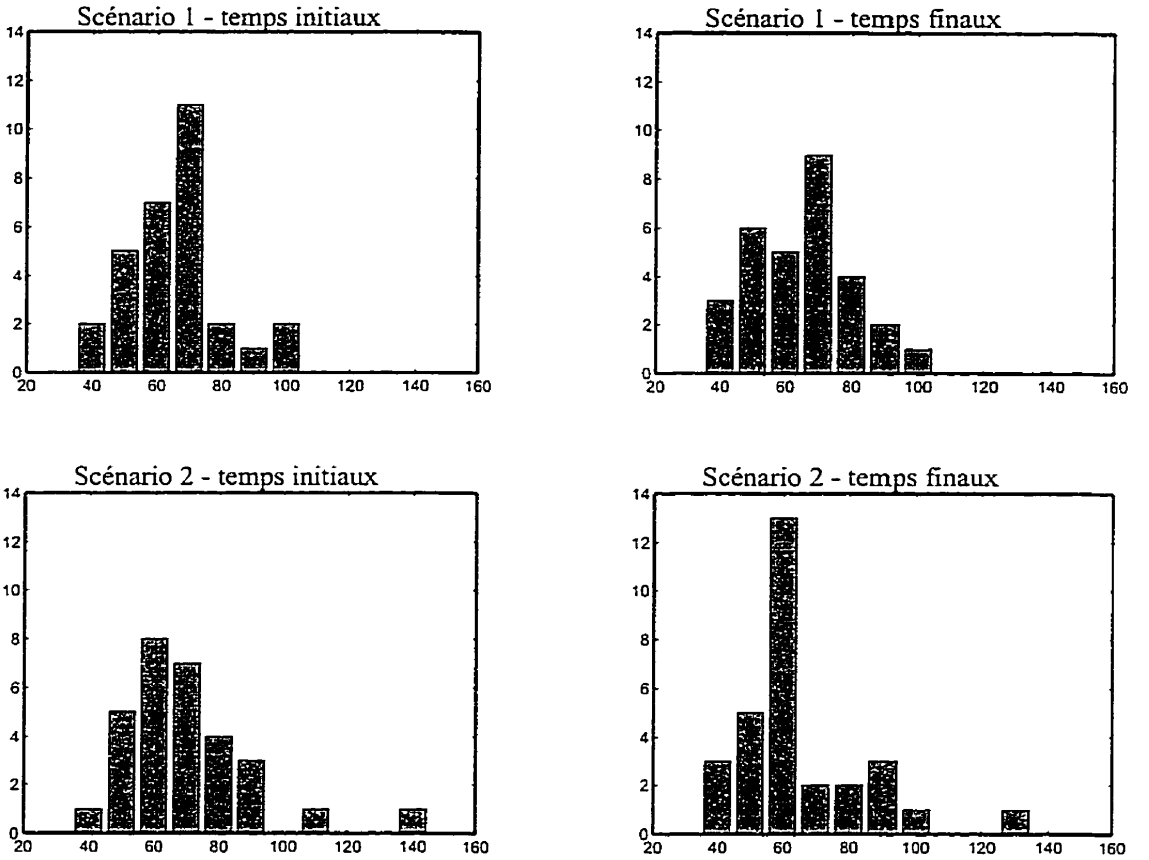
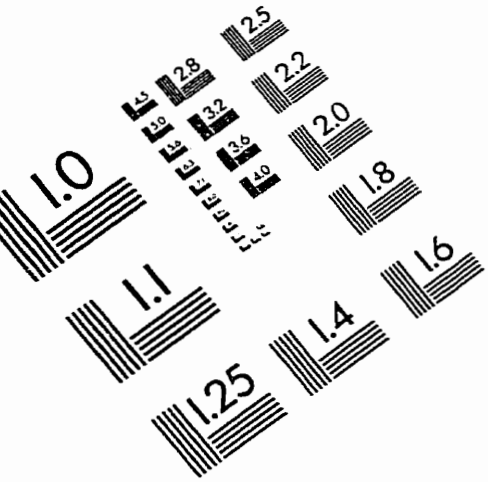
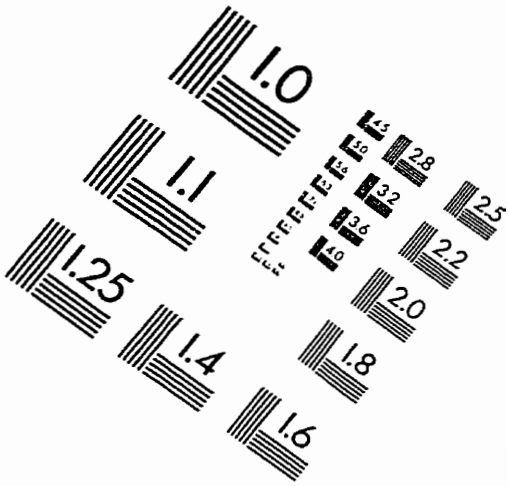
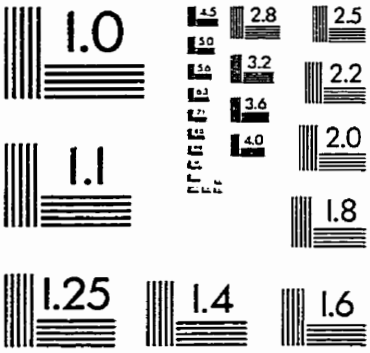


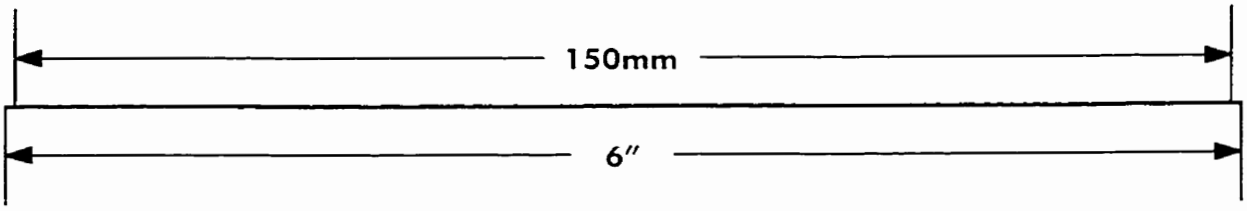
Figure C.8: Histogrammes des temps de parcours initiaux et finaux - aquifère de Lachenaie

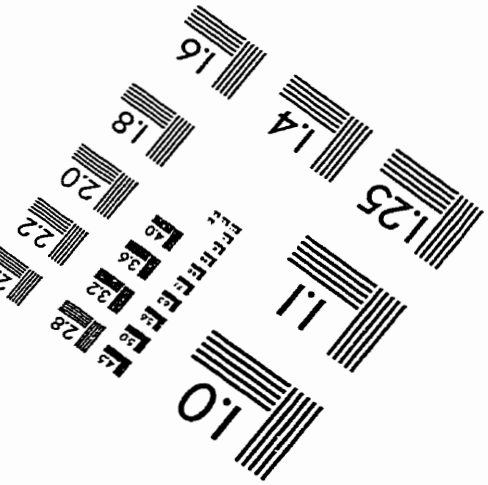
IMAGE EVALUATION TEST TARGET (QA-3)

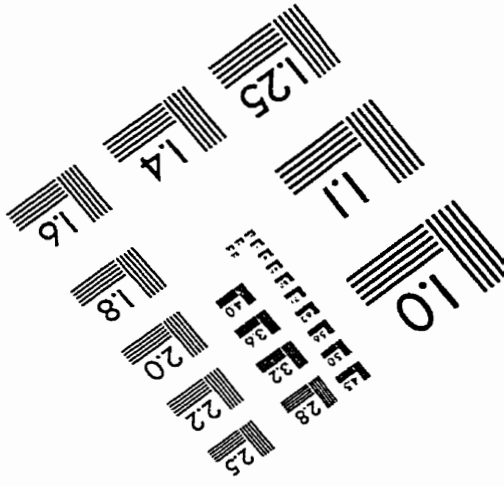










APPLIED IMAGE, Inc
1653 East Main Street
Rochester, NY 14609 USA
Phone: 716/482-0300
Fax: 716/288-5989

© 1993, Applied Image, Inc., All Rights Reserved