

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

RÉSOLUTION DU PROBLÈME INVERSE EN HYDROGÉOLOGIE PAR UNE
ESTIMATION SUCCESSIVE DES FLUX

PHILIPPE PASQUIER
DÉPARTEMENT DES GÉNIES CIVIL, GÉOLOGIQUE ET DES MINES
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIÆ DOCTOR (Ph. D.)
(GÉNIE MINÉRAL)

Juin 2005

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Cette thèse intitulée:

RÉSOLUTION DU PROBLÈME INVERSE EN HYDROGÉOLOGIE PAR UNE
ESTIMATION SUCCESSIVE DES FLUX

présentée par: PASQUIER Philippe

en vue de l'obtention du diplôme de: Philosophiæ Doctor

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

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

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

M. LAROCQUE Marie, Ph.D., membre

M. THERRIEN René, Ph.D., membre

*à un accident de vélo
à mon casque aussi*

Remerciements

Je tiens d'abord à exprimer toute ma gratitude à mon directeur de recherche Denis Marcotte. Son enthousiasme, son discernement, ses commentaires toujours constructifs mais aussi l'excellence de son encadrement sont autant d'éléments qui ont été déterminants lors de l'accomplissement de ce travail. Qu'il soit ici chaleureusement remercié.

J'adresse des remerciements aux membres du jury, madame Marie Larocque, messieurs Robert P. Chapuis, Claude Marche et René Therrien pour avoir pris le temps de lire et de juger ce manuscrit.

Je tiens à souligner la participation financière du CRSNG et des firmes Golder Associés inc., HydrogéPlus inc. et Donat Bilodeau Experts-Conseils inc. La réalisation de cette thèse n'aurait pu être possible sans leur participation respective à ce projet.

Je ne saurais passer sous silence l'incalculable contribution de Bernard Giroux et de Benoît Tournier, associés de recherche au laboratoire de Géophysique de l'École Polytechnique de Montréal. Ces remerciements sont bien peu comparativement aux dimanches passés à faire la maintenance du système informatique du laboratoire mais grâce à eux, j'ai toujours eu accès à des stations de travail et à un réseau informatique hors pair.

J'adresse également des remerciements particuliers à ma sœur Magali. Son penchant pour les écrits clairs et ses remarques constructives m'ont grandement aidé lors de la rédaction de ce manuscrit.

L'achèvement d'une thèse est un travail de longue haleine dans lequel les rapports quotidiens avec les autres étudiants comptent beaucoup. Les innombrables discussions et parties de *aki* avec les membres du laboratoire m'ont été de précieuses soupapes. Un grand merci à tous les copains du labo : Abderrezak, Benoît, Bernard, Camille, Circé, Erwan, Jérôme, Maria, Martine, Mélissa, Nicolas, Olivier, Sébastien et Stefka.

Finalement, les derniers mais non les moindres, ma famille et mes amis qui m'ont témoigné un constant et indéfectible soutien tout au long de ces années de recherche.

Résumé

La complexité des problèmes environnementaux nécessite l'utilisation d'outils numériques pouvant simuler la migration d'une eau souterraine polluée en milieu hétérogène. En l'absence d'une connaissance juste et précise des propriétés hydrauliques de l'aquifère, l'utilisation des méthodes numériques reste néanmoins précaire et peut mener à des estimations fortement erronées des temps de transfert et du parcours d'un polluant. La détermination de la distribution spatiale des propriétés hydrauliques est un problème complexe qui a donné naissance à une pléiade de méthodes d'inversion. Malgré les efforts déployés depuis une quarantaine d'années, l'obtention d'une solution au problème inverse demeure une opération longue et délicate.

Dans cette thèse, une solution au problème inverse en hydrogéologie est apportée pour les régimes permanent et transitoire. L'approche s'appuie sur une résolution itérative et discrète du problème de Cauchy s'apparentant à la méthode du modèle de comparaison. Des modifications sont apportées à l'algorithme afin de tenir compte des situations transitoires et une fonction d'amortissement est ajoutée afin de favoriser une convergence régulière et préserver la structure de la solution initiale. La méthode nécessitant un champ de charges hydrauliques, celui-ci est obtenu par krigage universel avec dérive de puits et conditions frontières imposées.

La méthode est évaluée dans un cadre stochastique et comparée à un modèle synthétique de transmissivités. Il est démontré que la méthode est apte à calibrer des solutions initiales de transmissivités très différentes du champ de référence et fournit en fin de processus des images comparables au modèle synthétique. Nos résultats montrent qu'en présence d'erreurs d'estimation sur la charge hydraulique, l'ajout d'un amortissement apporte beaucoup de robustesse et de stabilité à l'inversion.

Parmi les fonctions d’amortissement évaluées, le schéma d’amortissement exponentiel est celui qui a montré les meilleurs résultats. Pour le cas étudié, il est montré que les paramètres contrôlant la décroissance du coefficient d’amortissement n’exigent pas un ajustement délicat de la part de l’opérateur.

Nos expérimentations indiquent que la reconstruction du champ de transmissivités est très adéquate même lorsqu’une estimation de la carte piézométrique est utilisée. De plus, la reconstruction du champ de paramètres et l’ajustement des charges s’améliore avec le nombre d’observations piézométriques à calibrer ce qui n’est pas nécessairement le cas pour les autres méthodes d’inversion. Par ailleurs, le degré de lissage du champ de paramètres apparaît proportionnel au lissage du champ de charges utilisé lors de l’inversion.

La comparaison des inversions faites en régime permanent et transitoire indique que la reconstruction du champ de paramètres et la détermination des périmètres de protection bénéficient de l’information supplémentaire contenue dans la variation temporelle des charges hydrauliques.

L’approche proposée ne faisant pas appel à des méthodes d’optimisation non-linéaires, la calibration est réalisée en quelques résolutions du problème direct, ce qui en fait un outil particulièrement approprié à la réalisation d’inversions stochastiques.

La calibration d’un modèle numérique représentant l’aquifère expérimental de Lachenaie a montré que la méthode pouvait à la fois caler presque parfaitement des mesures piézométriques tout en reproduisant relativement bien les mesures de conductivité locales faites sur le site. Par ailleurs, nos résultats ont montré que l’apport des mesures de conductivité à l’inversion demeure locale et contribue assez peu à la définition de l’ensemble des conductivités hydrauliques.

Abstract

The complexity of environmental problems requires the use of numerical tools capable of simulating polluted ground water migration in heterogeneous media. In the absence of exact knowledge of aquifer hydraulic properties, the use of numerical methods remains precarious and can lead to highly erroneous estimations of pollutant travel time and pathway. The determination of spatial distribution of hydraulic properties is a complex problem which has given rise to many inversion methods. In spite of the efforts deployed in the last forty years, obtaining a solution to the inverse problem remains a long and delicate procedure.

In this thesis, a solution to the hydrogeological inverse problem is provided under steady state and transient assumptions. The approach rests on an iterative and discrete solution of the Cauchy problem resembling the Comparison Model Method. Some modifications are introduced in the algorithm to account for transient conditions and a damping function is included in order to favor regular convergence and preserve the initial solution structure. Since the method requires a hydraulic head field, the head field is obtained by universal kriging with well drift and imposed boundary conditions.

The method is evaluated in a stochastic framework and compared to a synthetic transmissivity model. It is demonstrated that the method is able to calibrate initial transmissivity solutions different from the reference field and provide after inversion, images similar to the synthetic model. Our results indicate that in the presence of hydraulic head estimation errors, the damping factor lends robustness and stability to the inversion.

Among the damping functions evaluated, the exponential damping function showed the best results. For the case studied, it is shown that the controlling parameters do not require fine tuning from the operator.

Our tests indicate that the reconstruction of the transmissivity field is adequate even when an estimation of the piezometric map is used. Moreover, the reconstruction of the parameter field and the head adjustment improve when the number of piezometric observations to calibrate increases which is not necessarily the case with other inversion methods. In addition, the degree of smoothing of the parameter field appears proportional to the head field smoothing used during the inversion.

The comparison between the inversions performed under steady state and unsteady conditions indicates that the reconstruction of the parameter field and the wellhead protection benefit from the additional information held in the temporal hydraulic head variation.

Since the proposed approach does not use non-linear optimization methods, the calibration is performed in only a few direct problem solutions, which makes the method a particularly appropriate tool for the realization of stochastic inversions.

The calibration of a numerical model representing the Lachenaie experimental aquifer shows that the method can perfectly calibrate the piezometric measurements and reproduce relatively easily the local transmissivity measurements made on site. In addition, the results show that the effect of hydraulic conductivity measurements in the inversion process remain local and their use contributes very little to the determination of hydraulic conductivity.

Table des matières

DÉDICACE	iv
REMERCIEMENTS	v
RÉSUMÉ	vii
ABSTRACT	ix
TABLE DES MATIÈRES	xi
LISTE DES FIGURES	xv
LISTE DES TABLEAUX	xxi
LISTE DES ANNEXES	xxiii
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xxiv
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 : REVUE DE LA LITTÉRATURE	5
1.1 Méthodes d'optimisation	9
1.2 Méthodes d'inversion géostatistiques	11
1.2.1 Méthodes linéaires	12
1.2.2 Méthodes non-linéaires	13
1.3 Méthodes d'inversion basées sur le champ de charges hydrauliques . .	17
1.3.1 Méthodes de résolution du problème de Cauchy	17
1.3.2 Méthodes d'inversion algébrique	22

CHAPITRE 2 : RÉOLUTION DU PROBLÈME INVERSE

PAR UNE ESTIMATION SUCCESSIVE DES FLUX	24
2.1 Estimation successive des flux en régime permanent	25
2.2 Estimation successive des flux en régime transitoire	30
2.3 Estimation des charges hydrauliques	32
2.4 Méthode des éléments finis	35
2.5 Aspects opérationnels	40
2.5.1 Schémas d'amortissement	40
2.5.2 Facteur de correction	41
2.5.3 Contraintes sur les coefficients	43
2.6 Outil de calcul développé	44

CHAPITRE 3 : MODÈLE SYNTHÉTIQUE ET NORMES

D'ÉVALUATION	49
3.1 Description du modèle synthétique	50
3.1.1 Géométrie et conditions frontières	50
3.1.2 Discrétisation du domaine	51
3.1.3 Transmissivités du modèle de référence	52
3.1.4 Charges hydrauliques du modèle de référence	53
3.1.5 Trajectographie et temps de transfert de référence	57
3.2 Description des normes d'évaluation	59
3.2.1 Erreur déterministe d'ajustement des charges	60
3.2.2 Erreur déterministe de reconstruction des transmissivités	61
3.2.3 Erreur stochastique d'ajustement et de reconstruction	61
3.3 Caractérisation des germes de transmissivité	62
3.4 Charges hydrauliques estimées	65

CHAPITRE 4 : EXEMPLES NUMÉRIQUES D'INVERSION

ET TEMPS DE CALCUL	70
4.1 Exemples numériques d'inversion	71
4.1.1 Estimation successive des flux en régime permanent	71
4.1.2 Estimation successive des flux en régime transitoire	79

4.1.3	Estimation successive des flux en régime permanent et en présence de recharge	83
4.1.4	Inversion 3D par la méthode de l'estimation successive des flux	85
4.1.5	Méthode des points maîtres en régime permanent	88
4.2	Temps de calcul	91
4.2.1	Estimation successive des flux en régime permanent	91
4.2.2	Estimation successive des flux en régime transitoire	92
4.2.3	Inversion en régime permanent par la méthode des points maîtres	94
4.3	Discussion	95

CHAPITRE 5 : DÉTERMINATION DES PARAMÈTRES

OPÉRATIONNELS	98
5.1 Détermination du schéma d'amortissement	99
5.2 Détermination des contraintes relatives	106
5.3 Détermination du facteur de correction	110
5.4 Détermination des poids temporels	111
5.5 Discussion	115

CHAPITRE 6 : INFLUENCE DES ERREURS D'ESTIMATION

PIÉZOMÉTRIQUES SUR LA QUALITÉ DES INVERSIONS . .		119
6.1	Reconstruction du champ de transmissivités	121
6.1.1	Exemples d'inversion en présence d'erreurs d'estimation sur h^R	121
6.1.2	Statistiques de reconstruction	126
6.2	Ajustement des charges hydrauliques	129
6.2.1	Exemples d'inversion en présence d'erreurs d'estimation sur h^R	129
6.2.2	Statistiques d'ajustement	134
6.3	Périmètres de protection stochastiques	136
6.4	Discussion	141

CHAPITRE 7 : APPLICATION À L'AQUIFÈRE DE LACHENAIE 145

7.1	Description du site	146
7.1.1	Champ piézométrique	146
7.1.2	Élévation du substratum et épaisseur saturée	148
7.1.3	Champ initial de transmissivité	149

7.1.4	Modèle numérique et paramètres de l'inversion	150
7.2	Inversion de l'aquifère de Lachenaie	151
7.2.1	Champ calibré de transmissivités	151
7.2.2	Ajustement des mesures piézométriques	154
7.3	Inversion contrainte par les mesures de conductivité	156
7.4	Discussion	158
CONCLUSIONS		159
RÉFÉRENCES		163
ANNEXES		173

Liste des figures

1.1	Classification proposée des méthodes inverses.	8
2.1	Algorithme schématique	28
2.3	Points de Gauss d'un élément fini	43
2.4	Algorithme schématique du programme principal HydroGeo_Inv . . .	47
2.5	Algorithme schématique de la méthode de l'estimation successive des flux	48
3.1	Géométrie du modèle synthétique. (a) Conditions frontières et (b) discrétisation	51
3.2	Champ de transmissivités du modèle de référence ($\log_{10} m^2/s$)	53
3.3	Plan variographique des transmissivités de référence ($\log_{10} m^2/s$) ² . .	54
3.4	Rabattement moyen dans l'aquifère et temps d'évaluation du problème direct en régime transitoire	55
3.5	Charges hydrauliques du modèle de référence à (a) $t = 0d$, (b) $t = 0.01d$, (c) $t = 0.12d$, (d) $t = 1.2d$, (e) $t = 11.6d$, (f) $t = \infty d$ en (m) .	56
3.6	Logarithme de la magnitude du gradient hydraulique évaluée au centre des éléments en régime permanent (-)	57
3.7	(a) Trajectographie du modèle de référence et (b) distribution des temps de transfert	59
3.8	Localisation des mesures de T utilisées pour l'obtention des germes .	63
3.9	Exemples de germes utilisés lors des expériences de Monte Carlo. (a) percentile 10 et (b) percentile 90 en terme de ($MAE(Y^0, Y^R)$)	64
3.10	Plans variographiques de $\log_{10} T$ des germes présentés à la figure 3.9.	64

3.11	Variogrammes de l'ensemble des germes et du modèle de référence (en gras) $(\log_{10} T)^2$. (a) Direction est-ouest et (b) nord-sud.	65
3.12	Configuration des points doublons.	66
3.13	Localisation des piézomètres et charges krigées à $t = \infty$ (m). (a) 100 piézomètres, (b) 50 piézomètres, (c) 25 piézomètres et (d) 10 piézomètres.	68
3.14	Localisation des piézomètres et charges krigées à $t = 0.12d$ (m). (a) 100 piézomètres, (b) 50 piézomètres, (c) 25 piézomètres et (d) 10 piézomètres.	69
4.1	Modèle de référence. (a) Champ de $\log_{10}T$ et (b) charges (m).	71
4.2	Exemple 1 réalisé par la méthode de l'estimation successive des flux en régime permanent avec le germe 96. (a) Champ de $\log_{10}T$ initial et (b) charges initiales (m), (c) champ de $\log_{10}T$ calibré et (d) charges ajustées (m).	72
4.3	Exemple 2 réalisé par la méthode de l'estimation successive des flux en régime permanent. (a) Champ de $\log_{10}T$ initial et (b) champ de $\log_{10}T$ calibré.	73
4.4	Exemple 3 réalisé par la méthode de l'estimation successive des flux en régime permanent. (a) Champ de $\log_{10}T$ initial et (b) champ de $\log_{10}T$ calibré.	74
4.5	Exemple 4 réalisé par la méthode de l'estimation successive des flux en régime permanent. (a) Champ de $\log_{10}T$ initial et (b) champ de $\log_{10}T$ calibré.	75
4.6	Exemple 5 réalisé par la méthode de l'estimation successive des flux en régime permanent avec un germe de T uniforme de $10^{-4}m^2/s$. (a) Champ de $\log_{10}T$ initial et (b) charges initiales (m), (c) champ de $\log_{10}T$ calibré et (d) charges ajustées (m).	76
4.7	Schématisation des points de stagnation	77
4.8	Exemple 6 réalisé par la méthode de l'estimation successive des flux en régime transitoire avec le germe 96. (a) champ de $\log_{10}T$ initial et (b) champ de $\log_{10}T$ calibré.	79

4.9	Exemple 7 réalisé par la méthode de l'estimation successive des flux en régime transitoire. (a) Champ de $\log_{10}T$ initial et (b) champ de $\log_{10}T$ calibré.	80
4.10	Exemple 8 réalisé par la méthode de l'estimation successive des flux en régime transitoire. (a) Champ de $\log_{10}T$ initial et (b) champ de $\log_{10}T$ calibré.	81
4.11	Exemple 9 réalisé par la méthode de l'estimation successive des flux en régime transitoire. (a) Champ de $\log_{10}T$ initial et (b) champ de $\log_{10}T$ calibré.	82
4.12	Exemple 10 réalisé par la méthode de l'estimation successive des flux en régime transitoire avec un germe de T uniforme de $10^{-4}m^2/s$. (a) champ de $\log_{10}T$ calibré et (b) charges ajustées (m).	83
4.13	Exemple d'inversion en présence d'une recharge par la méthode de l'estimation successive des flux avec le germe 96. (a) champ de recharges (mm/an), (b) charges de référence (m), (c) champ de $\log_{10}T$ calibré et (d) charges ajustées (m).	84
4.14	Géométrie du modèle numérique et zonation utilisée pour la solution initiale.	86
4.15	Inversion tridimensionnelle en régime transitoire. Coupes du champ de conductivités hydrauliques ($\log_{10}(m/s)$) pour (a) champ calibré ($y=1000m$), (b) champ de référence ($y=1000m$), (c) champ calibré ($x=500m$), (d) champ de référence ($x=500m$), (e) champ calibré ($z=200m$), (f) champ de référence ($z=200m$).	87
4.16	Comparaison de la méthode des points maîtres et de l'estimation successive des flux pour les exemples 1 et 4. (a) et (b) Champ de $\log_{10} T$ calibré par la méthode des points maîtres (exemple 1 et 4 respectivement); (c) et (d) Champ de $\log_{10} T$ calibré par la méthode de l'estimation successive des flux (exemple 1 et 4).	90
5.1	Évolution des schémas d'amortissement 1 à 10	100
5.2	Évolution des erreurs pour les schémas d'amortissement 1 à 10. (a) $EMAE(Y^i, Y^R)$ et (b) $EMAE(h^i, h^R)$	101

5.3	Apport de l'amortissement en présence d'erreur d'estimation sur $\hat{h}$. (a) Schéma d'amortissement 4 avec $\beta = 0$ et (b) Schéma d'amortissement 10 avec $\beta = 0.025$	103
5.4	Évolution des schémas d'amortissement 10 à 15	105
5.5	Évolution des erreurs pour les schémas d'amortissement 10 à 15. (a) $EMAE(Y^i, Y^R)$ et (b) $EMAE(h^i, h^R)$	106
5.6	Évolution des erreurs pour les intervalles 1 à 4. (a) $EMAE(Y^i, Y^R)$ et (b) $EMAE(h^i, h^R)$	109
5.7	Contraintes relatives moyennes activées à l'itération 30 pour les intervalles 1 à 4. (a) Contraintes minimales et (b) contraintes maximales	109
5.8	Évolution des erreurs pour différents facteurs de correction. (a) $EMAE(Y^i, Y^R)$ ($\log_{10}T$) et (b) $EMAE(h^i, h^R)$ (m)	112
5.9	Schéma temporel logarithmique	113
5.10	Évolution des erreurs pour les schémas temporels 1 à 3 pour le scénario piézométrique 6. (a) $EMAE(Y^i, Y^R)$ et (b) $EMAE(h^i, h^R)$	114
5.11	Algorithme schématique de la méthode de l'estimation successive des flux et paramètres itératifs utilisés	118
6.1	Champs de T obtenus pour les scénarios piézométriques 1 à 5 réalisés avec le germe 96 ($\log_{10}(m^2/s)$). (a) Champ de $\log_{10}T$ de référence, (b) à (f) champs de $\log_{10}T$ obtenus pour les scénarios piézométriques 1 à 5.	122
6.2	Champs de T obtenus pour les scénarios piézométriques 6 à 10 réalisés avec le germe 96 ($\log_{10}(m^2/s)$). (a) Champ de $\log_{10}T$ de référence, (b) à (f) champs de $\log_{10}T$ obtenus pour les scénarios piézométriques 6 à 10.	123
6.3	Erreur relative d'estimation des gradients pour les champs $\hat{h}$ des scénarios piézométriques 2 à 5. (a) à (d) $EAR(\nabla\hat{h}, \nabla h^R)$ pour les scénarios piézométriques 2 à 5.	125
6.4	Variation de la charge hydraulique à partir de la frontière Γ_1 à Γ_4 pour $y=1000$ m.	126

6.5	Variogrammes moyens des germes, du modèle de référence et des champs obtenus après inversion $(\log_{10} m^2/s)^2$. Ligne du haut : Scénarios piézométriques 1 à 5, ligne du bas : Scénarios piézométrique 6 à 10. Colonne de gauche : direction est-ouest, colonne de droite : direction nord-sud.	128
6.6	Champs de charges obtenus après calibration pour les scénarios piézométriques 1 à 5 avec le germe 96 (m). (a) Champ de référence, (b) à (f) champs obtenus pour les scénarios piézométriques 1 à 5.	130
6.7	Champs de charges obtenus après calibration pour les scénarios piézométriques 6 à 10 avec le germe 96 (m) à $t = 0.12d$. (a) Champ de référence, (b) à (f) champs obtenus pour les scénarios piézométriques 6 à 10.	131
6.8	Comparaison des charges hydrauliques observées et ajustées pour les scénarios piézométriques 2 à 5 avec le germe 96. (a) à (d) scénarios piézométriques 2 à 5.	132
6.9	Comparaison des charges hydrauliques observées et ajustées pour les scénarios piézométriques 7 à 10 avec le germe 96. (a) à (d) scénarios piézométriques 7 à 10. Les charges observées à $t = 0.01, 0.12, 1.2, 11.6$ et $116d$ sont représentées.	133
6.10	Trajectographie des particules ayant un temps de transfert $t_{CAP} \leq 3$ ans pour le modèle de référence.	137
6.11	Trajectographie des particules ayant un temps de transfert $t_{CAP} \leq 3$ ans pour les germes 63 et 71 et périmètre de protection de référence (-). Trajectographie préalablement à l'inversion pour les germes (a) 63 et (b) 71. Trajectographie après inversion pour les germes (c) 63 et (d) 71.	138
6.12	Périmètre de protection stochastique pour une probabilité de capture de 3 ans ($P_{Cap}(t \leq 3ans)$). (a) à (e) scénarios piézométriques 1 à 5. .	139
6.13	Périmètre de protection stochastique pour une probabilité de capture de 3 ans ($P_{Cap}(t \leq 3ans)$). (a) à (e) scénarios piézométriques 6 à 10. .	140
7.1	Localisation des piézomètres et carte de charges hydrauliques au site de Lachenaie à partir des mesures relevées par Gagnon (1998) le 23 novembre 1996 (m).	147

7.2	Variogramme omnidirectionnel de (a) l'élévation de l'argile (m^2) et (b) des transmissivités déduites des essais <i>in situ</i> ($\log_{10}(m^2/s)$) ²	148
7.3	Sondages ayant atteint le substratum imperméable et cartes krigées de (a) l'élévation du substratum imperméable (m) et (b) de l'épaisseur saturée de l'aquifère de Lachenaie (m).	149
7.4	Localisation des essais de perméabilité <i>in situ</i> et résultats de l'inversion. (a) Transmissivités initiales ($\log_{10}(m^2/s)$), (b) conductivités hydrauliques initiales ($\log_{10}(m/s)$), (c) transmissivités optimisées ($\log_{10}(m^2/s)$) et (d) conductivités hydrauliques optimisées ($\log_{10}(m/s)$).	152
7.5	Comparaison des mesures et des résultats de l'inversion au site de Lachenaie. (a) Conductivité hydraulique (m/s) et (b) charge hydraulique (m).	153
7.6	Résultat de l'inversion sous contrainte des mesures de T/K . (a) Champ de transmissivités ($\log_{10}(m^2/s)$) et (b) champ de conductivités hydrauliques ($\log_{10}(m/s)$).	157
D.1	Trajectoire d'une particule initialement située en (4000,3075).	180

Liste des tableaux

2.1	Coordonnées et poids d'intégration de points de Gauss pour un élément triangulaire	39
3.1	Scénarios piézométriques évalués et erreurs d'estimation des charges .	67
4.1	Erreurs finales et initiales () des exemples des figures 4.2 à 4.6. . . .	78
4.2	Erreurs finales et initiales () des exemples des figures 4.8(b) à 4.12. .	82
4.3	Comparaison des erreurs obtenues par la méthode des points maîtres et de l'estimation successive des flux.	89
4.4	Répartition du temps de calcul dans <i>HydroGeo_Inv</i> lors d'une inversion en régime permanent par la méthode de l'estimation successive des flux.	92
4.5	Répartition du temps de calcul dans <i>HydroGeo_Inv</i> lors d'une inversion en régime transitoire par la méthode de l'estimation successive des flux.	93
4.6	Répartition du temps de calcul dans <i>HydroGeo_Inv</i> lors d'une inversion en régime permanent par la méthode des points maîtres.	94
5.1	Paramètres et performance des schémas d'amortissement 1 à 10. Espérance des erreurs et écart-type correspondant ().	102
5.2	Apport de l'amortissement en présence d'erreur d'estimation sur $\hat{h}$. Espérance des erreurs et écart-type correspondant ().	104
5.3	Paramètres et performance des schémas d'amortissement 10 à 15. Espérance des erreurs et écart-type correspondant ().	107

5.4	Nombre moyen de contraintes minimales et maximales activées à l'itération 30 et nombre d'éléments où Y^R n'est pas une valeur permise pour les intervalles 1 à 4.	108
5.5	Performance des intervalles 1 à 4. Espérance des erreurs et écart-type correspondant ().	110
5.6	Performance des différents facteurs de correction. Espérance des erreurs et écart-type correspondant ().	111
5.7	Valeurs de λ_k pour les schémas temporels évalués.	112
5.8	Performance des schémas temporels 1 à 3 pour les scénarios piézométriques 6 et 10. Espérance des erreurs et écart-type correspondant ().	115
6.1	Scénarios piézométriques et erreurs d'estimation des charges.	120
6.2	Statistiques de reconstruction pour les scénarios 1 à 10.	127
6.3	Statistiques d'ajustement des charges pour les scénarios 1 à 10 et écart-type correspondant ().	135
6.4	Effet de pépité moyen des champs de transmissivités ($C_{0Y^{30}}$) et effet de pépité des champs de charges hydrauliques $\hat{h}$ ($C_{0\hat{h}}$).	136
6.5	Erreur d'identification de la probabilité de capture.	142
7.1	Erreurs d'ajustement des charges piézométriques observées au site de Lachenaie.	154
7.3	Erreurs d'ajustement des charges piézométriques observées au site de Lachenaie.	157
A.1	Exemple numérique simple en régime permanent utilisant l'équation de Thiem pour la solution du problème direct.	173
A.2	Exemple numérique simple en régime transitoire utilisant l'équation de Theis pour la solution du problème direct.	174
C.1	Comparaison des résultats numériques fournis par Femlab aux solutions analytiques de Thiem et de Dupuit.	178
D.1	Comparaison des temps de transfert numériques et analytiques.	180

Liste des annexes

ANNEXE A : EXEMPLES NUMÉRIQUES SIMPLES	173
A.1 Solution analytique de Thiem	173
A.2 Solution analytique de Theis	174
ANNEXE B : PROGRAMME D'INVERSION DÉVELOPPÉ	175
B.1 Programme <i>HydroGeo_Inv</i>	175
B.2 Exemples de fichiers de paramètres	175
ANNEXE C : ÉVALUATION SOMMAIRE DU LOGICIEL	
D'ÉLÉMENTS FINIS FEMLAB 3.0A	177
ANNEXE D : ÉVALUATION DE L'ALGORITHME DE TRAJECTO-	
GRAPHIE	179

Liste des sigles et abréviations

Lettres Romaines

A_j	Aire de l'élément j , $[L^2]$
A_Ω	Aire du domaine, $[L^2]$
C	Constante d'intégration ou covariance, $[]$
b	Épaisseur saturée de l'aquifère, $[L]$
f	Fonction objectif ou fonction quelconque, $[L^2]$ ou $[]$
f_0	Vecteur des contraintes de non-biais
F	Matrice des conditions d'universalité ou matrice de masse
h	Charge hydraulique, $[L]$
$h_{j,k}^i$	Charge hydraulique à l'itération i , à la position j et au temps k , $[L]$
h^R	Charge hydraulique réelle ou de référence, $[L]$
$\hat{h}$	Charge hydraulique estimée, $[L]$
$\nabla h_{j,k}^i$	Gradient hydraulique à l'itération i , à la position j et au temps k , $[-]$
∇h^R	Gradient hydraulique réel ou de référence, $[-]$
$\nabla \hat{h}$	Gradient hydraulique estimé, $[-]$
K	Conductivité hydraulique ou matrice de rigidité, $[LT^{-1}]$
K_j^i	Conductivité hydraulique à l'itération i et à la position j , $[LT^{-1}]$
T^{max}	Conductivité hydraulique maximale admissible, $[LT^{-1}]$
T^{min}	Conductivité hydraulique minimale admissible, $[LT^{-1}]$
L	Opérateur mathématique quelconque ou coordonnée d'aire
n	Porosité ou vecteur normal à une frontière, $[-]$
n_Δ	Nombre de paires de points doublons, $[]$
n_{el}	Nombre d'éléments, $[]$

n_e	Porosité effective, [-]
n_η	Pas d'avancement
n_{inv}	Nombre d'inversions, []
n_{obs}	Nombre d'observations piézométriques, []
n_t	Nombre total de pas de temps, []
q	Flux hydraulique, $[LT^{-1}]$ ou $[L^2T^{-1}]$
$q_{j,k}^i$	Flux hydraulique à l'itération i , à la position j et au temps k , $[LT^{-1}]$ ou $[L^2T^{-1}]$
q^R	Flux hydraulique réel ou de référence, $[LT^{-1}]$ ou $[L^2T^{-1}]$
$\hat{q}$	Flux hydraulique estimé, $[LT^{-1}]$ ou $[L^2T^{-1}]$
Q	Terme source, $[T^{-1}]$ ou $[LT^{-1}]$
Q_w	Débit de pompage au puits, $[L^3T^{-1}]$
r	Résidu au point de mesure ou distance entre deux points, $[L]$
r_w	Rayon du puits, $[L]$
s	distance le long d'une ligne de courant, $[L]$
S	Coefficient d'emmagasinement, [-]
S_s	Coefficient d'emmagasinement spécifique, $[L^{-1}]$
t	Temps, $[T]$
t_0	Temps initial, $[T]$
t_f	Temps final, $[T]$
T	Transmissivité, $[L^2T^{-1}]$
$T_{j,k}^i$	Transmissivité à l'itération i , à la position j et au temps k , $[L^2T^{-1}]$
T^{max}	Transmissivité maximale admissible, $[L^2T^{-1}]$
T^{min}	Transmissivité minimale admissible, $[L^2T^{-1}]$
T^R	Transmissivité réelle ou de référence, $[L^2T^{-1}]$
u	Degré de liberté
w	Fonction test, []
W	Largeur d'un tube de courant ou poids d'intégration de Gauss, $[L]$
x	Abscisse ou vecteur de paramètres, $[L]$ ou []
y	Ordonnée, $[L]$
Y	Logarithme en base 10 de K ou de T , $\log_{10}([LT^{-1}])$ ou $\log_{10}([L^2T^{-1}])$
z	Élévation, $[L]$

Alphabet grec

α	Portée de l'itération ou longueur du pas d'avancement, [itération] ou [-]
β	Coefficient d'amortissement
δ	Facteur de correction
Δ	Points doublons
λ	Poids temporel ou vecteur des poids de krigeage
ϕ	Fonction de base
ψ	Distance le long d'un isopièze, [L]
Γ	Frontière du domaine (Ω)
μ	Multiplicateur de Lagrange
Ω	Domaine à l'étude
σ_0	Vecteur des covariances entre points à estimer et observations
σ	Écart-type
Σ	Matrice de covariance des données

Indices

<i>Arit</i>	Arithmétique
<i>Geom</i>	Géométrie
<i>Harm</i>	Harmonique
i	Itération
j	Position
k	Temps
l	Inversion
m	Observation
<i>max</i>	Maximum
<i>min</i>	Minimum
<i>Mid</i>	Milieu
x	Parallèle à l'abscisse
y	Parallèle à l'ordonnée

R	Réel ou référence
w	Puits

Acronymes et opérateurs mathématiques

$Corr$	Corrélation
div	Opérateur divergence
EAR	Erreur relative absolue
$EMAE$	Espérance des erreurs absolues moyennes
MAE	Erreur absolue moyenne
Ln	Logarithme naturel
Log_{10}	Logarithme en base 10
Var	Variance

Dimensions des variables

L	Longueur
M	Masse
T	Temps

Introduction

La sensibilisation croissante aux problèmes environnementaux de même que la nécessité d’avoir une compréhension accrue des systèmes hydrogéologiques complexes ont amené les hydrogéologues à développer des outils numériques reproduisant les écoulements souterrains. L’utilisation de ces modèles numériques est aujourd’hui largement répandue et leur résolution ne pose plus de problèmes techniques majeurs (de Marsily, 1986, p.341).

Ces modèles numériques supposent que la distribution spatiale des paramètres hydrogéologiques est *a priori* parfaitement connue. Or on dispose généralement de peu de mesures directes, celles-ci sont souvent entachées d’erreurs et constituent des conditions locales qui ne peuvent représenter l’aquifère dans sa totalité (Hoeksema et Kitanidis, 1985). De plus, la variabilité spatiale des paramètres hydrogéologiques rend difficile la reconstruction directe du champ de paramètres, par des méthodes d’interpolation.

En l’absence d’une connaissance juste et précise du champ de paramètres d’un aquifère, l’utilisation des méthodes numériques reste précaire. L’utilisation de modèles peu conditionnés aux mesures et observations provenant du terrain peut mener à des estimations fortement erronées des temps de parcours (Zimmerman *et al.*, 1998), de la trajectoire des particules (Lavenue *et al.*, 1995) et des charges hydrauliques (Delhomme, 1979b; Clifton et Neuman, 1982; Alcolea *et al.*, 2002). Il importe donc de déterminer la distribution spatiale des propriétés hydrauliques des matériaux, conditionnelle à des observations ponctuelles des paramètres (conductivité, porosité, emmagasinement, dispersivité) et de la variable d’état (charge hydraulique, flux, concentration). La résolution de ce problème, appelé *problème inverse*, permet de repro-

duire numériquement l'historique des observations et la distribution spatiale des paramètres. Il en résulte un modèle numérique plus juste et plus fiable qui évalue plus adéquatement le comportement d'un système hydrogéologique soumis à des conditions nouvelles de pompage, de sécheresse ou de contamination.

Ce problème complexe a donné naissance à une pléiade de méthodes d'inversion. Les plus connues sont les méthodes d'interprétation graphique (Theis, 1935), des tubes (Stallman, 1956), de zonation pure (Cooley, 1977), des points pilotes (de Marsily, 1978; de Marsily *et al.*, 1984), du cokrigeage (Hoeksema et Kitanidis, 1984) et des points maîtres (Gomez-Hernandez *et al.*, 1997) pour ne citer que quelques exemples. La présence de nombreux minimums locaux dans l'espace des paramètres et la difficulté des algorithmes actuels à converger vers une solution géologiquement réaliste mènent souvent à des temps de calcul prohibitifs.

La non-unicité des solutions au problème inverse (Hadamard, 1932) nécessite l'identification des situations potentiellement critiques pour le système hydrogéologique et ses bénéficiaires. La tendance actuelle tente donc de déterminer un *ensemble* de solutions équiprobables toutes calibrées sur les observations et mesures disponibles. Cependant, le coût numérique élevé associé à la réalisation d'une seule inversion limite la réalisation d'inversions stochastiques en milieu professionnel. Malgré les efforts déployés depuis une quarantaine d'années, l'obtention d'une solution au problème inverse en hydrogéologie demeure une opération longue et délicate (de Marsily *et al.*, 2000; Carrera *et al.*, 2005).

Les développements présentés dans cette thèse s'articulent autour de la résolution du problème inverse en hydrogéologie par une *estimation successive des flux* pour un aquifère confiné et totalement saturé. Ce travail vise à justifier l'utilisation d'une méthode d'inversion apte à calibrer rapidement un modèle numérique en régime permanent ou transitoire. Au delà de cet objectif général, quatre objectifs particuliers sont visés par ce travail :

1. Développer la justification théorique de la méthode ;
2. Évaluer et comparer la performance des différents paramètres opérationnels ;
3. Évaluer l'efficacité de la méthode lorsqu'une estimation du champ de charges est utilisée ;
4. Évaluer l'applicabilité de cette approche pour une situation réelle ;

Ce projet comporte de nombreux éléments originaux et novateurs. Entre autres, la justification de la méthode proposée par Ponzini et Lozej (1982) est revue et la formulation modifiée afin de permettre au système de converger plus régulièrement. En se basant sur ces résultats, une méthode d'inversion en régime transitoire est développée. L'approche préconisée constitue la première utilisation du krigeage avec dérive de puits et conditions frontières imposées (Brochu et Marcotte, 2003) pour résoudre le problème inverse en hydrogéologie. Cette thèse a fait l'objet d'une contribution sous forme d'article de conférence arbitré (Pasquier et Marcotte, 2005). De plus, le programme développé dans ce travail a été utilisé par Benoit *et al.* (2005) afin d'évaluer l'impact sur l'aquifère régional de Châteauguay d'une sollicitation accrue de la nappe phréatique.

Cette thèse de doctorat comporte sept chapitres. Le premier chapitre situe notre travail par rapport aux méthodes usuelles d'inversion en hydrogéologie et traite en détail du problème inverse et des difficultés qui sont associées à sa résolution. On retrouve dans le second chapitre une description de la méthode de l'estimation successive des flux. La méthode d'inversion en régime permanent ainsi que sa variante transitoire y sont présentées en détails. Le chapitre contient également une description de l'outil de calcul développé. Le troisième chapitre présente le modèle synthétique et les normes d'évaluations statistiques utilisées pour l'évaluation de l'algorithme. Le chapitre quatre débute par la présentation de quelques exemples numériques illustrant les capacités de la méthode d'inversion et du temps de calcul nécessaire à l'inversion. Le cinquième chapitre porte sur la détermination des paramètres opérationnels de l'algorithme (fonction d'amortissement, schéma temporel, facteur de correction). Le chapitre six contient, pour sa part, une évaluation de la méthode de l'estimation successive des flux en régimes permanent et transitoire en présence d'erreurs d'es-

timation dans le champ de charges hydrauliques. L'analyse est réalisée à l'aide du modèle synthétique et se concentre sur la reconstruction du champ de paramètres et l'ajustement des charges hydrauliques. Le dernier chapitre contient une application de la méthode pour un aquifère réel.

Chapitre 1

Revue de la littérature

L'écoulement de l'eau souterraine est un processus naturel qui est gouverné par les lois de la mécanique des fluides. L'une des plus importantes d'entre elles relie la magnitude et l'orientation du flux hydraulique exprimée par la loi de Darcy (Darcy, 1856) au principe de conservation de masse. L'équation résultante pour un aquifère captif, connue sous le nom d'équation de diffusion (de Marsily, 1986), s'exprime par :

$$\operatorname{div}(\mathbf{K} \cdot \nabla h) + Q = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (x, y, z) \in (\Omega) \quad (1.1)$$

où (Ω) est le domaine d'écoulement bordé par $(\Gamma) = (\Gamma_1) \cup (\Gamma_2)$; $\mathbf{K}$, la conductivité hydraulique, un tenseur; h , les charges hydrauliques; Q , un terme source; S_s , l'emmagasinement spécifique et t , le temps. L'équation de diffusion est soumise à l'état initial et aux conditions frontières :

$$\begin{aligned} h|_{(t=0)} &= f_0(x, y, z) & (x, y, z) \in (\Omega) \\ h|_{(\Gamma_1)} &= f_1(x, y, z, t) & (x, y, z) \in (\Gamma_1) \\ -\mathbf{K} \cdot \nabla h \cdot n|_{(\Gamma_2)} &= f_2(x, y, z, t) & (x, y, z) \in (\Gamma_2) \end{aligned} \quad (1.2)$$

où f_1 et f_2 sont des fonctions connues variables dans le temps et l'espace; Γ_1 et Γ_2 sont des frontières de type Dirichlet et Neumann respectivement et n , un vecteur normal à Γ_2 . La solution du système 1.1 est la distribution spatiale des charges hydrauliques dans le temps et l'espace. Si les coefficients, le terme source, les conditions frontières et l'état initial du système sont parfaitement connus, le système 1.1 constitue un *problème direct* dont une solution, unique, peut facilement être obtenue par des méthodes numériques usuelles.

En contrepartie, si on recherche à la fois la solution du système d'équations et les informations nécessaires à l'obtention de cette solution, on se retrouve face à un *problème inverse*. Woodbury (2003) distingue trois types de problème inverse : 1 - Un problème inverse de *type coefficients* qui implique la détermination des coefficients de l'équation différentielle ; 2 - Un problème inverse de *type frontière* qui nécessite la détermination des conditions frontières du problème ; 3 - Un problème inverse de *type conditions initiales* qui demande la détermination de l'état initial du système. En hydrogéologie, résoudre le problème inverse consiste à trouver les paramètres hydrogéologiques réels d'un aquifère (conductivité, porosité, emmagasinement, dispersivité), à partir de mesures ponctuelles de charge hydraulique, de concentration, de conductivité et de dispersivité. L'état initial du système et les conditions frontières étant généralement mal connus, l'hydrogéologue fait donc face aux trois types de problème inverse simultanément.

Le problème inverse est typiquement *mal posé* (Hadamard, 1932) en ce sens que la solution n'est pas unique et qu'elle est instable sous une faible perturbation des données. Bien que les observations et mesures permettent de restreindre l'espace des solutions admissibles, le nombre de solutions possibles demeure élevé limitant ainsi grandement la portée des modèles déterministes. Par ailleurs, la grande variabilité spatiale de la conductivité hydraulique, les erreurs de mesure, la rareté des observations sur la variable d'état et sur les coefficients compliquent encore plus la résolution du problème.

Le système hydrogéologique réel étant bien unique, plusieurs méthodes ont été développées afin de rendre le problème inverse *bien posé*. Les méthodes graphiques d'interprétation d'essai de pompage de type Theis (1935) sont un exemple de méthodes d'inversion parmi les plus simples et les plus connues. Sous hypothèses d'homogénéité et d'extension infinie de l'aquifère, ces méthodes permettent de régulariser le problème inverse et de le formuler analytiquement. La solution obtenue est unique. Or, ces résultats reflètent des valeurs moyennes de transmissivité entre le puits et les points d'observations et ne peuvent représenter l'aquifère dans sa totalité. Afin de reproduire plus justement les systèmes régionaux, une panoplie de méthodes d'inversion a été

développée. Ces méthodes se séparent en trois principaux groupes : 1 - Les méthodes d'optimisation qui utilisent essentiellement des méthodes de programmation non-linéaires pour ajuster les paramètres ; 2- Les méthodes d'inversion géostatistiques qui utilisent la géostatistique pour régulariser le problème et régionaliser les paramètres et 3- Les méthodes d'inversion utilisant le champ de potentiel qui s'appuient sur la solution de l'équation de diffusion afin de déterminer les conductivités hydrauliques. La figure 1.1 présente les principales méthodes qui seront présentées dans ce chapitre et le regroupement utilisé.

Une revue exhaustive des différentes méthodes inverses a été faite par Yeh (1986). À l'époque, la contribution de la géostatistique était très limitée et c'est pourquoi le classement qui est réalisé ici est profondément différent de celui de Yeh (1986). Aussi, on présente uniquement les méthodes les plus reconnues ou celles qui sont en rapport avec la méthodologie présentée dans ce travail. Bien que la plupart des méthodes présentées ici soient applicables en trois dimensions, la littérature est surtout riche d'exemples bidimensionnels. Afin de limiter l'exposé, la discussion est restreinte aux méthodes d'inversion en milieu bidimensionnels. Cependant, le lecteur peut se référer à Gomez-Hernandez *et al.* (2000), Lavenue (1998), Lavenue et de Marsily (2001) pour des applications à des cas tridimensionnels.

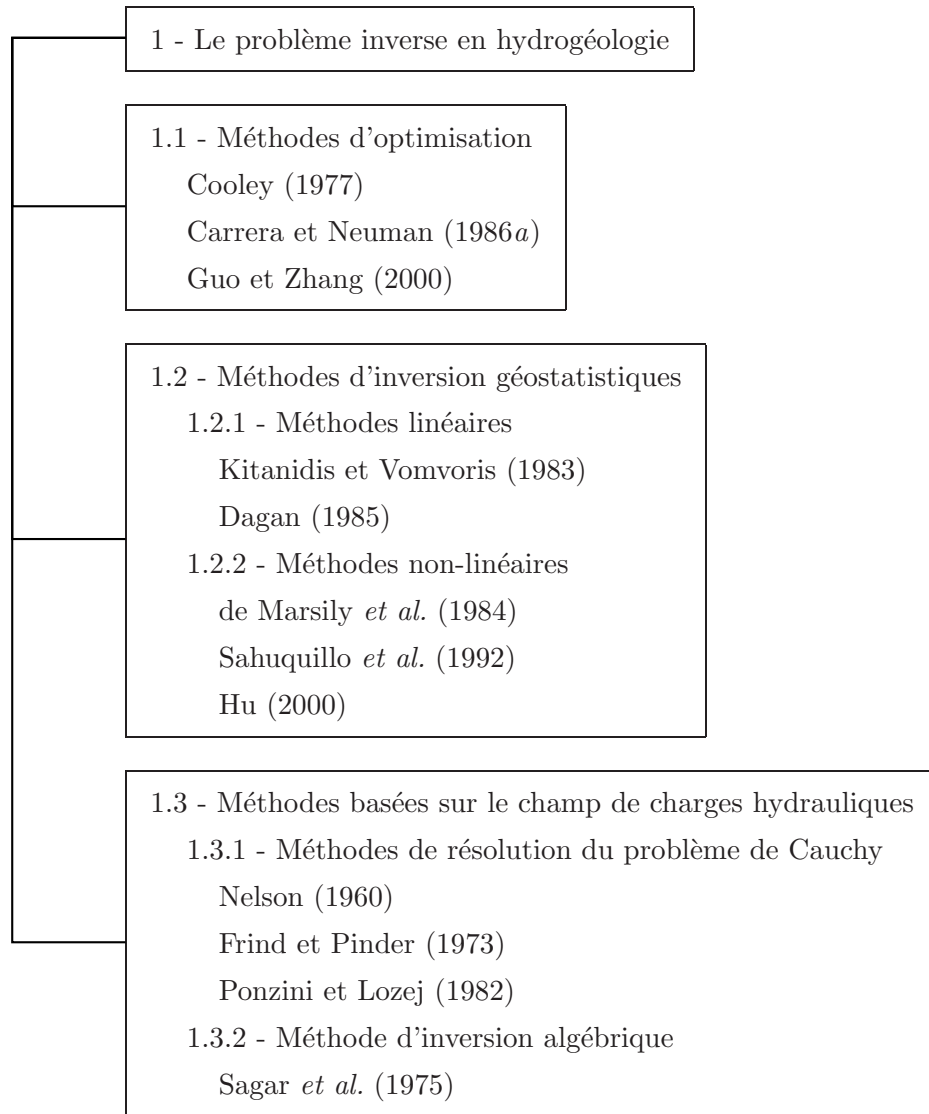


Figure 1.1: Classification proposée des méthodes inverses.

1.1 Méthodes d'optimisation

Les méthodes d'optimisation consistent principalement à déterminer l'ensemble des m paramètres $\mathbf{x}$ minimisant l'erreur d'ajustement entre les n variables d'état réellement observées et celles obtenues après résolution du problème direct. L'optimisation est généralement réalisée par des méthodes d'optimisation non-linéaire qui sont toutes des variantes de la méthode de Newton (Luenberger, 1973). Dans le cadre général, on a :

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n r^i(\mathbf{x})^2 \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^m \quad (1.3)$$

une fonction objectif à minimiser et r les résidus aux n points de mesure. En utilisant une expansion de Taylor pour exprimer la fonction $f(\mathbf{x})$ au point $\mathbf{x} = \mathbf{x}^i$ on obtient :

$$f(\mathbf{x}) \simeq f(\mathbf{x}^i) + \nabla f'(\mathbf{x}^i)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^i) + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^i)' \nabla^2 f(\mathbf{x}^i)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^i) + O(|\mathbf{x} - \mathbf{x}^i|^3) \quad (1.4)$$

avec $\nabla f(\mathbf{x})$, le vecteur des dérivées premières ; $\nabla^2 f(\mathbf{x})$, la matrice Hessienne des dérivées secondes et $'$, l'opérateur transposition. À un minimum local, la matrice Hessienne est positive définie et le gradient de l'équation 1.4 est nul. En négligeant les termes d'ordre supérieur à 2, on a ainsi :

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}^i) + \nabla^2 f'(\mathbf{x}^i)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^i) = 0 \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^m \quad (1.5)$$

En isolant $\mathbf{x}$, l'équation précédente devient :

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}^i - (\nabla^2 f(\mathbf{x}^i))^{-1} \nabla f(\mathbf{x}^i) \quad (1.6)$$

Celle-ci est utilisée itérativement afin de trouver l'ensemble des paramètres minimisant $f(\mathbf{x})$. Puisque la méthode peut converger vers un point de selle, l'équation 1.6 est modifiée par l'ajout d'un scalaire :

$$\mathbf{x}^{i+1} = \mathbf{x}^i + \alpha^i \mathbf{d}^i \quad (1.7)$$

avec i , l'itération ; $\mathbf{d}^i = -(\nabla^2 f(\mathbf{x}^i))^{-1} \nabla f(\mathbf{x}^i)$ la direction de recherche et α , la longueur du pas réalisé dans la direction $\mathbf{d}$. L'obtention de α , $\nabla f(\mathbf{x}^i)$ et $\nabla^2 f(\mathbf{x}^i)$ nécessite plusieurs évaluations d'une fonction généralement coûteuse à évaluer. Bien que plusieurs schémas aient été proposés pour α^i et $\mathbf{d}^i$ (Gauss-Newton, Gradient conjugué, Steepest Descent, Levenberg-Marquardt ou état adjoint (voir Luenberger (1973) ou

Sun (1994)), ces méthodes sont toutes plus ou moins tributaires de la résolution du problème direct.

Parmi les méthodes d'inversion utilisant des algorithmes d'optimisation non-linéaire, la méthode dite de *zonation pure* au sens de Yeh (1986) est l'une des plus connues et des plus utilisées. Celle-ci consiste à subdiviser l'aquifère en m zones de valeur uniforme. La valeur attribuée à chaque zone est optimisée de façon à minimiser une fonction objectif traduisant l'erreur d'ajustement entre les charges calculées aux points d'observations (h_{obs}^i) à l'itération i et les charges observées sur le terrain (h_{obs}^R). La fonction objectif est généralement exprimée par :

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (h_{obs}^R - h_{obs}^i(\mathbf{x}))^2 \quad \mathbf{x} \in \mathfrak{R}^m \quad (1.8)$$

Un terme de régularisation est parfois ajouté à cette fonction objectif (de Marsily *et al.*, 2000) et a pour but de prévenir une variation trop importante des paramètres par rapport aux paramètres de départ. L'optimisation est généralement réalisée par une méthode de type gradient (Cooley, 1977), maximum de vraisemblance (Carrera et Neuman, 1986*a,b*) ou Levenberg-Marquardt (Doherty, 2002). La paramétrisation réalisée permet d'imposer les principales unités hydrostratigraphiques (si elles sont connues) et de diminuer le nombre de paramètres à optimiser.

Lors d'une étude comparative, Keidser et Rosbjerg (1991) ont observé que la méthode de la zonation pure était efficace lorsque les observations étaient rares ou erronées mais qu'elle ne performait pas bien en présence d'un champ fortement hétérogène. De plus, Davis (1986) a observé que l'utilisation de zones homogènes n'était pas appropriée pour prédire adéquatement le temps de transfert d'un contaminant dans un milieu hétérogène.

Depuis peu, quelques auteurs ont proposé d'utiliser les observations piézométriques pour interpoler les charges sur l'ensemble du domaine puis de constituer la fonction objectif à l'aide de ce champ de charges et du champ de charges calculées (Doherty, 2003). Il semble que cette approche apporte plus de robustesse à l'inversion.

La méthode de la comparaison des gradients (Guo et Zhang, 2000) consiste plutôt à minimiser la différence entre les gradients hydrauliques calculés et ceux estimés sur l'ensemble du domaine. La fonction objectif est dérivée par calcul variationnel ce qui permet d'obtenir en deux appels du simulateur le gradient de la fonction objectif pour toutes les cellules du modèle numérique.

1.2 Méthodes d'inversion géostatistiques

C'est Delhomme (1976, 1978) qui fut le premier à montrer que plusieurs paramètres hydrogéologiques (transmissivité, charge hydraulique, épaisseur saturée, etc.) possédaient une structure spatiale et pouvaient être considérées comme des variables régionalisées au sens de Matheron (1965). La méthode de résolution du problème inverse proposée par Delhomme (1979*b*) repose donc sur la géostatistique. Dans cette approche, les mesures de transmissivité sont utilisées afin d'inférer le variogramme expérimental et de générer des simulations géostatistiques conditionnelles de transmissivité. Ces dernières sont réalisées sur une grille similaire à celle d'un modèle numérique d'écoulement. Le conditionnement sur les charges est indirectement réalisé en soumettant les champs de transmissivités simulés au simulateur d'écoulement et en conservant uniquement ceux qui reproduisent assez bien les observations piézométriques. Dans le processus, la plupart des simulations sont rejetées car elles ne permettent pas de reproduire les observations de charges (Chiles et Delfiner, 1999, p.629). Il apparaît que les observations de conductivité hydraulique utilisées sans tenir compte des données piézométriques ponctuelles ne permettent pas d'obtenir un champ de paramètres adéquat (Clifton et Neuman, 1982; Alcolea *et al.*, 2002).

Les méthodes d'inversions géostatistiques se basent toutes plus ou moins sur la méthode de Delhomme (1979*b*) mais incorporent l'information intégratrice que constituent les charges hydrauliques lors du processus d'inversion. On retrouve aujourd'hui une panoplie de méthodes géostatistiques. Ces dernières se divisent en deux principaux groupes : 1 - Les méthodes linéaires et 2 - les méthodes non-linéaires.

1.2.1 Méthodes linéaires

En considérant la charge et la transmissivité comme des variables aléatoires composées d’une moyenne déterministe et d’une perturbation aléatoire de moyenne nulle, il est possible d’obtenir une approximation de l’équation de diffusion qui lie linéairement les perturbations de T et de h (Mizell *et al.*, 1982; Gelhar, 1993). La relation linéaire entre les perturbations de la charge hydraulique et de la transmissivité permet de calculer numériquement ou analytiquement l’auto-covariance et la covariance-croisée charge-transmissivité. Une fois ces covariances connues, les transmissivités sont obtenues par cokrigage à partir des observations de T et de h . Il est supposé que la variance du champ de transmissivités est faible ($Var[\ln T] < 1$), que la distribution de $\ln T$ est gaussienne et que T est stationnaire d’ordre deux. Ainsi, seules les perturbations locales de T engendrent des déviations par rapport à la dérive régionale des charges hydrauliques. Les méthodes linéaires diffèrent selon que les matrices de covariance sont calculées numériquement (Kitanidis et Vomvoris, 1983) ou analytiquement (Dagan, 1985).

Le calcul numérique des matrices de covariance a été originalement proposé par Gutjahr (1981) mais on doit à Kitanidis et Vomvoris (1983) les premières expérimentations sur des cas unidimensionnels et à Hoeksema et Kitanidis (1984) les essais sur des cas bidimensionnels. La méthode consiste à exprimer la matrice de covariance comme une combinaison linéaire de sous-matrices. La linéarisation de l’équation de diffusion permet de calculer numériquement ces matrices en $(N + 1)$ appels d’un simulateur d’écoulement (Sun, 1994; McLaughlin et Townley, 1996) où N est le nombre de nœuds du modèle. La méthode du maximum de vraisemblance est utilisée pour déterminer les poids les plus probables de la combinaison linéaire étant donné les mesures et les valeurs cokrigées. Une fois les poids optimisés, le champ de T est cokrigé à partir des observations de T et de h . En quelque sorte, la méthode ajuste les paramètres du variogramme (de Marsily *et al.*, 2000) mais n’assure pas une reproduction parfaite des charges aux points de mesure. Aussi, la construction des matrices de covariance est coûteuse en temps de calcul lorsque le nombre d’éléments du modèle numérique est élevé. En hydrogéologie, cette méthode est connue sous l’appellation

cokrigeage linéarisé, ce qui réfère à la linéarisation de l'équation d'écoulement et non à l'estimation linéaire obtenue par cokrigeage.

La méthode *semi-analytique linéarisée* (Dagan, 1985; Rubin et Dagan, 1987, 1992) est une application du cokrigeage qui ne fait pas appel à un simulateur d'écoulement. La linéarisation de l'équation de diffusion permet d'exprimer analytiquement les covariances à l'aide d'une approche spectrale. Les observations de T permettent d'inférer la covariance pour $\ln T$. L'estimation des paramètres nécessaires au calcul des covariances (gradient hydraulique moyen, transmissivité moyenne, portée) est réalisée par la méthode du maximum de vraisemblance. Les matrices de covariances obtenues permettent de cokriger les transmissivités. Bien que moins lourde en calcul que la méthode du cokrigeage linéarisé, cette méthode est limitée aux situations de géométrie simple pour lesquelles une solution analytique existe.

L'utilisation de l'équation linéarisée est limitée en théorie à des milieux relativement homogènes ($Var[\ln T] < 1$) (Dagan, 1989). Si la variance est élevée, l'approximation linéaire ne s'applique plus et la relation non-linéaire entre T et h l'emporte, ne préservant plus la continuité du champ de charges. Il en résulte des puits ou des sources artificielles dans les champs de h cokrigés (Hughson et Gutjahr, 1998). Zimmerman *et al.* (1998) notent que c'est davantage la non-stationnarité de T qui diminue la performance des méthodes géostatistiques linéaires. Afin de calculer des covariances respectant en tous points le principe de conservation de masse, Yeh *et al.* (1995) et Roth *et al.* (1998) ont utilisé un simulateur d'écoulement. Le coût numérique de cette approche est néanmoins prohibitif.

1.2.2 Méthodes non-linéaires

Les méthodes linéaires sont essentiellement une application du cokrigeage rendue possible par la linéarisation de l'équation de diffusion. Cependant, le champ de transmissivités ainsi obtenu n'assure pas une reproduction des charges hydrauliques aux points de mesure. Le calage parfait des charges n'est possible que si l'on résout l'équation d'écoulement dans sa forme complète ce qui n'est possible que

numériquement. C'est ce que font les méthodes non-linéaires en couplant la capacité de la géostatistique à générer un champ de transmissivités et celle du simulateur d'écoulement à obtenir les charges aux points d'observation à partir des transmissivités préalablement estimées.

La méthode des *points pilotes* développée par de Marsily (1978) et de Marsily *et al.* (1984) consiste à modifier itérativement un champ initial de transmissivités obtenu par krigeage de façon à ce que le champ final permette la reproduction numérique des observations de T et de h . L'altération du champ de T est réalisée par l'intermédiaire de valeurs artificielles de transmissivité, appelées *points pilotes*. Ces derniers sont insérés séquentiellement aux endroits où ils ont une sensibilité maximum sur la décroissance de l'erreur de calibration. Les points pilotes sont insérés dans le jeu de données comme s'ils étaient des observations réelles. L'estimation de T sur l'ensemble du domaine est réalisée à partir d'un modèle de covariance inféré avec les données réelles uniquement. La transmissivité qui est attribuée aux points pilotes est déterminée par la méthode de l'état adjoint (Chavent *et al.*, 1975) de façon à reproduire les observations de charge. Le processus est répété jusqu'à l'atteinte d'un seuil préalablement spécifié par l'utilisateur. Alors que de Marsily *et al.* (1984) localisaient empiriquement les points pilotes, Lavenue et Pickens (1992), Rama Rao *et al.* (1995) et Lavenue *et al.* (1995) ont proposé de les localiser automatiquement par l'utilisation de la méthode d'état adjoint (Chavent *et al.*, 1975). Lors d'une étude comparative, Keidser et Rosbjerg (1991) ont observé que la méthode des points pilotes était la plus apte à reproduire les éléments régionaux d'un aquifère.

Dans le processus, les points pilotes sont ajoutés séquentiellement. Or, les premiers points pilotes contraignent beaucoup la solution. Il peut alors être difficile pour le système de converger vers un nouveau minimum puisque les points pilotes obtenus lors des premières itérations sont conservés dans le jeu de données. Afin de s'affranchir de ce problème, Sahuquillo *et al.* (1992) et Gomez-Hernandez *et al.* (1997) ont disposé les points pilotes sur une grille régulière et proposé de modifier simultanément les valeurs des points pilotes. Cette approche est connue sous le nom de *méthode des points maîtres* ou *self sequential calibration*. Qu'elle soit simultanée ou séquentielle,

la méthode des points pilotes permet de réaliser l'inversion simultanée de plusieurs variables. Hendricks-Franssen *et al.* (1999) ont utilisé l'approche simultanée pour calibrer la transmissivité et le coefficient d'emmagasinement alors que Hendricks-Franssen *et al.* (2004) ont optimisé la transmissivité et la recharge efficace de l'aquifère.

Capilla *et al.* (1997) ont observé que la précision de la méthode augmentait avec le nombre d'observations et de points maîtres, mais qu'elle diminuait avec la variance du $\ln T$ ou le nombre d'observations piézométriques. Par ailleurs, Gagnon (1998) a observé une diminution de l'incertitude sur les trajets et un meilleur conditionnement aux charges pour des variogrammes ayant de grandes portées. Néanmoins, Lavenue *et al.* (1995) ont comparé les approches séquentielle et simultanée et ont remarqué que l'approche séquentielle convergeait plus facilement vers les charges observées.

Afin de tenir compte de la non-unicité de la solution au problème inverse, Sahuquillo *et al.* (1992) puis Rama Rao *et al.* (1995) ont utilisé des simulations conditionnelles plutôt que le krigeage dans le processus d'optimisation afin d'obtenir un *ensemble* de solutions équiprobables. Les solutions obtenues constituent un ensemble de scénarios équiprobables respectant à la fois les mesures de T et de h .

Dans un autre ordre d'idée, la méthode des déformations graduelles (Hu, 2000; Hu *et al.*, 2001) consiste à comparer des champs de transmissivités deux à deux et à trouver la meilleure combinaison linéaire minimisant les résidus des erreurs de calibration. À chaque itération, un nouveau champ est proposé et comparé au champ optimisé. Le processus est répété jusqu'à l'ajustement des charges aux points de mesure. La méthode permet aussi de traiter des champs non gaussiens. Hu *et al.* (2001) ont observé que des déformations locales donnaient une plus grande flexibilité pour l'ajustement.

Le fait de ramener un problème d'optimisation multidimensionnel à un problème unidimensionnel est le principal avantage de la méthode. Néanmoins, celle-ci est relativement récente et demeure peu utilisée. Nos propres expérimentations montrent qu'après quelques itérations, l'erreur de calibration décroît peu et demeure élevée. Le

gain se produit surtout lorsque le nouveau champ proposé est davantage compatible avec la vraie solution, ce qui, en quelque sorte, revient à utiliser l’approche préconisée par Delhomme (1979*b*).

Le principal avantage des méthodes géostatistiques non-linéaires est qu’elles réduisent considérablement le nombre de variables à optimiser tout en permettant de reconstruire des structures hydrogéologiques hétérogènes. Le champ final reproduit convenablement les observations de transmissivité et de charge et les erreurs de mesures peuvent être incorporées assez facilement dans la procédure. De plus, la méthode préserve assez bien le variogramme expérimental (Larocque *et al.*, 2003; Gagnon, 1998).

Cependant, les méthodes non-linéaires demeurent essentiellement des variantes de méthodes d’optimisation qui nécessitent l’appel d’une fonction coûteuse à évaluer (i.e. le simulateur d’écoulement). L’estimation du gradient de la fonction objectif peut être réalisée par la méthode de l’état adjoint (Chavent *et al.*, 1975) en deux appels du simulateur mais l’évaluation du pas optimal demeure et peut nécessiter jusqu’à 15 évaluations du problème direct à chaque itération (Hendricks-Franssen et Gomez-Hernandez, 2003). Le temps de calcul associé à la réalisation d’une seule inversion étant relativement élevé, l’utilisation des méthodes géostatistiques non-linéaires pour la réalisation d’inversions stochastiques est donc très limitée.

La nécessité d’inférer un variogramme robuste à partir de quelques observations, souvent erronées, constitue une limitation pratique importante à l’utilisation des méthodes géostatistiques en général. Bien que l’influence du modèle de covariance soit moindre lorsque le nombre de points pilotes de T est important, ces derniers ont tendance à générer des hétérogénéités circulaires (Zimmerman *et al.*, 1998). Ce résultat est également observé chez Larocque *et al.* (2003). Finalement, les méthodes géostatistiques sont conçues pour générer des champs de transmissivités stationnaires et reproduisent difficilement des champs non-stationnaires de T .

1.3 Méthodes d'inversion basées sur le champ de charges hydrauliques

Les méthodes d'inversion géostatistiques utilisent le krigage, la simulation ou le cokrigage afin d'obtenir un champ de transmissivités reproduisant plus ou moins bien les charges observées. Les observations piézométriques sont utilisées uniquement pour estimer les modèles de covariances dans le cas des méthodes linéaires ou pour constituer la fonction objectif dans le cas des méthodes non-linéaires.

Une série de méthodes d'inversion, généralement non-itératives, supposent que les observations piézométriques permettent d'interpoler la totalité du champ de charges. Ces informations sont alors utilisées pour reconstruire le champ de paramètres. Ces méthodes se distinguent entre elles selon l'approche choisie pour résoudre le problème inverse. Une première famille de méthodes apporte une solution graphique ou numérique au problème de Cauchy. Une seconde famille utilise les dérivées spatiales et temporelles de la surface piézométrique pour résoudre un système d'équations linéaires. Une attention particulière est apportée aux méthodes basées sur la résolution du problème de Cauchy en raison de sa ressemblance avec la méthode présentée dans ce travail.

1.3.1 Méthodes de résolution du problème de Cauchy

Pour un écoulement en régime permanent sans terme source, l'équation de diffusion (équation 1.1) est une équation différentielle partielle d'ordre 2 dont h est l'inconnue. Cependant, si h est connue sur l'ensemble du domaine et K est l'inconnue du problème, l'équation de diffusion se réduit à une équation différentielle partielle d'ordre 1. Pour un tenseur isotrope de conductivité hydraulique, l'équation de diffusion devient :

$$\operatorname{div}(\mathbf{K} \cdot \nabla h) = \frac{\partial}{\partial x} K \cdot \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} K \cdot \frac{\partial h}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} K \cdot \frac{\partial h}{\partial z} = 0 \quad (1.9)$$

Une telle équation est un problème de type Cauchy qui se résout directement si une frontière de type Neumann, de flux connu, coupe toutes les lignes de courant

traversant le domaine (Emsellem et de Marsily, 1971). Puisque le champ de potentiel est supposé connu, les lignes de courant peuvent être déterminées. Le flux étant connu, l'intégration le long des lignes de courant permet d'obtenir une solution unique (McLaughlin et Townley, 1996).

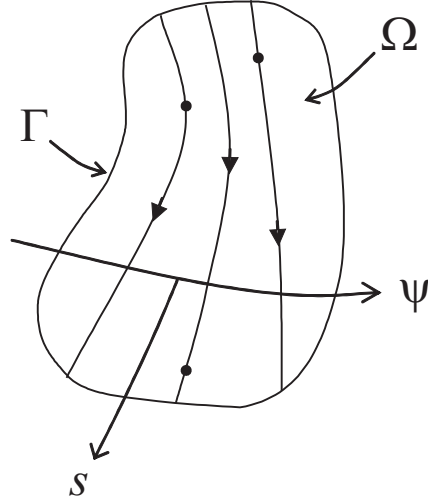


Figure 1.2: Schéma type du problème de Cauchy. Modifié d'après Emsellem et de Marsily (1971)

En utilisant un système de coordonnées orthogonales (voir figure 1.2) où s est la distance le long d'une ligne de courant et ψ la distance le long d'un isopièze, on peut récrire l'équation de diffusion comme :

$$\frac{\partial}{\partial s} \left[K(s, \psi) \cdot \frac{\partial h(s, \psi)}{\partial s} \right] = 0 \quad (s, \psi) \in (\Omega) \quad (1.10)$$

Et après intégration, on obtient la solution :

$$K(s, \psi) = \frac{C(\psi)}{\partial h(s, \psi) / \partial s} \quad (s, \psi) \in (\Omega) \quad (1.11)$$

avec $C(\psi)$ une constante d'intégration qui représente le flux hydraulique s'écoulant le long de la ligne de courant ψ . On remarque qu'il y a une parfaite indépendance mathématique entre les transmissivités de deux lignes de courant adjacentes. Il en découle que le flux peut osciller fortement d'une ligne à l'autre tout en reproduisant

le champ piézométrique (Emsellem et de Marsily, 1971). La nécessité d'assurer la continuité des transmissivités entre les lignes de courant est donc de première importance.

Un résultat équivalent à l'équation 1.11 peut être obtenu dans un système de coordonnées cartésiennes. On profite du fait que les lignes de courant parcourent tout le domaine et par conséquent que les vecteurs flux ($\vec{q}(x, y, z)$) peuvent être déterminés en tout point. Pour un milieu isotrope, le tenseur de conductivité se réduit à un scalaire et le gradient hydraulique ($\nabla h(x, y, z)$) et le flux sont des vecteurs colinéaires. On obtient donc :

$$K(x, y, z) = \frac{\|-\vec{q}(x, y, z)\|_2}{\|\nabla h(x, y, z)\|_2} \quad (x, y, z) \in (\Omega) \quad (1.12)$$

Bien qu'en théorie le problème de Cauchy soit bien posé, on ne pourra obtenir une solution unique en présence de gradients hydrauliques nuls puisque n'importe quelle valeur de K respecterait l'équation 1.12 (Knowles, 1996). Afin de contourner ce problème, Frind et Pinder (1973) et Yakowitz et Duckstein (1980) recommandent d'exclure les régions du modèle numérique dont le gradient hydraulique est très faible. Ceci est néanmoins difficilement réalisable en pratique car ces régions sont souvent d'intérêt (point de stagnation à proximité d'un puits, limite imperméable de bassin versant, point de selle).

La méthode des tubes proposée par Stallman (1956) et développée par Nelson (1960, 1961) apporte une solution graphique au problème de Cauchy pour une situation bidimensionnelle. Les observations piézométriques sont utilisées pour tracer le réseau d'écoulement traversant le domaine. Puisque le flux n'est pas connu dans tous les tubes, une parade consiste à utiliser une estimation de T et la loi de Darcy afin de calculer le flux circulant dans un tube. Puisque les limites latérales d'un tube de courant constituent des frontières imperméables, la loi de Darcy et le principe de conservation de masse permettent de régionaliser la transmissivité le long d'un tube par :

$$q = T(s) \cdot W(s) \cdot \frac{\partial h(s)}{\partial s} \quad (1.13)$$

où s représente la distance le long d'un tube de courant et W la largeur du tube.

La méthode des tubes a été utilisée avec un réseau d'écoulement tracé manuellement par Hunt et Wilson (1974) et Day et Hunt (1977). Nelson et Cearlock (1967) et Nelson (1968) ont proposé l'utilisation d'un polynôme de degré élevé pour représenter la surface phréatique. Rice et Gorelick (1985) ont testé sur trois cas réels et ont démontré l'utilité de la méthode pour la conceptualisation du modèle hydrogéologique. Une évaluation de la méthode sur un cas synthétique a été menée par Scott (1992). Ce dernier a observé que le choix et la précision de la surface interpolée avaient un impact important sur les transmissivités obtenues. Il est également apparu que ces transmissivités n'étaient pas aptes à reproduire directement les charges observées lorsque utilisées dans un simulateur d'écoulement.

Frind et Pinder (1973) ont utilisé la méthode des éléments finis afin d'apporter une solution numérique au problème de Cauchy. Plutôt que de résoudre numériquement pour h , ils ont formulé le problème de façon à le résoudre pour les transmissivités. Cette approche a été testée dans des situations unidimensionnelles. Frind et Pinder (1973) ont noté que la précision de l'estimation de T augmentait avec l'ordre des polynômes d'interpolation utilisés pour représenter h . Également, leur étude a fait ressortir que de faibles erreurs de mesure sur la charge hydraulique pouvaient engendrer des transmissivités négatives si la solution n'était pas contrainte.

La méthode du *modèle de comparaison* (Ponzini et Lozej, 1982) constitue une utilisation originale des méthodes numériques à la résolution du problème inverse. Bien que les auteurs n'aient pas explicitement fait un lien avec le problème de Cauchy, on verra au chapitre suivant pourquoi leur méthode a été classée dans cette section. Leur approche consiste à utiliser un modèle numérique ayant la même géométrie, les mêmes conditions frontières et la même discrétisation numérique que le modèle réel que l'on tente de calibrer. En reproduisant le développement de Ponzini et Lozej (1982) mais en négligeant le terme source, on peut développer l'équation de diffusion pour

le modèle réel (R) :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T_x^R \frac{\partial h^R(x, y)}{\partial x} \right) = \frac{\partial q_x^R}{\partial x} \quad (1.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(T_y^R \frac{\partial h^R(x, y)}{\partial y} \right) = \frac{\partial q_y^R}{\partial y} \quad (1.15)$$

où q_x^R et q_y^R sont les flux hydrauliques du modèle réel pour les directions x et y .

En exprimant la même équation, mais cette fois pour le modèle de comparaison, on obtient numériquement à partir d'une solution initiale de transmissivité T^i :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T_x^i \frac{\partial h^i(x, y)}{\partial x} \right) = \frac{\partial q_x^i}{\partial x} \quad (1.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(T_y^i \frac{\partial h^i(x, y)}{\partial y} \right) = \frac{\partial q_y^i}{\partial y} \quad (1.17)$$

où $h^R \neq h^i$ parce que $T^R \neq T^i$. En considérant que l'on recherche les transmissivités satisfaisant $h^R = h^i$ on obtient en posant $\partial q_x^R / \partial x = q_x^i / \partial x$ et $\partial q_y^R / \partial y = q_y^i / \partial y$:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T_x^R \frac{\partial h^R(x, y)}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(T_x^i \frac{\partial h^i(x, y)}{\partial x} \right) \quad (1.18)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(T_y^R \frac{\partial h^R(x, y)}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial y} \left(T_y^i \frac{\partial h^i(x, y)}{\partial y} \right) \quad (1.19)$$

Après intégration de 1.18 et 1.19 et en isolant T^R on obtient :

$$\hat{T}_x = T^i \frac{\partial h^i}{\partial x} \bigg/ \frac{\partial h^R}{\partial x} + C_1 \bigg/ \frac{\partial h^R}{\partial x} \quad (1.20)$$

$$\hat{T}_y = T^i \frac{\partial h^i}{\partial y} \bigg/ \frac{\partial h^R}{\partial y} + C_2 \bigg/ \frac{\partial h^R}{\partial y} \quad (1.21)$$

où $\hat{T}$ est une estimation de T^R et où C_1 et C_2 sont des constantes d'intégration que Ponzini et Lozej (1982) posent nulles. Les transmissivités obtenues assurent la reproduction des charges ($h^R = h^i$) mais n'assurent pas la détermination exacte des transmissivités ($T^R = T^i$) car $q^R \neq q^i$. Qui plus est, un tenseur est obtenu et non un scalaire.

Ponzini et Lozej (1982) ont observé que les gradients hydrauliques pouvaient être inversés ce qui engendrait des $\hat{T}$ négatifs. Afin d'obtenir des paramètres plausibles physiquement et des coefficients scalaires, ils ont proposé l'utilisation de la norme des gradients. Cependant, ceci n'assure plus le respect des contraintes $\partial q_x^R / \partial x = q_x^i / \partial x$ et $\partial q_y^R / \partial y = q_y^i / \partial y$ ce qui nécessite l'utilisation d'un processus itératif. En utilisant la norme euclidienne $\| \cdot \|_2$ et en notant i l'indice de l'itération, les équations 1.20 et 1.21 deviennent :

$$T^{i+1} = T^i \cdot \frac{\|\nabla h^i\|_2}{\|\nabla h^R\|_2} \quad (1.22)$$

Même en utilisant cette règle de mise à jour des paramètres, les auteurs notent une très forte sensibilité au choix de la solution initiale. Afin d'en amoindrir l'effet, ils proposent de multiplier l'équation 1.22 par un poids choisi en fonction des gradients réels. Les auteurs font état d'instabilité de la solution dans les régions de faible gradient et notent aussi avoir des difficultés à converger vers des solutions de transmissivités réalistes même avec l'utilisation des vraies charges hydrauliques.

Cette méthodologie peut être adaptée de façon à tenir compte d'un terme source non-nul sur le domaine. La modification consiste seulement à résoudre l'équation de diffusion en présence d'un terme source. Les charges calculées par le modèle de comparaison devraient ainsi tenir compte de la recharge/décharge.

1.3.2 Méthodes d'inversion algébrique

La méthode algébrique proposée par Sagar *et al.* (1975) permet d'obtenir directement une solution au problème inverse pour un écoulement en régime transitoire. On suppose que les charges hydrauliques sont connues sur le domaine à estimer à trois instants différents. Le domaine est discrétisé et les dérivées spatiales (d^2h/dx^2 , dh/dx) et temporelles (dh/dt) de l'équation de diffusion sont exprimées par des différences finies. Le système d'équations résultant est alors exprimé en fonction de T et de ses dérivées spatiales. Une solution directe est obtenue par résolution du système linéaire en supposant que le coefficient d'emmagasinement est connu.

Bien que très attrayante, cette approche s'est avérée particulièrement sensible aux erreurs de mesures et d'interpolation sur h (Yakowitz et Duckstein, 1980). De faibles erreurs sur h peuvent engendrer des erreurs relatives importantes sur les dérivées, ce qui provoque des estimations erronées des transmissivités. Nos propres vérifications confirment l'extrême sensibilité de cette approche.

Chapitre 2

Résolution du problème inverse par une estimation successive des flux

Le développement algébrique de Ponzini et Lozej (1982) repose essentiellement sur la décomposition et l'intégration de l'équation de diffusion. Aucune référence explicite au problème de Cauchy n'est faite. Néanmoins, l'imposition de constantes d'intégration nulles dans les équations 1.20 et 1.21, qui mène à l'équation 1.22, revient à résoudre le problème de Cauchy dans sa formulation cartésienne (1.12). Par ailleurs, la formulation actuelle de la méthode ne permet pas de tenir compte adéquatement des écoulements en régime transitoire ou des situations comportant des gradients hydrauliques réels très faibles.

Dans un premier temps, ce chapitre vise à montrer le lien existant entre le problème de Cauchy et la solution de Ponzini et Lozej (1982). En second lieu, une présentation de la modification apportée à la méthode pour tenir compte des situations où le régime hydrique est transitoire est faite. Puisque l'approche préconisée nécessite l'utilisation d'un champ de charges hydrauliques s'apparentant au champ réel, on présente la méthode d'interpolation retenue. Une courte description de la méthode des éléments finis est ensuite réalisée et permet de mieux introduire la procédure utilisée pour le calcul des gradients. Le chapitre se poursuit par une discussion des aspects opérationnels

liés à la méthode. On discute notamment de l'utilisation d'une fonction d'amortissement qui permet au système de converger plus régulièrement et de l'imposition de contraintes sur les paramètres. Finalement, le chapitre se termine par la présentation de l'outil de calcul développé dans le cadre de ce travail et qui implémente les algorithmes d'inversion de ce chapitre.

2.1 Estimation successive des flux en régime permanent

Le problème inverse en régime permanent, pour un milieu isotrope et complètement saturé, serait résolu directement si les flux et les charges hydrauliques étaient parfaitement connus en tout point de l'aquifère. Partant de la solution du problème de Cauchy, la conductivité hydraulique réelle serait donnée par :

$$K^R(x, y, z) = \frac{\|-\vec{q}^R(x, y, z)\|_2}{\|\nabla h^R(x, y, z)\|_2} \quad (x, y, z) \in (\Omega) \quad (2.1)$$

Dans un contexte réel d'application, les flux et charges hydrauliques réels ne sont connus, au mieux, que ponctuellement. Afin d'utiliser l'équation 2.1, on doit se rabattre sur des interpolations de $\vec{q}^R$ et de h^R sur le domaine à l'étude. On verra à la section 2.3 qu'une estimation réaliste des charges peut être obtenue par krigeage (Brochu et Marcotte, 2003; Tonkin et Larson, 2002). Cependant, on dispose rarement de mesures du flux dans l'aquifère et il n'existe pas, à notre connaissance, de méthode d'interpolation tenant compte du fait que le champ de flux hydraulique est un champ vectoriel conservatif. La résolution de l'équation 2.1 en l'absence du champ de flux est donc illusoire.

L'utilisation d'un modèle numérique permet de s'affranchir de ce problème car celui-ci permet de calculer numériquement un champ de flux hydraulique conservatif ($\nabla \vec{q} = 0$) qui respecte les conditions frontières imposées. Puisque l'on suppose le vrai champ de charges connus (du moins son estimation), la géométrie et les conditions frontières du modèle de comparaison sont choisies de façon à pouvoir reproduire $\vec{q}^R$ et h^R sur les frontières du domaine.

Plus formellement, considérons un modèle de comparaison représentant un aquifère confiné et isotrope pour lequel un régime permanent a été atteint. En l'absence d'un terme source, l'équation d'état et les conditions frontières décrivant cette situation sont donnés par :

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(K^i \cdot \nabla h^i) &= 0 & (x, y, z) \in (\Omega) \\ h^i|_{(\Gamma_1)} &= h^R(x, y, z) & (x, y, z) \in (\Gamma_1) \\ -K^i \cdot \nabla h^i \cdot n|_{(\Gamma_2)} &= \vec{q}^R(x, y, z) \cdot n & (x, y, z) \in (\Gamma_2) \end{aligned} \quad (2.2)$$

où (Ω) est le domaine d'écoulement bordé par $(\Gamma) = (\Gamma_1) \cup (\Gamma_2)$; K^i , un champ de conductivités hydrauliques quelconque et h^i , les charges hydrauliques qui sont la solution du système 2.2 et qui sont fonction de K^i .

La solution du système 2.2 assure que le champ de flux est conservatif ($\nabla \vec{q} = 0$) et qu'il respecte les contraintes imposées par les conditions frontières. Cependant, les flux circulant dans le modèle de comparaison ($\vec{q}^i = K^i \cdot \nabla h^i$) ne sont qu'une estimation des véritables flux. Loin des frontières de Neumann (Γ_2) , la magnitude et l'orientation des flux risquent d'être profondément différents. Néanmoins, notre approche consiste à supposer $\vec{q}^R = \vec{q}^i$. En utilisant cette égalité dans l'équation 2.1 on a :

$$K^R(x, y, z) = \frac{\|\vec{q}^i(x, y, z)\|_2}{\|\nabla h^R(x, y, z)\|_2} \quad (x, y, z) \in (\Omega) \quad (2.3)$$

D'un point de vue théorique, le modèle de comparaison est utilisé seulement afin d'obtenir le flux hydraulique. On peut s'épargner cette opération intermédiaire en utilisant la loi de Darcy pour exprimer le flux circulant dans le modèle de comparaison. En mettant en évidence K^i et en sortant le signe négatif de l'opérateur $\|\cdot\|_2$, l'équation 2.3 devient :

$$K^R(x, y, z) = K^i(x, y, z) \cdot \frac{\|\nabla h^i(x, y, z)\|_2}{\|\nabla h^R(x, y, z)\|_2} \quad (x, y, z) \in (\Omega) \quad (2.4)$$

Puisque l'on impose un parallélisme entre $\vec{q}^R$ et $\vec{q}^i$ et une égalité entre $\|\vec{q}^R\|_2$ et $\|\vec{q}^i\|_2$, il devient impossible de résoudre directement le problème inverse. L'utilisation d'un processus itératif devient alors nécessaire et permet de corriger les conductivités hydrauliques jusqu'à ce que la correspondance entre h^R et h^i soit parfaite, ou sous un

seuil préalablement déterminé. En exprimant sous une forme itérative l'équation 2.4, la conductivité hydraulique obtenue à l'itération i s'exprime par :

$$K^{i+1}(x, y, z) = K^i(x, y, z) \cdot \frac{\|\nabla h^i(x, y, z)\|_2}{\|\nabla h^R(x, y, z)\|_2} \quad (x, y, z) \in (\Omega) \quad (2.5)$$

avec $h^i(x, y, z)$ qui est la solution au système 2.2. Si l'aquifère est hétérogène et sa géométrie complexe, le système d'équations 2.2 doit être résolu numériquement après discrétisation du domaine et l'équation 2.5 doit être réécrite sous une forme compatible avec la discrétisation du modèle numérique. Celle-ci devient :

$$K_j^{i+1} = K_j^i \cdot \frac{\|\nabla h_j^i\|_2}{\|\nabla h_j^R\|_2} \quad i \geq 0, 1 \leq j \leq n_{el} \quad (2.6)$$

où j désigne l'un des n_{el} éléments discrétisant le domaine.

Les principales étapes de la méthode sont résumées à la figure 2.1. À partir d'un champ de conductivité hydraulique initial (K_j^0), le système 2.2 est résolu numériquement et h_j^0 est obtenu pour l'ensemble des partitions discrètes du modèle. Si le critère d'arrêt n'est pas atteint, le gradient hydraulique ∇h^0 est calculé. L'équation 2.6 est utilisée pour obtenir un nouvel estimé (K_j^1) des conductivités sur l'ensemble du domaine. Une nouvelle itération est entamée et les nouvelles valeurs de K sont assignées au modèle numérique. L'équation d'état est résolue à nouveau et le processus est répété jusqu'à ce que les conductivité obtenues permettent de reproduire les charges observées sous un seuil préalablement spécifié.

Une analyse numérique sommaire utilisant l'équation de Thiem pour la résolution de l'équation 2.2 est présentée à l'annexe A.1. Les paramètres hydrogéologiques utilisés pour la résolution de l'équation de Thiem sont ceux utilisés par Todd (1980) en page 127.

L'approche proposée assure la non-négativité de K puisque uniquement la magnitude des gradients hydrauliques est retenue. Puisque le flux hydraulique est fonction de la dérivée de la charge et non de la charge elle-même, ce sont les conditions frontières de type Dirichlet qui effectueront la mise à niveau de h^i . À chaque itération,

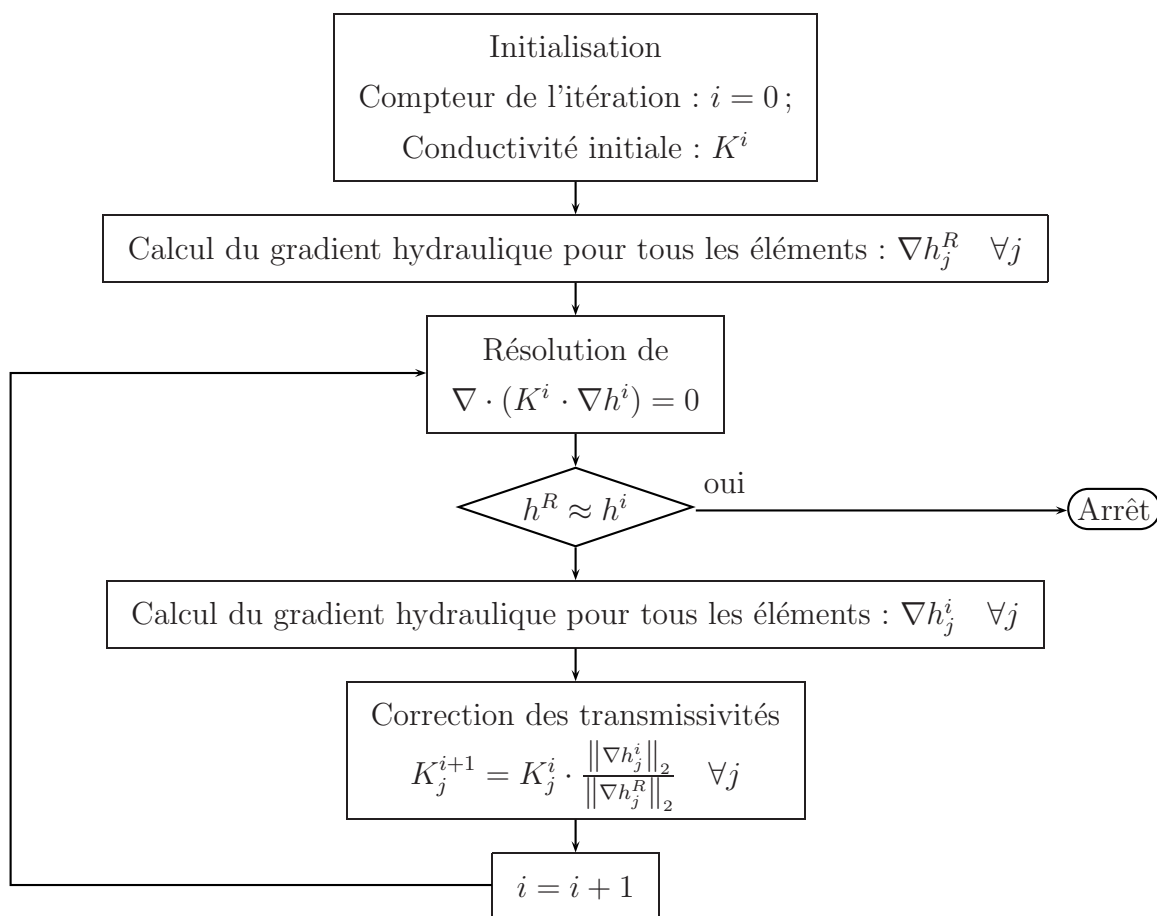


Figure 2.1: Algorithme schématique

une correction est appliquée aux conductivités de façon à reproduire les charges hydrauliques h^R . Lorsque l'ensemble des rapports $\nabla h^i / \nabla h^R$ est unitaire, les n_{el} valeurs de K^i constituent des points fixes et les valeurs ultérieures de K^i ne sont plus modifiées. Il ressort aussi de l'équation 2.6 que

$$\begin{aligned} \|\nabla h^i\|_2 &> \|\nabla h^R\|_2 \rightarrow K^{i+1} \nearrow \\ \|\nabla h^i\|_2 &< \|\nabla h^R\|_2 \rightarrow K^{i+1} \searrow \\ \|\nabla h^i\|_2 &= \|\nabla h^R\|_2 \rightarrow K^{i+1} \rightarrow \end{aligned} \quad (2.7)$$

et que la convergence est atteinte lorsque

$$\|\nabla h_j^i\|_2 = \|\nabla h_j^R\|_2 \quad \forall j \quad (2.8)$$

Puisque l'approche n'utilise pas de technique d'optimisation non-linéaire, le calcul du gradient de la fonction objectif et la détermination du pas d'avancement sont évités, ce qui permet une réduction significative du nombre d'évaluations du problème direct. De plus, aucune opération coûteuse à réaliser telle une inversion matricielle, un krigeage ou une simulation géostatistique n'est faite lors de la résolution de 2.6. Cette approche est donc particulièrement économique en temps de calcul comparativement aux autres méthodes d'inversion.

Bien que la méthode présentée dans cette section ait été développée indépendamment, l'équation 2.6 est similaire à celle obtenue par Ponzini et Lozej (1982). Cependant, les concepts qui la légitiment sont profondément différents. D'une part, il est plus facile de tracer un parallèle avec le problème de Cauchy et d'autre part, l'utilisation de la norme euclidienne et d'un processus itératif est mieux justifiée.

Afin d'alléger l'écriture, aucune allusion à la présence d'une recharge de l'aquifère n'a été faite. Cependant, en incorporant un terme source au système 2.2, les gradients hydrauliques calculés par le modèle de comparaison permettront d'obtenir des conductivités accommodant la recharge imposée. On ne peut pas voir dans cette approche une méthode d'estimation de la recharge car les valeurs de recharge devront être connues ou estimées *a priori*. Néanmoins, la méthodologie présentée peut tenir compte de telles situations.

2.2 Estimation successive des flux en régime transitoire

En régime transitoire, l'eau libérée par drainage gravitaire, variation de la porosité et de la masse volumique de l'eau va engendrer une variation inégale des charges et des gradients hydrauliques dans le temps. Il est peu probable que les conductivités hydrauliques obtenues avec l'équation 2.6 permettent de reproduire les variations temporelles des observations piézométriques si ces dernières n'ont pas été utilisées lors de l'inversion. Afin d'accommoder les situations en régime transitoire, l'équation 2.6 doit être modifiée.

Le problème considéré est exprimé par :

$$\operatorname{div}(K^i \cdot \nabla h^i) = S_s \frac{dh^i}{dt} \quad (x, y, z) \in (\Omega) \quad (2.9)$$

et soumis à la condition initiale et aux conditions frontières

$$\begin{aligned} h^i|_{(t=0)} &= h^R(x, y, z, t_o) & (x, y, z) \in (\Omega) \\ h^i|_{(\Gamma_1)} &= h^R(x, y, z) & (x, y, z) \in (\Gamma_1) \\ -K^i \nabla h^i \cdot n|_{(\Gamma_2)} &= \vec{q}^R(x, y, z) \cdot n & (x, y, z) \in (\Gamma_2) \end{aligned}$$

avec (Ω) , le domaine d'écoulement bordé par $(\Gamma) = (\Gamma_1) \cup (\Gamma_2)$; n un vecteur normal à (Γ_2) ; K^i , la conductivité hydraulique; h^i , les charges hydrauliques; S_s , l'emménagement spécifique et t , le temps d'évaluation compris entre t_o , le temps initial et t_f , le temps final.

La résolution de l'équation 2.9 permet d'obtenir h^i pour un temps d'évaluation compris entre t_o et t_f . Supposons donc que les charges hydrauliques réelles (ou leur estimation) sont connues sur l'ensemble du domaine dans l'intervalle $[t_o, t_f]$. En modifiant l'équation 2.4 afin de tenir compte de la variation temporelle de ∇h^i et de ∇h^R on a :

$$K^R(x, y, z, t) = K^i(x, y, z, t) \cdot \frac{\|\nabla h^i(x, y, z, t)\|_2}{\|\nabla h^R(x, y, z, t)\|_2} \quad (x, y, z) \in (\Omega), t_o \leq t \leq t_f \quad (2.10)$$

Cette équation permet autant d'estimations de K^R qu'il y a de temps d'évaluation. Puisqu'il est supposé que K est invariant dans le temps, une estimation unique de K approximant au mieux tous les gradients hydrauliques dans le temps doit être obtenue.

Plusieurs possibilités s'offrent quant à la méthode de calcul utilisée pour l'obtention d'une valeur unique de K^R (utilisation du gradient moyen, utilisation d'un seul pas de temps, etc.). On propose d'utiliser la totalité des champs de charges afin d'obtenir plusieurs facteurs $\nabla h^i / \nabla h^R$ et de pondérer ceux-ci par la longueur relative de chaque pas de temps. L'approche permet de tenir compte des situations où les mesures ne sont pas prises à intervalles réguliers ou lorsqu'elles sont redondantes. En utilisant la totalité des champs de charges, l'équation (2.10) devient :

$$K^R(x, y, z) = K^i(x, y, z) \cdot \int_{t_o}^{t_f} \frac{\|\nabla h^i(x, y, z, t)\|_2}{\|\nabla h^R(x, y, z, t)\|_2} \lambda(t) dt \quad (x, y, z) \in (\Omega), t_o \leq t \leq t_f \quad (2.11)$$

Puis sous une forme discrète avec i , l'itération ; j , l'indice de l'élément ; k , l'indice du pas de temps ; λ , la longueur relative du pas de temps et n_t le nombre total de pas de temps on obtient :

$$K_j^{i+1} = K_j^i \cdot \sum_{k=1}^{n_t} \frac{\|\nabla h_{j,k}^i\|_2}{\|\nabla h_{j,k}^R\|_2} \cdot \lambda_k \quad i \geq 0, 1 \leq j \leq n_{el}, 1 \leq k \leq n_t \quad (2.12)$$

L'équation 2.12 atteindra un point fixe lorsque la sommation sera unitaire, ce qui se produira nécessairement lorsque tous les rapports $\nabla h^i / \nabla h^R$ seront égaux à un pour tous les pas de temps. Cependant, même si la sommation est unitaire, il n'est pas assuré que les rapports des gradients pris individuellement le seront pour tous les pas de temps.

Par souci de clarté et pour la fluidité du développement, nous avons présenté les situations permanente et transitoire séparément. Retenons qu'une inversion en régime permanent ne constitue qu'une situation particulière du cas transitoire et peut être traitée en posant $n_t = 1$ et $\lambda = 1$ dans l'équation 2.12.

Un exemple numérique simple utilisant l'équation de Theis et résumant les principales étapes de calcul est présenté à l'annexe A.2.

2.3 Estimation des charges hydrauliques

En pratique, le champ de charges hydrauliques h^R utilisé dans les équations 2.6 et 2.12 n'est connu que ponctuellement. L'approche développée par Brochu (2002) et Brochu et Marcotte (2003) est particulièrement bien adaptée à la régionalisation d'observations ponctuelles dans un domaine bidimensionnel. Elle généralise les méthodes classiques d'interprétation des essais de pompage en plus de fournir une estimation des charges hydrauliques qui tient compte de l'effet d'un puits de pompage et de la présence de frontières hydrogéologiques. Brochu et Marcotte (2003) ont utilisé le formalisme du krigeage dual afin d'obtenir les principaux paramètres hydrogéologiques de l'aquifère. Afin de restreindre l'exposé, nous nous limiterons à l'aspect estimation des charges hydrauliques et utiliserons la définition du krigeage universel pour illustrer la méthode.

En utilisant une notation matricielle, l'estimateur linéaire de la charge hydraulique h^R , noté $\hat{h}$ peut s'écrire :

$$\hat{h} = h'_{obs}\lambda = \begin{bmatrix} h'_{obs} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda \\ \mu \end{bmatrix} \quad (2.13)$$

où λ est le vecteur des poids de krigeage ; μ , les multiplicateurs de Lagrange ; h_{obs} , les charges observées et $'$, l'opérateur transposition. Partant de la définition du système de krigeage universel (Chiles et Delfiner, 1999) on a :

$$\begin{bmatrix} \lambda \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma & F \\ F' & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \sigma_0 \\ f_0 \end{bmatrix} \quad (2.14)$$

où Σ est la matrice des covariances des données ; F , la matrice des conditions d'universalité (les coefficients de dérive) ; f_0 , le vecteur des contraintes de non-biais et σ_0 , le vecteur des covariances entre les points à estimer et les observations. En introduisant l'équation 2.14 dans 2.13, l'estimateur de la charge devient :

$$\hat{h} = \begin{bmatrix} h'_{obs} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma & F \\ F' & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \sigma_0 \\ f_0 \end{bmatrix} \quad (2.15)$$

Alors que la matrice Σ est construite à partir d'un modèle de covariance (*ad hoc* ou expérimental), F et f_0 représentent les contraintes de non-biais et ne dépendent que

de la localisation des données. Brochu et Marcotte (2003) ont proposé de considérer les observations piézométriques comme une variable aléatoire fluctuant autour d'une dérive dictée par l'équation de Bear et Jacobs (Bear et Jacobs, 1965). En régime permanent, pour un aquifère confiné, homogène et bidimensionnel, celle-ci est exprimée par :

$$h(x, y) = H_w - (x - x_w) \cdot \frac{\partial H}{\partial x} - (y - y_w) \cdot \frac{\partial H}{\partial y} - \frac{Q_w}{4\pi T} \ln \left(\frac{r^2}{r_w^2} \right) \quad (2.16)$$

où T est la transmissivité de l'aquifère ; H , le champ de charges avant le pompage ; Q_w , le débit de pompage ; r_w , le rayon du puits localisé à (x_w, y_w) ; H_w , le niveau piézométrique initial au puits et r , la distance entre le puits et un point d'évaluation situé en (x, y) .

Une estimation non-biaisée de $h^R(x, y)$ est obtenue en posant les contraintes de non-biais suivantes :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n_{obs}} \lambda_i &= 1 \\ \sum_{i=1}^{n_{obs}} \lambda_i x_i &= x \\ \sum_{i=1}^{n_{obs}} \lambda_i y_i &= y \\ \sum_{i=1}^{n_{obs}} \lambda_i \ln(r_i^2) &= \ln(r^2) \end{aligned}$$

La première contrainte représente le non-biais du krigage ordinaire ; les deuxième et troisième conditions sont liées aux composantes du gradient régional ($\partial H / \partial x$, $\partial H / \partial y$). La quatrième condition de non-biais représente l'influence du pompage sur une observation située à une distance r du puits. Sous forme matricielle, les coefficients de la dérive pour les n_{obs} sont donnés par :

$$F_h = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & y_1 & \ln(r_1^2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n_{obs}} & y_{n_{obs}} & \ln(r_{n_{obs}}^2) \end{bmatrix} \quad (2.17)$$

Afin de mieux représenter les frontières hydrogéologiques, Delhomme (1979a) (rapporté par Chiles et Delfiner (1999)) a proposé l'utilisation de *points doublons*. Ces derniers sont des paires de points fictifs de charges qui permettent d'imposer la magnitude et la direction du gradient hydraulique entre chacun des points de la paire. Seule la différence de charges entre les valeurs aux doublons est importante et non les valeurs elles-même. La présence des doublons va affecter les poids de krigeage et modifier l'estimation de la charge de façon à reproduire la différence de charges désirée. La matrice des conditions de non-biais pour les n_Δ points doublons est donnée par :

$$F_\Delta = \begin{bmatrix} 0 & \Delta x_1 & \Delta y_1 & \Delta \ln(r_{\Delta 1}^2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \Delta x_{n_\Delta} & \Delta y_{n_\Delta} & \Delta \ln(r_{\Delta n}^2) \end{bmatrix} \quad (2.18)$$

où Δx et Δy représentent les distances horizontale et verticale entre les points d'une paire de doublons et $\Delta \ln(r_\Delta^2)$ est la différence des contraintes de puits évaluée à chacun des doublons.

En modifiant le système de krigeage universel (2.15) afin de tenir compte des points doublons, une estimation de la charge au point (x,y) peut être obtenue en résolvant le système linéaire suivant :

$$\hat{h} = \begin{bmatrix} h'_{obs} & \Delta & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma_{hh} & \Sigma_{h\Delta} & F_h \\ \Sigma'_{h\Delta} & \Sigma_{\Delta\Delta} & F_\Delta \\ F'_h & F'_\Delta & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \sigma_{h0} \\ \sigma_{\Delta 0} \\ f_0 \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

où les indices h et Δ réfèrent aux charges observées et aux points doublons respectivement. h_{obs} est le vecteur $(1 \times n_{obs})$ des observations piézométriques ; Δ est le vecteur $(1 \times n_\Delta)$ des différences de charges entre les points d'une paire (0 pour une frontière imperméable) ; Σ_{hh} est la matrice de covariance des observations piézométriques $(n_{obs} \times n_{obs})$; $\Sigma_{h\Delta}$ est la matrice de covariance entre les observations et les points doublons $(n_{obs} \times n_\Delta)$; $\Sigma_{\Delta\Delta}$ est la matrice de covariance entre les points doublons $(n_\Delta \times n_\Delta)$; σ_{ho} est le vecteur des covariances entre les observations de charges et le point à estimer $(n_{obs} \times 1)$; $\sigma_{\Delta o}$ est le vecteur des covariances entre les points doublons et le point à estimer $(n_\Delta \times 1)$ et f_o est le vecteur des dérivées (4×1) pour le point à estimer, $\begin{bmatrix} 1 & x & y & \ln(r^2) \end{bmatrix}'$.

La construction des matrices de covariances Σ exige la détermination de la fonction de covariance de la charge hydraulique. En présence d'un gradient régional et d'un écoulement radial, la moyenne et la variance de la charge hydraulique ne sont pas stationnaires (Gelhar, 1993) ce qui complique grandement l'obtention d'une fonction de covariance représentative du phénomène étudié. De plus, pour la plupart des études hydrogéologiques, le nombre d'observations directes des charges hydrauliques n'est pas suffisant pour assurer la construction d'un covariogramme robuste possédant plus de 30 paires par points tel que recommandé par Journel et Huijbregts (1978).

Utilisant une analogie avec le champ de potentiel gravimétrique, Brochu et Marcotte (2003) ont proposé d'utiliser une fonction de covariance gravimétrique (Chiles et Guilhen, 1984; Marcotte et Chouteau, 1993) pour représenter le comportement de h^R . Ils notent que la fonction de covariance de h^R doit être au moins quatre fois différentiable à l'origine afin que l'estimation de h^R puisse être différentiable deux fois en x et en y (comme la solution de l'équation de diffusion). Puisque la fonction de covariance gravimétrique est infiniment différentiable à l'origine, le choix de ce modèle (2.20) apparaît donc judicieux. Celui-ci est donné par :

$$C(r) = C_0\delta(r) + C \left(1 + \frac{r^2}{\alpha^2}\right)^{-0.5} \quad (2.20)$$

où C est la covariance entre deux points séparés par une distance r ; C_0 représente l'effet de pépite; C constitue la variance du phénomène, α sa portée et δ est un dirac nul à $r = 0$. Les paramètres C et α sont choisis de façon à obtenir un champ de charges krigées suffisamment lisse. Les erreurs de mesure sont modélisées à l'aide de C_0 et des erreurs de mesure affectant différemment les observations peuvent être incorporées en faisant varier C_0 sur la diagonale de Σ_{hh} .

2.4 Méthode des éléments finis

En présence d'une géométrie complexe ou d'un champ de paramètres hétérogènes, l'équation de diffusion ne peut être résolue analytiquement. On doit alors faire appel à des méthodes numériques (différences finies, éléments finis, volumes finis, éléments analytiques). La méthode des éléments finis est particulièrement bien adaptée pour

représenter adéquatement des géométries irrégulières et des hétérogénéités marquées. Celle-ci à donc été retenue pour la résolution du problème direct et l'obtention des charges hydrauliques h^i . Afin de simplifier l'exposé, la présentation est limitée à une situation bidimensionnelle et isotrope en régime permanent. Ce qui est présenté est essentiellement tiré de Pinder et Gray (1977).

L'approche la plus populaire pour la résolution d'un problème d'éléments finis est la méthode des résidus pondérés. Cette dernière consiste à trouver une approximation discrète de la solution annulant partiellement les résidus d'une équation différentielle partielle. En exprimant l'équation différentielle partielle à l'étude par :

$$Lh(x, y) = f(x, y) \quad (x, y) \in (\Omega) \quad (2.21)$$

où L est un opérateur quelconque agissant sur la fonction inconnue h et où f est une fonction connue, le résidu se définit comme :

$$\mathfrak{R}(x, y) = Lh(x, y) - f(x, y) \quad (2.22)$$

En multipliant $\mathfrak{R}$ par une fonction de pondération w non-nulle, appelée *fonction test*, et en intégrant sur le domaine (Ω) , on obtient le problème variationnel suivant :

$$\int_{\Omega} \mathfrak{R}(x, y) \cdot w_i(x, y) d\Omega = 0 \quad 1 \leq i \leq N \quad (2.23)$$

avec N , le nombre d'inconnues.

Pour une situation bidimensionnelle, l'opérateur L agissant sur h est donné par :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T \frac{\partial h(x, y)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T \frac{\partial h(x, y)}{\partial y} \right) \quad (2.24)$$

En utilisant cet opérateur dans l'équation 2.22, $\mathfrak{R}(x, y) \cdot w_i(x, y)$ est une équation différentielle partielle d'ordre 2. On peut diminuer l'ordre de l'équation en appliquant le théorème de Green à l'équation 2.23. On obtient ainsi la formulation faible du problème variationnel.

$$- \int_{\Omega} T \frac{\partial h}{\partial x} \cdot \frac{\partial w_i}{\partial x} + T \frac{\partial h}{\partial y} \cdot \frac{\partial w_i}{\partial y} d\Omega + \int_{\Gamma} T \frac{\partial h}{\partial n} w_i d\Gamma = 0 \quad (2.25)$$

Plusieurs possibilités s'offrent quant au choix de la fonction test w_i . L'une des plus usuelles consiste à approximer $h(x, y)$ par une expansion finie de monômes de la forme

$$h(x, y) \approx \tilde{h}(x, y) = \sum_{j=1}^N u_j \phi_j(x, y) \quad (2.26)$$

et à poser $w_i(x, y) = \phi_i(x, y)$. Cette approche est connue sous le nom de méthode de Galerkin. En remplaçant $h(x, y)$ par $\tilde{h}(x, y)$ et en posant $w_i = \phi_i$, l'équation 2.25 devient :

$$-\int_{\Omega} T \frac{\partial}{\partial x} \sum_{j=1}^N u_j \phi_j \cdot \frac{\partial \phi_i}{\partial x} + T \frac{\partial}{\partial y} \sum_{j=1}^N u_j \phi_j \cdot \frac{\partial \phi_i}{\partial y} d\Omega + \int_{\Gamma} T \frac{\partial}{\partial n} \sum_{j=1}^N u_j \phi_j \phi_i d\Gamma = 0 \quad (2.27)$$

et après manipulation

$$\int_{\Omega} T \sum_{j=1}^N u_j \frac{\partial \phi_j}{\partial x} \cdot \frac{\partial \phi_i}{\partial x} + T \sum_{j=1}^N u_j \frac{\partial \phi_j}{\partial y} \cdot \frac{\partial \phi_i}{\partial y} d\Omega = \int_{\Gamma} T \sum_{j=1}^N u_j \frac{\partial \phi_j}{\partial n} \phi_i d\Gamma \quad (2.28)$$

Dans la méthode des éléments finis, les fonctions polynomiales sont choisies de façon à être constantes à l'intérieur de sous-domaines, appelés *éléments finis*. La discrétisation du domaine (Ω) est généralement réalisée au moyen de triangles élémentaires (Ω_e). Il en va de même pour la frontière (Γ) qui est divisée en segments (Γ_e) (voir figure 2.2). Afin d'obtenir une continuité de la solution au contact d'éléments adjacents, des *nœuds* sont placés aux sommets et parfois sur les côtés des triangles. Le problème 2.28 se résume à déterminer les n_{el} u_j qui sont les valeurs de la solution aux nœuds.

L'assemblage de la contribution de tous les éléments permet d'obtenir la matrice de rigidité $\mathbf{K} = \sum k_e$ et la matrice de masse $\mathbf{F} = \sum f_e$ où

$$k_e(i, j) = \int_{\Omega_e} T \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} + T \frac{\partial \phi_i}{\partial y} \frac{\partial \phi_j}{\partial y} d\Omega_e \quad i, j = 1, 2, \dots, n_{el} \quad (2.29)$$

et

$$f_e(i) = \int_{\Gamma_e} \frac{\partial \phi_i}{\partial n} \phi_i d\Gamma \quad i, j = 1, 2, \dots, n_{el} \quad (2.30)$$

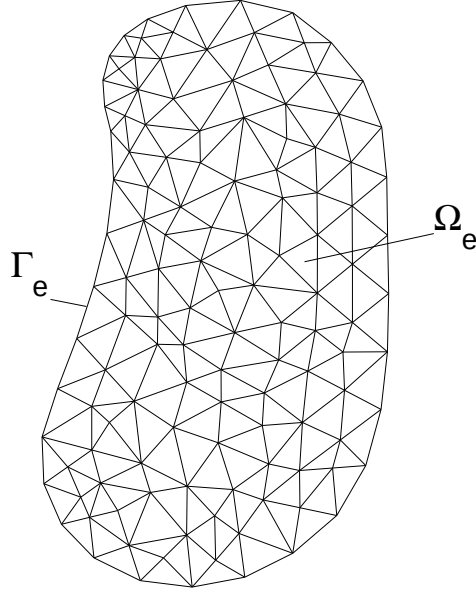


Figure 2.2: Discretisation du domaine par des éléments finis

Les inconnues du problèmes étant les N valeurs de $u_i(\mathbf{U})$, une solution à l'équation 2.28 est obtenue en résolvant le système matriciel suivant :

$$\mathbf{KU} = \mathbf{F} \quad (2.31)$$

L'évaluation des intégrales à l'intérieur d'un élément est réalisée plus aisément si les coordonnées sont exprimées seulement par rapport à ses nœuds. Le système de coordonnées d'aire est particulièrement adapté aux éléments triangulaires car il permet de passer d'un système de coordonnées globales à un système de coordonnées locales. Les coordonnées d'aires sont obtenues par :

$$L_i = \frac{(\alpha_i + \beta_i x + \gamma_i y)}{2A_{\Omega_e}} \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.32)$$

où $\alpha_i = x_j y_k - x_k y_j$; $\beta_i = y_j - y_k$; $\gamma_i = x_k - x_j$; i, j, k sont les indices des nœuds primaires et A_{Ω_e} est l'aire de l'élément. Les autres valeurs de L_i sont obtenues en effectuant une permutation cyclique des indices i, j, k . L'intégration est souvent réalisée à l'aide d'une quadrature de Gauss à trois points qui permet d'intégrer exactement un polynôme jusqu'à la cinquième puissance. La formule de quadrature est :

$$(1/A_e) \int_{\Omega_e} f d\Omega_e = \sum_{j=1}^3 W_j f(L_{1j}, L_{2j}, L_{3j}) \quad (2.33)$$

TAB. 2.1: Coordonnées et poids d'intégration de points de Gauss pour un élément triangulaire

L_1	L_2	L_3	W
0.66666667	0.16666667	0.16666667	0.33333333
0.16666667	0.66666667	0.16666667	0.33333333
0.16666667	0.16666667	0.66666667	0.33333333

et les coordonnées des points de Gauss et les poids d'intégration (W) sont présentés au tableau 2.1.

Finalement, la résolution du système 2.31 permet d'obtenir les degrés de liberté (u) des fonctions d'interpolation (2.26) pour chaque élément. La valeur de $\tilde{h}$ en un point quelconque de (Ω) est obtenue en résolvant l'équation 2.26 pour l'élément contenant le point d'évaluation. Pour une fonction d'interpolation quadratique à six nœuds on a :

$$\tilde{h} = \sum_{i=1}^6 u_i \phi_i \quad (2.34)$$

avec

$$\phi_i = L_i(2L_i - 1) \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.35)$$

et

$$\phi_{i+3} = 4L_i L_{i+1} \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.36)$$

La dérivée première de $\tilde{h}(x, y)$ est obtenue en dérivant les fonctions d'interpolation par rapport à x et y . On obtient :

$$\frac{d\tilde{h}}{dx} = \sum_{i=1}^6 u_i \frac{d\phi_i}{dx} \quad \frac{d\tilde{h}}{dy} = \sum_{i=1}^6 u_i \frac{d\phi_i}{dy} \quad (2.37)$$

où

$$\frac{d\phi_i}{dx} = \left[\frac{2\beta_i L_i}{A_{\Omega_e}} - \frac{\beta_i}{2A_{\Omega_e}} \right] \quad \frac{d\phi_i}{dy} = \left[\frac{2\gamma_i L_i}{A_{\Omega_e}} - \frac{\gamma_i}{2A_{\Omega_e}} \right] \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.38)$$

et

$$\frac{d\phi_{i+3}}{dx} = \left[\frac{2\beta_i L_{i+1}}{A_{\Omega_e}} \right] \quad \frac{d\phi_{i+3}}{dy} = \left[\frac{2\gamma_i L_{i+1}}{A_{\Omega_e}} \right] \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.39)$$

pour les nœuds secondaires.

2.5 Aspects opérationnels

Afin d'assurer la reproduction rapide des charges et la reconstruction efficace du champ de paramètres dans un contexte réel d'application, quelques ajouts sont apportés aux méthodes d'inversion développées au début de ce chapitre. Ces ajouts portent notamment sur la définition d'un coefficient d'amortissement, sur le calcul des gradients ∇h^i et $\nabla \hat{h}$ et sur l'imposition de contraintes aux paramètres.

2.5.1 Schémas d'amortissement

Tel que discuté à la section 2.1, les corrections appliquées aux conductivités sont proportionnelles aux rapports des gradients à l'intérieur d'un élément. Par ailleurs, en début de processus, ∇h^i et $\nabla \hat{h}$ peuvent être profondément différents, ce qui peut introduire des facteurs de correction sur K extrêmes. Afin d'éviter une modification trop rapide de la solution initiale ou d'éventuels problèmes numériques (division par zéro, K_j^{i+1} nul), un coefficient d'amortissement (β) est incorporé dans l'équation 2.6.

$$K_j^{i+1} = K_j^i \cdot \frac{\|\nabla h_j^i\|_2 + \beta^i}{\|\nabla \hat{h}_j\|_2 + \beta^i} \quad i \geq 0, 1 \geq j \leq n_{el} \quad (2.40)$$

Ce paramètre agit en quelque sorte comme un paramètre de régularisation. Lorsque les gradients hydrauliques sont faibles, la différence relative entre ∇h^i et $\nabla \hat{h}$ est généralement élevée. Dans de telles situations, l'influence de l'amortissement est maximale ce qui évite un écartement prononcé entre la solution et la solution initiale. Afin d'assurer une convergence suffisante en fin d'optimisation, le coefficient d'amortissement peut être diminué à chaque itération. L'approche retenue consiste à diminuer le coefficient d'amortissement exponentiellement à partir d'une valeur initiale. Plusieurs types de fonction d'amortissement peuvent être utilisées pour le calcul de β , *constant* (equation 2.41), *linéairement décroissant* (2.42) ou *exponentiellement décroissant* peut être utilisé (2.43) :

$$\beta^i = \beta^o \quad i \geq 0 \quad (2.41)$$

$$\beta^i = \alpha i + \beta^o \quad i \geq 0, \alpha < 0, \beta^i \geq 0 \quad (2.42)$$

$$\beta^i = \beta^o e^{-3i/\alpha} \quad i \geq 0, \alpha > 0 \quad (2.43)$$

où β^0 est le coefficient d'amortissement initial ; i , l'itération et α , une pente (2.42) ou la portée de l'itération (2.43). Pour l'amortissement constant, le coefficient β est maintenu à sa valeur de départ durant tout le processus de calibration. L'amortissement linéaire quant à lui, amoindrit β d'une valeur α à chaque itération. Le schéma d'amortissement qui a donné les meilleurs résultats est l'amortissement exponentiel. Une caractéristique importante de cette fonction est que pour $i = \alpha$, le coefficient d'amortissement ne représente que 5% de sa valeur initiale.

Afin de tenir compte des secteurs où $\hat{h}$ est moins bien estimé, on aurait pu lier β^0 à la variance de krigeage de $\hat{h}$. Cependant, on verra au chapitre 5 que les résultats sont peu sensibles au choix de β^0 pour les schémas d'amortissement exponentiels. Plusieurs fonctions et schémas d'amortissement différents y seront évalués.

2.5.2 Facteur de correction

Même si en théorie, les gradients hydrauliques $\nabla \hat{h}$ pourraient être estimés par krigeage (Chiles et Delfiner, 1999), il est plus pratique d'utiliser les dérivées des fonctions d'interpolation (équations 2.37 à 2.39) pour calculer à la fois ∇h^i et $\nabla \hat{h}$. La résolution du problème direct permet d'obtenir les six degrés de liberté (u_i) nécessaires au calcul ∇h^i à l'intérieur d'un élément. Le gradient $\nabla \hat{h}$ est obtenu en deux étapes. Dans un premier temps, le problème est modélisé à l'aide de points doublons et d'un modèle de covariance adéquat. Un krigeage avec dérive de puits et conditions frontières imposées est ensuite réalisé aux nœuds de la grille d'éléments finis grâce au système 2.19. On dispose ainsi d'une estimation géostatistique des N degrés de liberté du problème discrétisé. Finalement, les composantes des gradients hydrauliques sont obtenues comme précédemment, à l'aide des dérivées des fonctions d'interpolation. La magnitude du vecteur est obtenue à l'aide de la norme euclidienne :

$$\|\nabla h\|_2 = \sqrt{\left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial h}{\partial y}\right)^2} \quad (2.44)$$

Si les fonctions d'interpolation utilisées sont d'ordre élevé (> 1) et si les éléments finis sont de grande taille, il est possible que la variation de la charge soit inégale à l'intérieur d'un élément. Par conséquent, où évaluer le gradient à l'intérieur de

l'élément fini ? Utiliser une seule valeur du gradient évaluée au centre de l'élément risque de ne pas tenir compte de la possible variation non-linéaire de la charge. Aussi, il serait coûteux numériquement d'intégrer les composantes du gradient sur chaque élément et d'obtenir une valeur moyenne. Quatre possibilités ont été identifiées quant au calcul d'un gradient moyen. La première consiste à évaluer le gradient au centre de chaque élément fini et à affecter la transmissivité T^i d'un *facteur de correction* δ donné par :

$$\delta_{Mid} = \frac{\|\nabla h_j^i\|_2 + \beta^i}{\|\nabla \hat{h}_j\|_2 + \beta^i} \quad (2.45)$$

Les trois autres possibilités consistent à évaluer les gradients où leur calcul est le plus précis, à savoir, les points de Gauss (voir le tableau 2.1 et la figure 2.3). Puisque trois valeurs de $\|h\|_2$ sont obtenues dans chaque élément, une correction unique est obtenue en calculant la moyenne des trois rapports $(\|\nabla h_j^i\|_2 + \beta^i) / (\|\nabla \hat{h}_j\|_2 + \beta^i)$ obtenus à chacun des points de Gauss. Le facteur de correction appliqué à T^i est ensuite calculé grâce à une moyenne arithmétique (2.46), géométrique (2.47) ou harmonique (2.48). Pour chacune de ces situations on obtient :

$$\delta_{Arit} = \frac{1}{3} \sum_{l=1}^3 \frac{\|\nabla h_{j,l}^i\|_2 + \beta^i}{\|\nabla \hat{h}_{j,l}\|_2 + \beta^i} \quad (2.46)$$

$$\delta_{Geom} = \left(\prod_{l=1}^3 \frac{\|\nabla h_{j,l}^i\|_2 + \beta^i}{\|\nabla \hat{h}_{j,l}\|_2 + \beta^i} \right)^{1/3} \quad (2.47)$$

$$\delta_{Harm} = \left(\frac{1}{3} \sum_{l=1}^3 \frac{\|\nabla \hat{h}_{j,l}\|_2 + \beta^i}{\|\nabla h_{j,l}^i\|_2 + \beta^i} \right)^{-1} \quad (2.48)$$

On note que si les fonctions d'interpolation des éléments finis sont linéaires, les équations 2.45 à 2.48 sont identiques et donneront les mêmes résultats que si un seul point d'évaluation a été retenu. On comparera au chapitre 5 la performance de ces différentes approches.

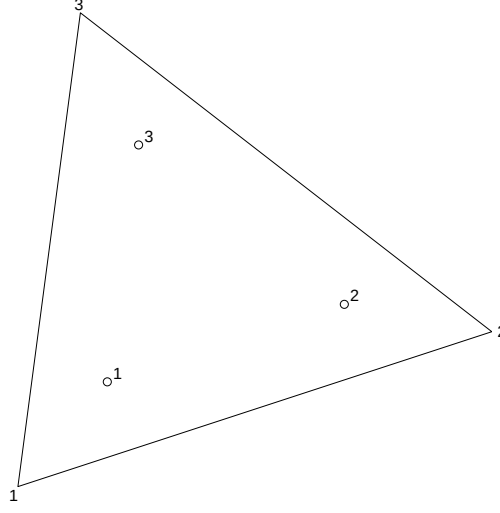


Figure 2.3: Points de Gauss d'un élément fini

2.5.3 Contraintes sur les coefficients

La non-unicité de la solution du problème inverse indique que plusieurs champs de paramètres pourraient reproduire parfaitement des charges hydrauliques sans pour autant que les paramètres obtenus soient réalistes d'un point de vue géologique. Afin d'obtenir une solution qui reproduise les observations piézométriques et qui honore le modèle conceptuel géologique, il peut être nécessaire de contraindre la solution de K à l'intérieur d'une plage de valeurs probables. L'application de contraintes n'est pas une opération nouvelle, Lavenue *et al.* (1995) ont contraint la solution à l'intérieur de trois écarts-type de krigage de la solution initiale. Notre approche est assez similaire. À chaque itération, des *contraintes absolues*, des *contraintes relatives* au germe initial et des *contraintes de mesure* sont imposées à la solution. Celles-ci sont exprimées respectivement par :

$$K_j^{\min} \leq K_j^{i+1} \leq K_j^{\max} \quad \forall j \quad (2.49)$$

$$Y_j^0 - \Delta Y \leq Y_j^{i+1} \leq Y_j^0 + \Delta Y \quad \forall j \quad (2.50)$$

$$K_j^{i+1} = K_j^{obs} \quad \forall j \quad (2.51)$$

où K_{min} et K_{max} sont les valeurs minimales et maximales de conductivité pouvant être attribuées à un élément et où ΔY est l'écart maximal par rapport à la solution initiale Y^0 admissible. La condition 2.50 permet d'obtenir une solution qui est à l'intérieur d'une plage de valeur que l'on considère *a priori* réaliste géologiquement. Ces limites peuvent aussi varier spatialement pour tenir compte de zones géologiques différentes. La solution initiale soumise à l'algorithme doit respecter les critères énoncés par les équations 2.49 à 2.51.

2.6 Outil de calcul développé

Pour les besoins de ce travail, l'algorithme d'inversion présenté dans ce chapitre à été implémenté dans le programme *HydroGeo_Inv*. Le programme est écrit en langage Matlab[®] version 6.5.1 (The MathWorks, 2004) et utilise les fonctions Femlab[®] version 3.0a (Comsol, 2004) pour la résolution du problème direct. *HydroGeo_Inv* permet de calibrer des modèles 2D ou 3D en régime permanent ou transitoire par la méthode de l'estimation successive des flux. La présence d'un terme source et d'un coefficient d'emménagement variable dans l'espace est supportée par le programme. La calibration s'effectue à partir d'une solution initiale de K ou de T , possiblement hétérogène, fournie par l'utilisateur. Si une série de solutions initiales de K/T , de recharge ou d'emménagement lui est fournie, le programme réalise une inversion stochastique. De plus, la structure modulaire du programme lui permet d'utiliser des algorithmes d'inversion et des fonctions graphiques diverses.

La structure générale de *HydroGeo_Inv* est présentée à la figure 2.4 alors que l'algorithme détaillé de la méthode de l'estimation successive des flux avec une fonction d'amortissement exponentielle et une facteur de correction de type δ_{Mid} est illustré à la figure 2.5. Lors de son lancement, le programme charge les différents fichiers d'entrées et les paramètres utilisés. Ces paramètres précisent, entre autres, la méthode d'inversion à utiliser, les modalités itératives, les affichages graphique et numérique, etc. Les conditions frontières affectées au modèle numérique sont automatiquement extraites du champ de charges krigées fourni par l'utilisateur. Des structures d'affectation des paramètres et d'interpolation des gradients sont créées et sauvegardées afin d'accélérer

le calcul. Une inversion est réalisée et optionnellement, une sortie graphique est affichée. Pour une inversion stochastique, les deux étapes précédentes sont répétées. Finalement, les résultats sont sauvegardés. Le code Matlab[®] de *HydroGeo_Inv* ainsi qu'un exemple de fichier de paramètres sont présentés à l'annexe B.

Puisque le champ de paramètres change à chaque résolution du problème direct, la matrice de rigidité doit être assemblée à nouveau à chaque itération. Lors de l'assemblage de la matrice en milieu hétérogène, la valeur du paramètre K/T affectée à chaque élément doit être déterminée par des opérations relativement coûteuses en temps de calcul. Même optimisées, celles-ci peuvent représenter jusqu'à 99% du temps nécessaire à la résolution du problème direct. Dans ce cas, le temps imparti à l'intégration numérique ou à la résolution du système matriciel est négligeable par rapport au temps utilisé pour affecter le champ de paramètres aux éléments. Afin d'accélérer l'assemblage de la matrice de rigidité, une structure d'affectation des coefficients (indice du vecteur/élément) est créée par la fonction *K_Hetero.m* et sauvegardée après la première résolution du problème direct. Cette structure d'affectation est ensuite réutilisée lors des résolutions subséquentes, ce qui permet une substantielle diminution du temps de calcul. À titre d'exemple, pour un modèle 3D contenant 30500 éléments, la première résolution du problème direct nécessite 325 secondes alors que les résolutions suivantes utilisant la structure d'affectation sont complétées en 2.4 secondes. Le gain est donc très appréciable. Une approche semblable est utilisée pour affecter les champs de recharge et d'emménagement aux éléments finis. Les fonctions *Q_Hetero.m* et *S_Hetero.m* sont alors utilisées par *HydroGeo_Inv*.

Lors des inversions, les gradients hydrauliques sont calculés à chaque itération. Puisque les gradients hydrauliques sont toujours évalués aux mêmes endroits, les dérivées spatiales des fonctions d'interpolation (ϕ), nécessaires au calcul de ∇h^i (voir les équations 2.38 et 2.39), peuvent être calculées une seule fois et sauvegardées sous la forme d'une structure d'interpolation. L'obtention de ∇h^i se résume ensuite à l'évaluation de 2.37. Afin d'optimiser le temps de calcul nécessaire à la réalisation d'une inversion, une telle structure d'interpolation des gradients est créée par *HydroGeo_Inv* en début de processus.

Afin d'assurer une parfaite compatibilité entre la solution du problème d'éléments finis et le champ de charges $\hat{h}$ utilisé lors de l'inversion, les valeurs des conditions frontières de type Dirichlet sont extraites du champ $\hat{h}$ et sont utilisées lors de l'assemblage de la matrice de masse.

La résolution du problème direct par la méthode des éléments finis est réalisée par la librairie de fonctions Femlab[©]. Ces fonctions sont totalement accessibles à Matlab[©] et permettent de mailler, d'attribuer des paramètres, des conditions frontières et de résoudre une équation différentielle partielle à l'aide de la méthode des éléments finis. La parfaite compatibilité de Femlab[©] avec Matlab[©], la disponibilité de plusieurs type d'éléments finis, la puissance et le nombre de ses solveurs en font un outil de prédilection. C'est pour l'ensemble de ces raisons que Femlab[©] 3.0a a été retenu pour la résolution du problème direct dans *HydroGeo-Inv*. Une évaluation sommaire des fonctions Femlab[©] utilisées dans *HydroGeo-Inv* a été réalisée. Nos résultats sont présentés à l'annexe C et indiquent que pour les problèmes linéaires abordés, les fonctions Femlab[©] sont tout à fait adéquates.

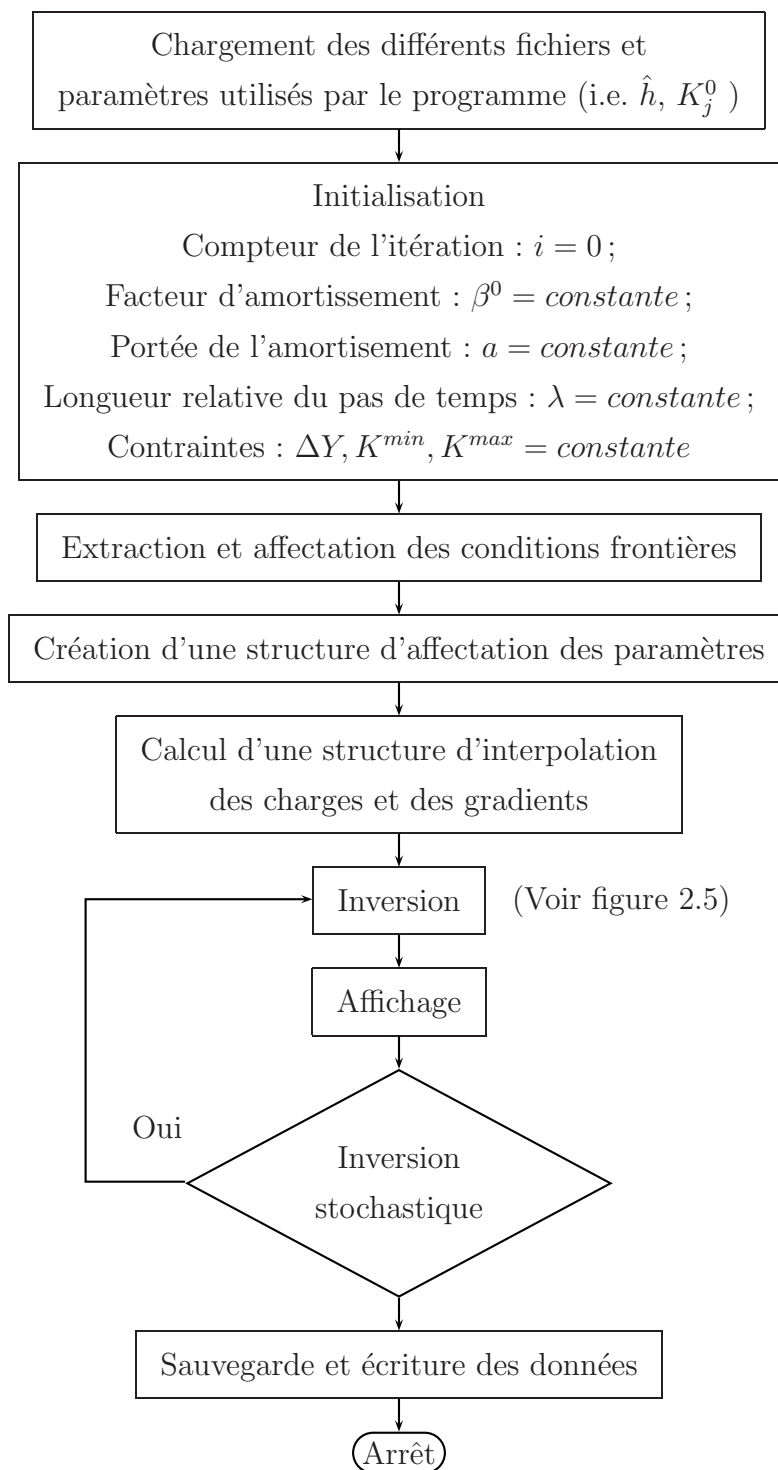


Figure 2.4: Algorithme schématique du programme principal HydroGeo_Inv

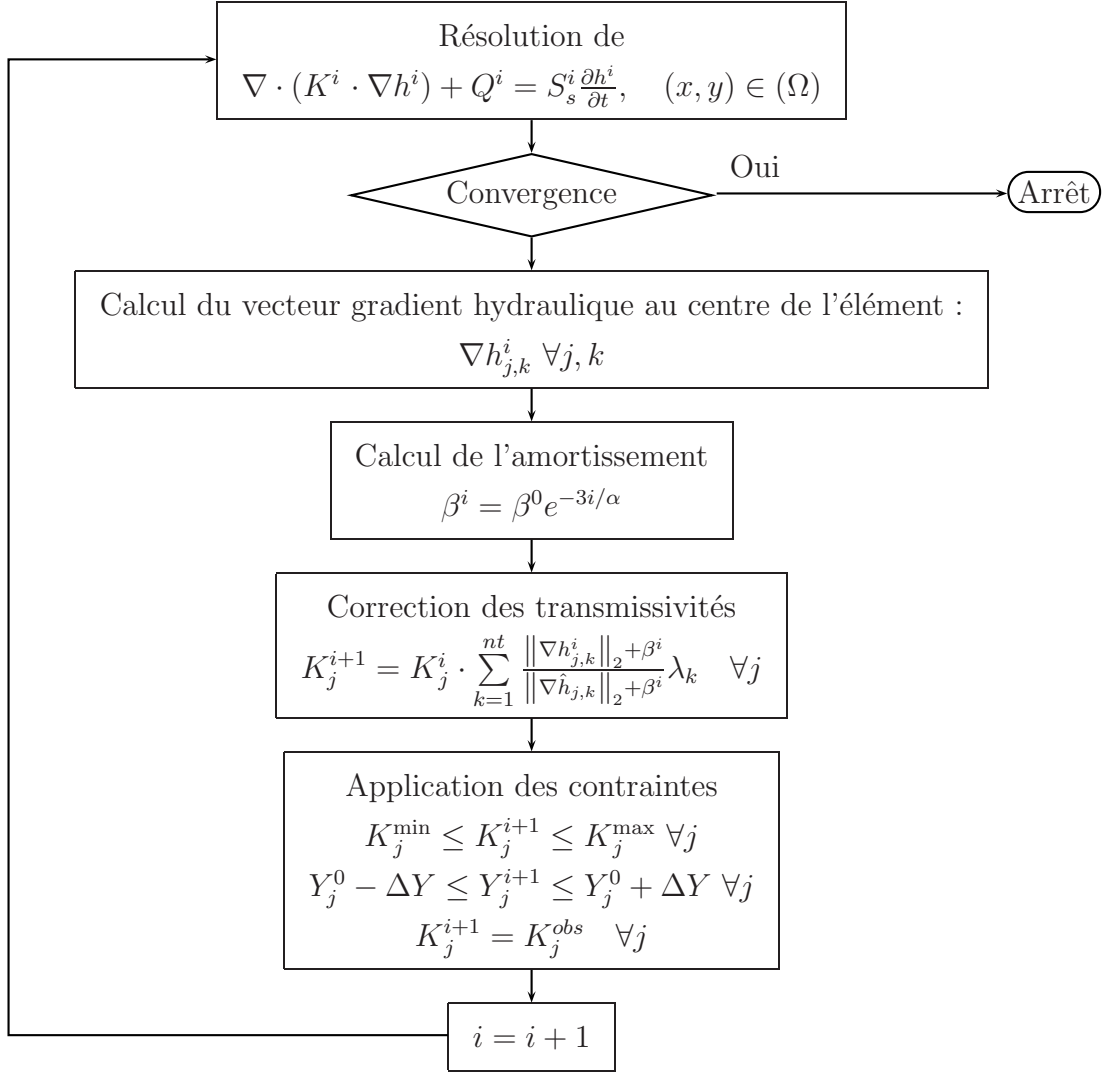


Figure 2.5: Algorithme schématique de la méthode de l'estimation successive des flux

Chapitre 3

Modèle synthétique et normes d'évaluation

La capacité d'une méthode d'inversion à reconstruire le véritable champ de paramètres ne peut être évaluée que si ce champ est connu. Notre approche expérimentale repose donc essentiellement sur l'utilisation d'un *modèle numérique synthétique* dont la géométrie, les conditions frontières, la solution initiale et les coefficients sont connus. La résolution du modèle synthétique permet d'obtenir aisément les charges hydrauliques et l'évaluation de l'efficacité de la méthode d'inversion est donc directe et sans équivoque à la fois pour K et h . Par ailleurs, puisque le problème inverse n'est pas un problème à solution unique, l'évaluation est réalisée sur une série d'inversions lors d'une expérience de Monte Carlo.

Ce chapitre contient les principaux éléments méthodologiques permettant d'aborder les chapitres 4, 5 et 6. Dans un premier temps, le modèle numérique synthétique conçu pour l'évaluation des méthodes d'inversion ainsi que les charges hydrauliques synthétiques, le patron d'écoulement et les temps de transfert sont présentés. En second lieu, une attention particulière est apportée à la définition de normes quantitatives d'évaluation qui permettront de comparer les performances des différentes approches évaluées. La troisième partie présente et caractérise les solutions initiales de transmissivité soumises aux algorithmes d'inversion. Ensuite, les charges estimées ainsi que les paramètres utilisés pour leur obtention sont présentés.

3.1 Description du modèle synthétique

3.1.1 Géométrie et conditions frontières

Le modèle synthétique utilisé a une extension de $2000m \times 2000m$. Un puits de $0.5m$ de rayon est localisé en $(500m, 1000m)$ et possède un débit d'extraction de $750l/min$. Le puits est mis en fonction au temps $t = 0$ et le pompage est poursuivi pendant 116 jours. L'état initial du système est l'écoulement régional permanent de l'aquifère en l'absence de pompage. Ce problème bidimensionnel d'écoulement en nappe captive est décrit par l'équation d'état suivante :

$$div(T \cdot \nabla h) = S \frac{\partial h}{\partial t} \quad (x, y) \in (\Omega) \quad (3.1)$$

où (Ω) est le domaine d'écoulement bordé par (Γ) ; T , le champ des transmissivités $(K \times b)$; h , les charges hydrauliques; S , le champ des coefficients d'emménagement $(S_s \times b)$ et t , le temps. L'équation de diffusion est soumise à l'état initial et aux conditions frontières

$$\begin{aligned} h|_{(t=0)} &= h_0(x, y) & (x, y) \in (\Omega) \\ h|_{(\Gamma_1)} &= 110m & (x, y) \in (\Gamma_1) \\ h|_{(\Gamma_2)} &= 125m & (x, y) \in (\Gamma_2) \\ -T \nabla h \cdot n|_{(\Gamma_3)} &= 0m^2/s & (x, y) \in (\Gamma_3) \\ -T \nabla h \cdot n|_{(\Gamma_4)} &= -0.003979m^2/s & (x, y) \in (\Gamma_4) \quad , t > 0 \end{aligned} \quad (3.2)$$

où h_0 est le champ de charges initial; Γ_1 et Γ_2 sont des frontières de type Dirichlet; Γ_3 et Γ_4 sont des frontières de type Neumann représentant respectivement les frontières imperméables et le puits de pompage et n , un vecteur normal à Γ_3 et Γ_4 . La géométrie du problème est présentée à la figure 3.1(a). On note au passage que le coefficient d'emménagement S (0.0001), l'épaisseur de l'aquifère b (10m), la porosité effective n_e (0.30) et le terme source Q (0m/s) sont supposés uniformes sur l'ensemble du domaine.

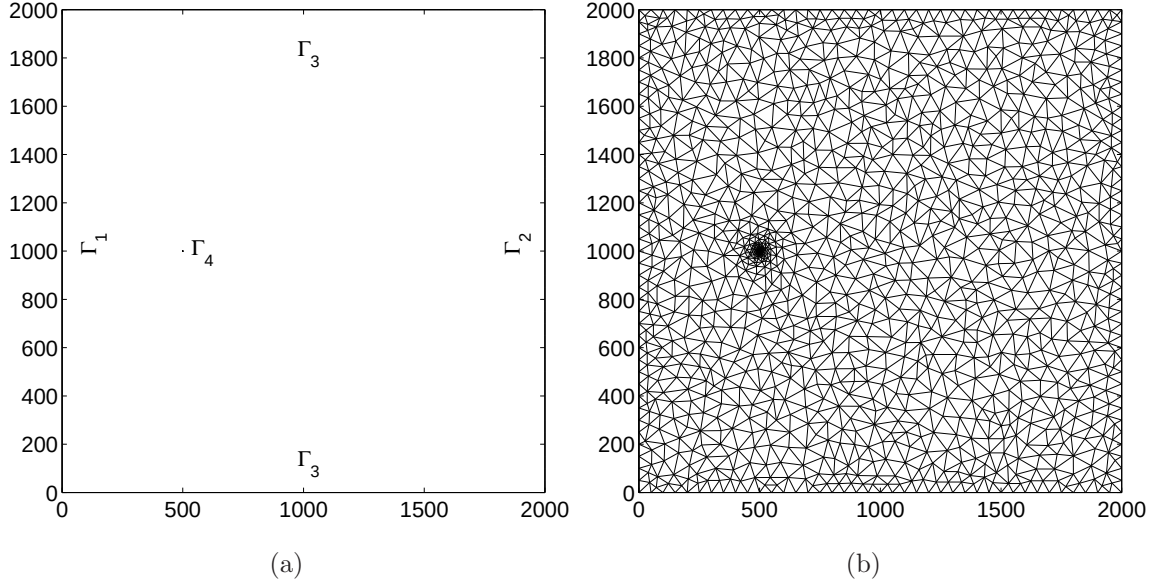


Figure 3.1: Géométrie du modèle synthétique. (a) Conditions frontières et (b) discrétisation

La réalisation d'un essai de pompage et la calibration d'un modèle numérique sur les observations piézométriques sont des opérations couramment réalisées en hydrogéologie. L'ampleur des rabattements dans le secteur du puits et leur variation inégale dans le temps et l'espace constituent très souvent des difficultés importantes pour les méthodes d'inversion. Dans ce modèle synthétique, le débit de pompage a été choisi suffisamment élevé de façon à simuler une situation où le calage de l'essai est difficile en pratique. Par ailleurs, tel que discuté à la section 1.3.1, l'identification des paramètres dans les secteurs présentant de faibles gradients hydrauliques devrait être moins bonne. Par conséquent, les autres conditions frontières ont été choisies de façon à avoir des gradients hydrauliques relativement faibles dans certains éléments du modèle.

3.1.2 Discrétisation du domaine

Le domaine a été discrétisé à l'aide de 3088 éléments finis quadratiques. Au total 6380 nœuds primaires et secondaires sont utilisés pour la résolution du problème direct. La taille maximale des éléments a été imposée à 95m de longueur. Afin

d'éviter tout problème numérique, une taille maximale de $0.075m$ a été imposée avec les éléments directement en contact avec le puits (Γ_4). La figure 3.1(b) présente le maillage utilisé. On note que la qualité des éléments finis, donnée par $Q_j = 4\sqrt{3}A_j/(l_{j1}^2 + l_{j2}^2 + l_{j3}^2)$ où l_j est la longueur des côtés du triangle j , est en moyenne de 0.89, ce qui est considéré comme bon.

3.1.3 Transmissivités du modèle de référence

Le modèle synthétique de transmissivité retenu a été choisi de façon à mimer un aquifère hétérogène présentant à la fois des structures perméable et imperméable. Quelques hétérogénéités locales ont été introduites mais le modèle représente essentiellement un cordon granulaire de type esker, orienté nord-ouest/sud-est et bordé au nord et au sud par des formations moins perméables. Puisque la méthode des éléments finis a été retenue pour résoudre le problème direct, des éléments triangulaires ont été utilisés comme support de la transmissivité. On postule ainsi que la transmissivité est uniforme à l'intérieur d'un élément fini et que le passage à une surface élémentaire adjacente est brusque. Le champ des transmissivités de référence, noté T^R , est présenté à la figure 3.2.

Il est d'usage courant de supposer une distribution lognormale de T ou de K (voir par exemple Freeze (1975) et Hoeksema et Kitanidis (1985)). Pour un milieu ayant des supports de taille différente, la moyenne et la variance de Y ($\log_{10} T$) sont obtenues en pondérant la transmissivité par la surface relative de chaque élément :

$$\bar{Y} = \sum_{j=1}^{n_{el}} Y_j \frac{A_j}{A_\Omega} \quad (3.3)$$

$$\sigma_Y^2 = \sum_{j=1}^{n_{el}} (Y_j - \bar{Y})^2 \frac{A_j}{A_\Omega} \quad (3.4)$$

où Y_j est le $\log_{10} T_j$; A_j , l'aire de l'élément j et A_Ω , l'aire du domaine. Utilisant les définitions précédentes, T^R possède une moyenne $\bar{Y}^R$ de -3.62 et une variance $\sigma_{Y^R}^2$ de 1.10 . De plus, les valeurs de Y^R s'étalent sur près de cinq ordres de grandeur et sont comprises entre -6.63 et -1.72 .

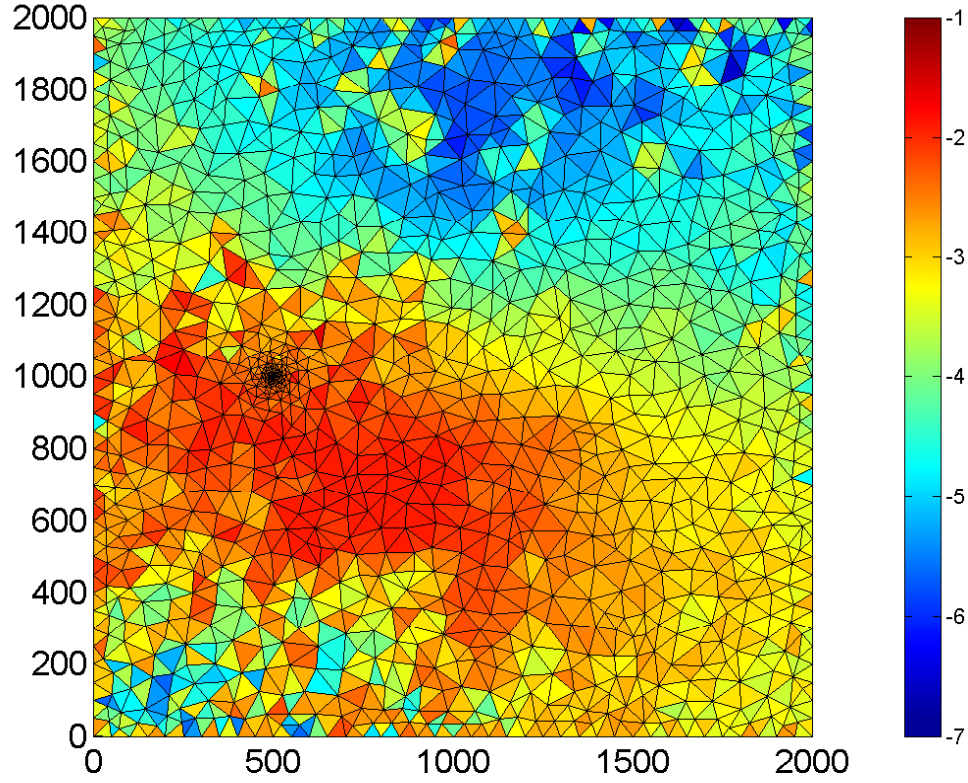


Figure 3.2: Champ de transmissivités du modèle de référence ($\log_{10} m^2/s$)

La structure spatiale de Y^R pour différentes directions et espacements est illustrée par le plan variographique de la figure 3.3. Celui-ci a été obtenu par une méthode spectrale (Marcotte, 1996) à partir de valeurs espacées de $50m$ et extraites de la grille d'éléments finis. La variabilité maximale (~ 2.5) est observée dans une direction perpendiculaire au cordon granulaire. Cette variabilité élevée est la conséquence des variations latérales de la transmissivité perpendiculairement à l'allongement du cordon.

3.1.4 Charges hydrauliques du modèle de référence

Les charges hydrauliques de référence, notées h^R , ont été obtenues en résolvant le système 3.1 avec $T = T^R$ pour l'intervalle de temps $0 < t \leq 116d$ et pour $t = \infty$. Même si le régime permanent est presque atteint après 69 jours de pompage, la durée

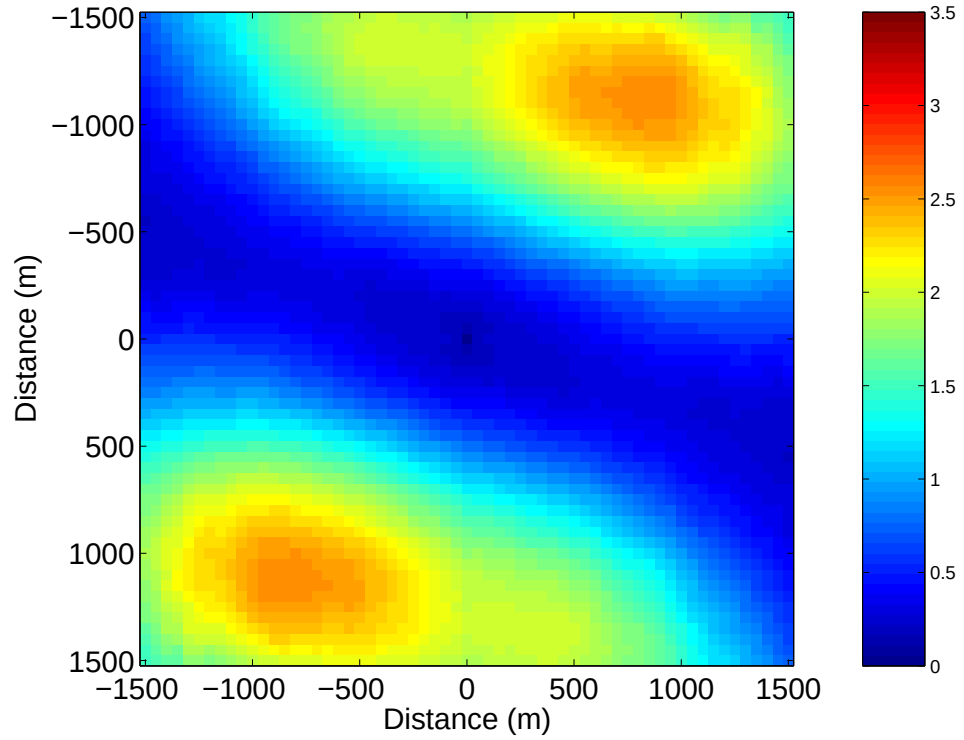


Figure 3.3: Plan variographique des transmissivités de référence $(\log_{10} m^2/s)^2$

de la simulation transitoire a été poursuivie jusqu'à 116 jours. En plus des pas de temps utilisés par le solveur, une solution de charges hydrauliques a été calculée et extraite à six pas de temps supplémentaires, soit à 0, 0.01, 0.12, 1.2, 11.6 et 116 jours ou 10^3 , 10^4 , 10^5 , 10^6 et $10^7 s$ (voir la figure 3.4). Le temps $t = 0$ correspond à l'écoulement permanent en absence de pompage. Le temps $t = 0.01d$ correspond au moment où un rabattement significatif est perçu dans l'aquifère alors que le dernier instant est le moment où le régime permanent est à toutes fins pratiques atteint. Les valeurs intermédiaires ont été obtenues avec des intervalles de temps égaux (en $\log_{10}$).

La figure 3.5 présente quelques unes des solutions obtenues à différents temps d'évaluation. On remarque que les conditions frontières ont un effet prépondérant sur les solutions obtenues. La frontière ouest (Γ_1) limite le rabattement induit par le pompage alors que les frontières imperméables (Γ_3) contraignent l'écoulement vers l'ouest et favorisent l'étalement du cône de rabattement vers le nord et le sud. L'étalement

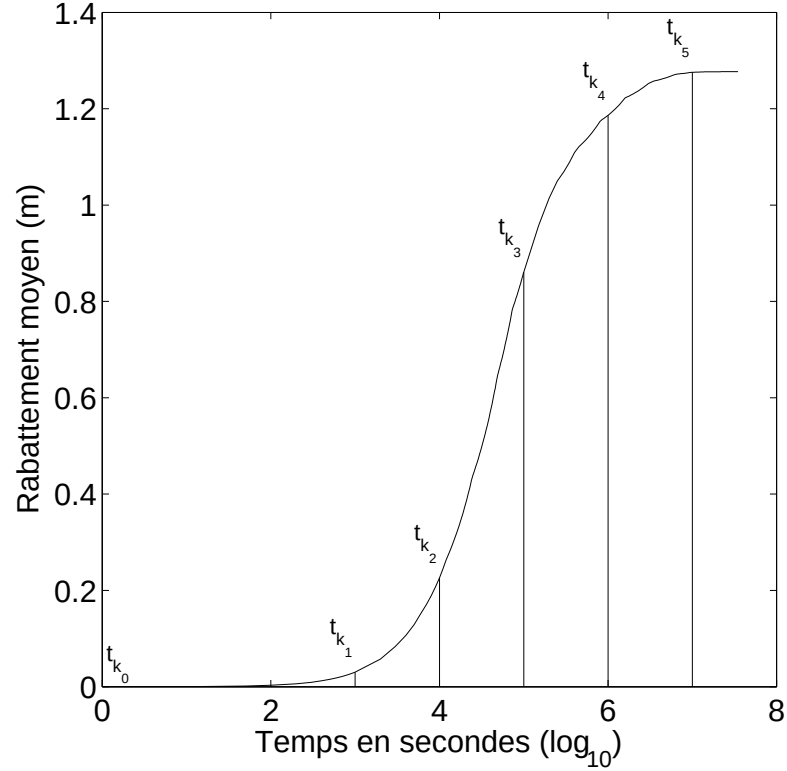


Figure 3.4: Rabattement moyen dans l'aquifère et temps d'évaluation du problème direct en régime transitoire

du cône vers l'est est limité par l'écoulement régional dirigé vers l'ouest. Après 0.5d de pompage, l'influence du puits devient évidente. Les pertes de charges apparaissent beaucoup plus fortes à l'est de l'aquifère que dans le secteur du puits. Celles-ci sont causées par des transmissivités plus faibles le long de (Γ_2) . Au nord-est de l'aquifère, les hétérogénéités locales introduites dans le modèle de transmissivité perturbent localement les équipotentiels. Il sera intéressant de voir si ces particularités du champ de charges pourront être retrouvées lors des inversions.

En l'absence de pompage ($t = 0$), le gradient hydraulique induit par les conditions frontières de Dirichlet est de $0.0075m/m$ alors qu'à l'atteinte du régime permanent ($t = \infty$), la charge hydraulique à proximité du puits ($h_w = 106.59m$) provoque un gradient hydraulique moyen de $0.012m/m$ entre la frontière Γ_2 et le puits. Le patron d'écoulement dans la partie ouest de l'aquifère est grandement influencé par la

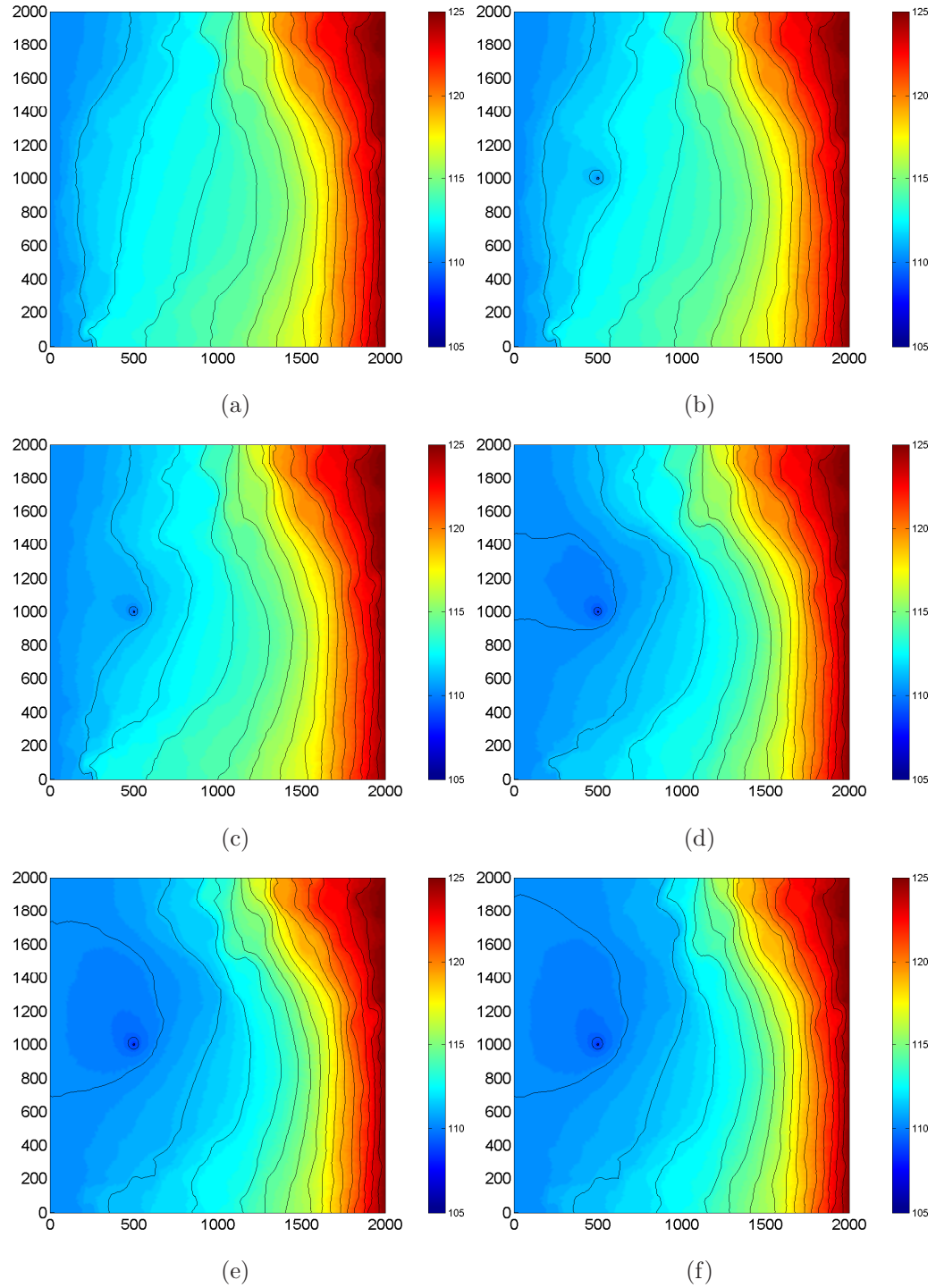


Figure 3.5: Charges hydrauliques du modèle de référence à (a) $t = 0d$, (b) $t = 0.01d$, (c) $t = 0.12d$, (d) $t = 1.2d$, (e) $t = 11.6d$, (f) $t = \infty d$ en
(m)

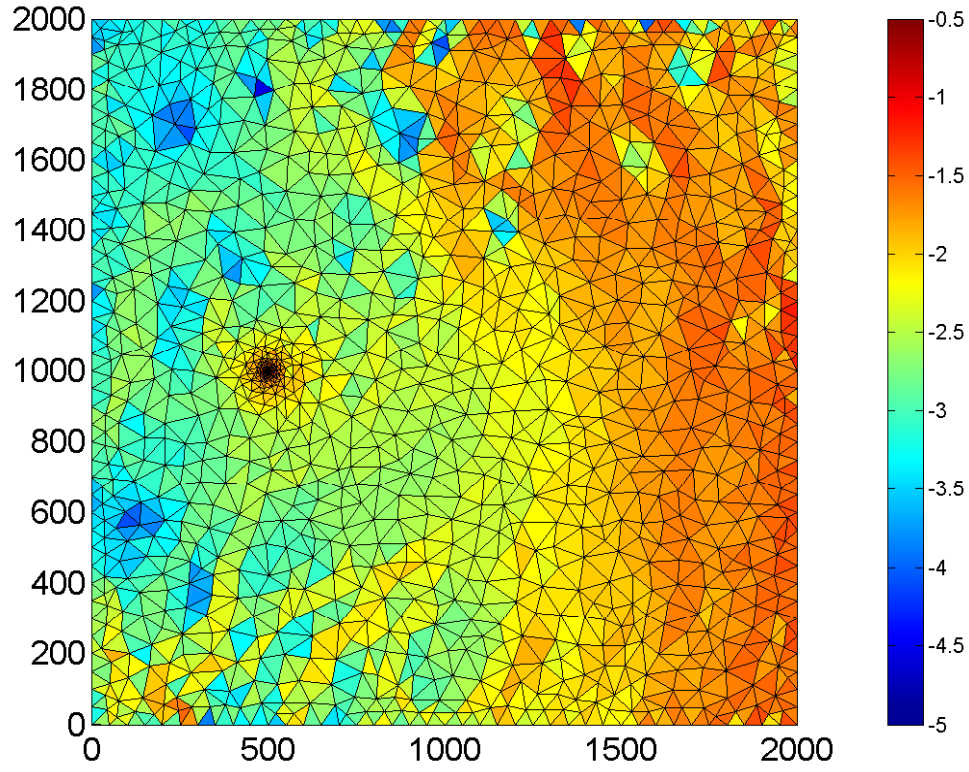


Figure 3.6: Logarithme de la magnitude du gradient hydraulique évaluée au centre des éléments en régime permanent (-)

présence du puits de pompage (Γ_4). Par conséquent, les gradients hydrauliques les plus élevés sont observés dans le secteur immédiat du puits. D'autres valeurs élevées de gradient sont observées dans l'est de l'aquifère (voir figure 3.6). Néanmoins, 122 éléments sont affectés de gradients hydrauliques inférieurs à $3.2 \times 10^{-4} m/m$.

3.1.5 Trajectographie et temps de transfert de référence

La délimitation des périmètres de protection d'un ouvrage de captage ou l'estimation du temps de réhabilitation d'un site contaminé font intervenir la notion de temps de transfert de l'eau souterraine. Le réseau d'écoulement du modèle synthétique en régime permanent ainsi que la distribution des temps de parcours sont présentés dans cette section.

En milieu hétérogène, la trajectoire d'une particule ne peut être évaluée au moyen d'une solution analytique. Par conséquent, un algorithme utilisant la méthode de Euler (voir Anderson et Woessner (1992)) a été adopté pour l'identification du parcours des particules (η). L'algorithme suppose la particule non-réactive et le milieu non-dispersif. L'approche consiste à déplacer une particule dans la direction du flux hydraulique jusqu'à ce que la particule atteigne une frontière. Le pas d'avancement (dl) est choisi de façon à être proportionnel à la surface de l'élément contenant la particule. Cette approche permet d'épouser facilement les géométries complexes et les changements importants dans la direction de l'écoulement de l'eau.

L'algorithme général va comme suit :

1. Initialisation de la position de la particule $\mathbf{x}_m$, ($m = 0$) ;
2. Calcul du flux hydraulique ($\vec{q}_m$) affectant la particule au pas d'avancement m ;
3. Détermination de la surface de l'élément triangulaire contenant la particule ;
4. Déplacement de la particule d'un pas $dl_m = \sqrt{A_j}/2$ dans la direction de ($\vec{q}_m$) ;
5. Sauvegarde de la position $\mathbf{x}_m$ et du pas dl_m , $m = m + 1$;
6. Les étapes 2 à 5 sont répétées jusqu'à ce que la particule atteigne une frontière.

Le temps de transfert d'une particule entre son point d'injection et son point de sortie est obtenu en sommant les incréments de temps utilisés par une particule pour parcourir les n_η pas d'avancement. Le temps total est obtenu par :

$$t = \sum_{m=0}^{n_\eta} \frac{dl_m \times b_m \times n_{em}}{T_m \|\nabla h_m\|_2} \quad (3.5)$$

avec dl_m , le pas d'avancement de la particule ; b_m , l'épaisseur de l'aquifère ; n_{em} , la porosité effective ; T_m , la transmissivité et $\|\nabla h_m\|_2$, le gradient hydraulique au point $\mathbf{x}_m$. L'algorithme de calcul du temps de transfert a été comparé avec succès avec les solutions analytiques disponibles. Les résultats de cette comparaison sont présentés à l'annexe D.

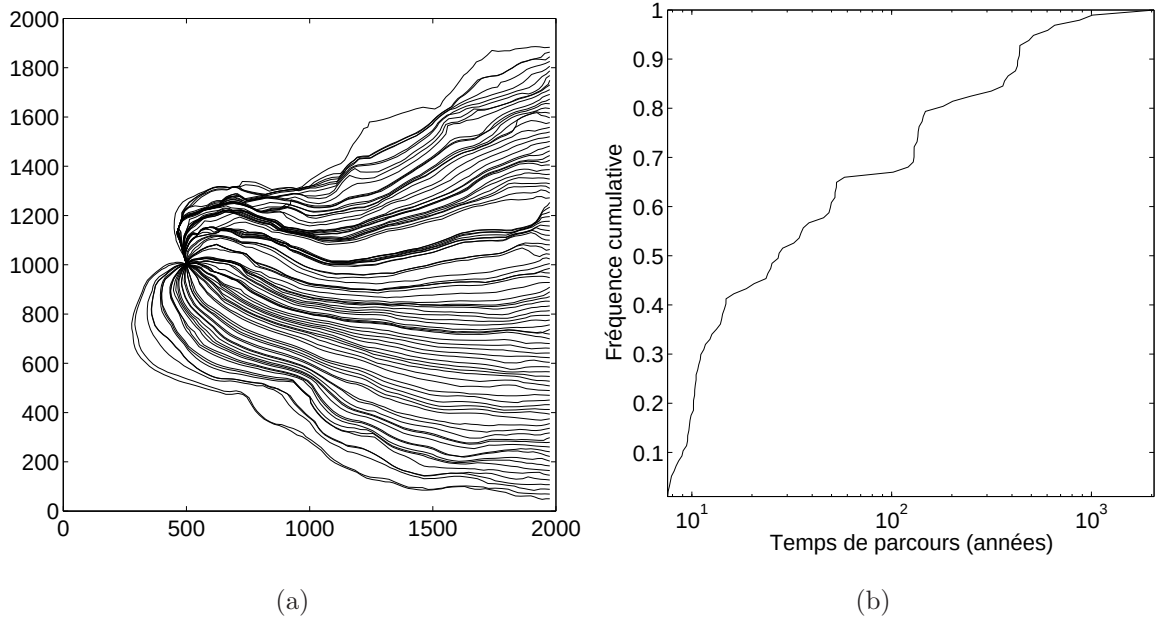


Figure 3.7: (a) Trajectographie du modèle de référence et (b) distribution des temps de transfert

Les trajectoires de référence de particules injectées le long de la frontière Γ_2 sont présentées à la figure 3.7(a). Celles-ci définissent numériquement l'aire d'alimentation du modèle de référence. Seules les particules aboutissant au puits sont présentées. Pour chaque particule, le temps de transfert a été calculé à l'aide de l'équation 3.5 avec $b_m = 10$ et $n_{em} = 0.3 \forall m$. La moitié des particules ont des temps de transfert inférieurs à 30 ans. Tel que prévu, les particules traversant des zones moins perméables ont des temps de parcours plus élevés. Ceux-ci sont supérieurs à 400 ans dans 10% des cas.

3.2 Description des normes d'évaluation

Afin d'évaluer l'efficacité des méthodes d'inversion à reproduire le champ de transmissivité de référence (T^R) et les charges de référence (h^R), quelques normes d'évaluation ont été définies. Celles-ci permettront de faire apparaître divers aspects importants de la méthode d'inversion tout en offrant une base quantitative de comparaison. Tout au long de ce travail, nous ferons référence à ces définitions.

Les normes d'évaluations utilisées se divisent en trois principaux groupes. Un premier groupe permet de quantifier l'erreur d'ajustement des charges et des gradients pour une seule inversion. Le second groupe identifie l'erreur de reconstruction de la transmissivité et la corrélation entre les transmissivités optimisées à la fin de l'inversion et les transmissivité de référence. Finalement, le dernier groupe évalue les normes précédentes mais pour l'ensemble des inversions réalisées.

3.2.1 Erreur déterministe d'ajustement des charges

L'*erreur d'ajustement des charges* évalue l'erreur moyenne entre le champ de charges h^i (le résultat d'une inversion à l'itération i) et le champ $\hat{h}$ (le champ de charges utilisé pour faire l'inversion). Cette erreur est traduite par la norme :

$$MAE(h^i, \hat{h}) = \sum_{j=1}^{n_{el}} \sum_{k=1}^{n_t} \frac{|h_{j,k}^i - \hat{h}_{j,k}|}{n_t} \frac{A_j}{A_\Omega} \quad (3.6)$$

En régime permanent, $n_t = 1$ et la norme exprime l'erreur moyenne entre les surfaces h^i et $\hat{h}$ sur Ω . En régime transitoire, $n_t > 0$ et la norme évalue l'erreur moyenne d'ajustement entre les n_t paires $(h, \hat{h})$ de surfaces piézométriques. Si on pose $\hat{h} = h^R$, l'expression évalue l'erreur d'ajustement des charges réelles.

Si le problème direct est évalué en régime permanent, $n_t = 1$ et les expressions précédentes sont simplifiées. On retient que les charges et les gradients hydrauliques sont évalués au centre des éléments et que les différences individuelles sont pondérées par la surface relative de l'élément.

Dans un contexte réel d'application, les véritables charges sont connues uniquement aux piézomètres. L'*erreur d'ajustement des observations piézométriques* permet de quantifier le calage des observations par l'inversion et est donnée par :

$$MAE(h_{obs}^i, h_{obs}^R) = \sum_{m=1}^{n_{obs}} \frac{|h_m^i - h_m^R|}{n_{obs}} \quad (3.7)$$

avec h^i et h^R qui sont évalués aux localisations des piézomètres. On note que la statistique $MAE(h^i, \hat{h})$ est une statistique plus représentative que $MAE(h_{obs}^i, h_{obs}^R)$ car elle représente uniformément tout l'aquifère ce qui n'est pas nécessairement le cas pour $MAE(h_{obs}^i, h_{obs}^R)$.

3.2.2 Erreur déterministe de reconstruction des transmissivités

La capacité d'une méthode d'inversion à reconstruire le véritable champ de paramètres est quantifiée à l'aide de l'*erreur de reconstruction des transmissivités*. Celle-ci ne peut être évaluée que si le véritable champ de transmissivités est connu et est donnée par

$$MAE(Y^i, Y^R) = \sum_{j=1}^{n_{el}} |Y_j^i - Y_j^R| \frac{A_j}{A_\Omega} \quad (3.8)$$

La corrélation entre les valeurs obtenues après inversion et les valeurs de référence est obtenue par :

$$Corr(Y^i, Y^R) = \frac{1}{n_{gr} - 1} \sum_{j=1}^{n_{gr}} \left(\frac{Y_j^i - \bar{Y}^i}{\sigma_{Y^i}} \right) \left(\frac{Y_j^R - \bar{Y}^R}{\sigma_{Y^R}} \right) \quad (3.9)$$

où n_{gr} est le nombre de valeurs extraites d'une grille *déclustorisée* et

$$\sigma_Y = \sqrt{\frac{1}{n_{gr} - 1} \sum_{j=1}^{n_{gr}} (Y_j - \bar{Y})^2} \quad (3.10)$$

3.2.3 Erreur stochastique d'ajustement et de reconstruction

Le comportement hautement non-linéaire du problème inverse et la non-unicité de sa solution suggèrent de calculer les statistiques précédentes sur un *ensemble d'inversions*. L'*espérance des erreurs d'ajustement* exprime l'erreur moyenne d'ajustement pour les (n_{inv}) inversions réalisées et est donnée par :

$$EMAE(h^i, \hat{h}) = \sum_{l=1}^{n_{inv}} \frac{MAE(h_l^i, \hat{h})}{n_{inv}} \quad (3.11)$$

Pareillement, l'*espérance des erreurs de reconstruction* est donnée par :

$$EMAE(Y^i, Y^R) = \sum_{l=1}^{n_{inv}} \frac{MAE(Y_l^i, Y^R)}{n_{inv}} \quad (3.12)$$

Cette norme traduit la capacité d’une méthode d’inversion à reproduire en moyenne le véritable champ de transmissivités. L’écart-type associé à cette statistique peut être calculé.

Un test statistique d’égalité des moyennes (test *t* de Student, Johnson (2000)) permet d’évaluer le caractère significatif des différences observées pour les statistiques précédentes. Celui-ci sera introduit ultérieurement.

3.3 Caractérisation des germes de transmissivité

Afin de restreindre l’espace des solutions possibles et d’obtenir des solutions les plus réalistes possibles, les solutions initiales de transmissivités soumises à l’algorithme d’inversion devraient, idéalement, respecter toutes les informations déjà disponibles sur T (interprétation géologique, valeurs mesurées, relation d’ordre, variogramme, proportion des faciès, ...). Cependant, la plupart des études environnementales disposent de ressources financières limitées et au mieux, seulement quelques dizaines de forages et une quinzaine d’essais de pompage sont effectués en pratique. De plus, les contraintes logistiques et la variabilité spatiale de la conductivité hydraulique invalident souvent les méthodes d’interprétation des essais de pompage. Dans ce contexte, quelle image de l’aquifère devrait-on soumettre initialement à l’algorithme d’inversion ?

L’une des approches généralement utilisées pour la génération des solutions initiales de T est la simulation géostatistique conditionnelle (Chiles et Delfiner, 1999). L’approche permet de générer des champs de T équiprobables qui, d’une part, reproduisent les mesures et, d’autres part, respectent le modèle de covariance des données. Cependant, l’inférence de la covariance exige un nombre important de mesures. L’approche retenue dans cette section consiste plutôt à utiliser un modèle de covariance *ad hoc*, choisi volontairement différent du modèle de covariance du champ de référence, et à utiliser 14 mesures de T pour l’obtention des solutions initiales de transmissivités.

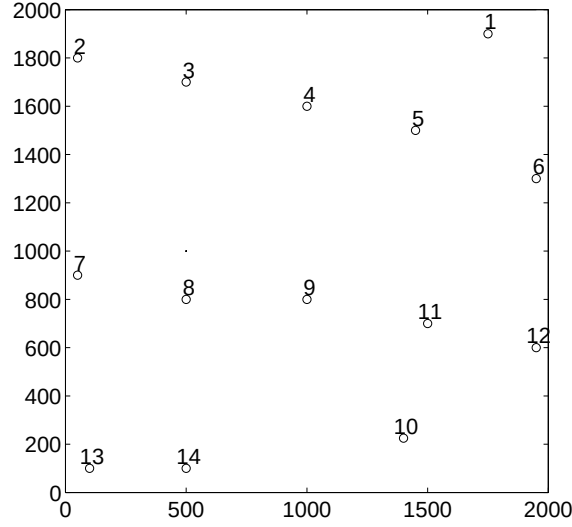


Figure 3.8: Localisation des mesures de T utilisées pour l'obtention des germes

Plus précisément, 14 mesures de T ont été extraites du champ de référence T^R . Celles-ci sont localisées à la figure 3.8. La moyenne des mesures est $\bar{Y}_{Obs} = -3.7314$ et sa variance $\sigma_{Y_{Obs}}^2 = 1.1266$, ce qui est assez similaire aux statistiques du champ de référence. Les germes ont été générés par simulations géostatistiques conditionnelles en utilisant la décomposition de Cholesky de la matrice de covariance (Davis, 1987). Les simulations ont porté sur le $\log_{10} T$ et ont été réalisées au centre des éléments finis. Une série de 100 germes a été simulée à partir d'un modèle de covariance sphérique ayant une portée isotrope de 2500m, un effet de pépite de 0.5 et un plateau de 2.5 de façon à obtenir des variogrammes relativement différents du variogramme de référence de façon à reproduire une situation réaliste et ne pas favoriser indûment la méthode d'inversion. Deux exemples de germes de T ainsi obtenus sont présentés à la figure 3.9 et les plans variographiques correspondants à la figure 3.10. La figure 3.11 illustre le variogramme de l'ensemble des germes pour deux directions.

L'erreur moyenne d'identification de T pour ces solutions initiales ($EMAE(Y^0, Y^R)$) est de 0.8902 et l'erreur d'ajustement moyenne correspondant aux solutions initiales ($EMAE(h^0, h^R)$) est de 2.7273 m en régime permanent et de 1.3987 m en régime transitoire.

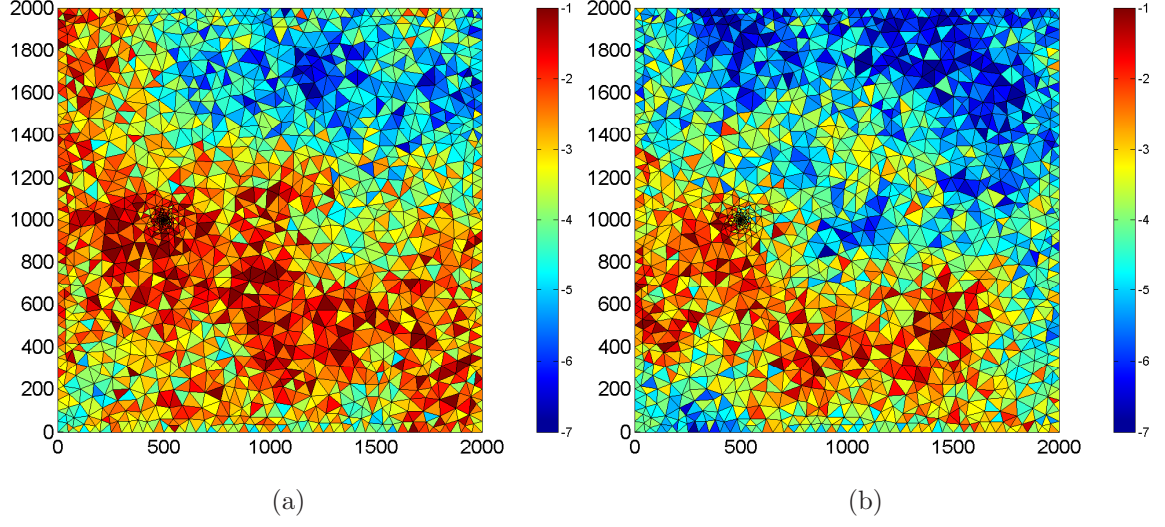


Figure 3.9: Exemples de germes utilisés lors des expériences de Monte Carlo.
 (a) percentile 10 et (b) percentile 90 en terme de $(MAE(Y^0, Y^R))$

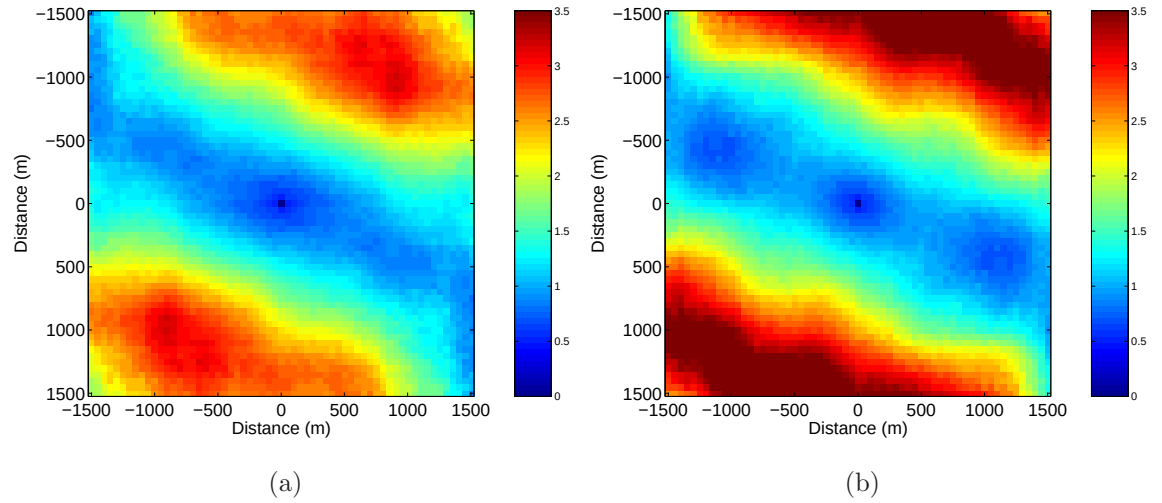


Figure 3.10: Plans variographiques de $\log_{10} T$ des germes présentés à la figure 3.9.

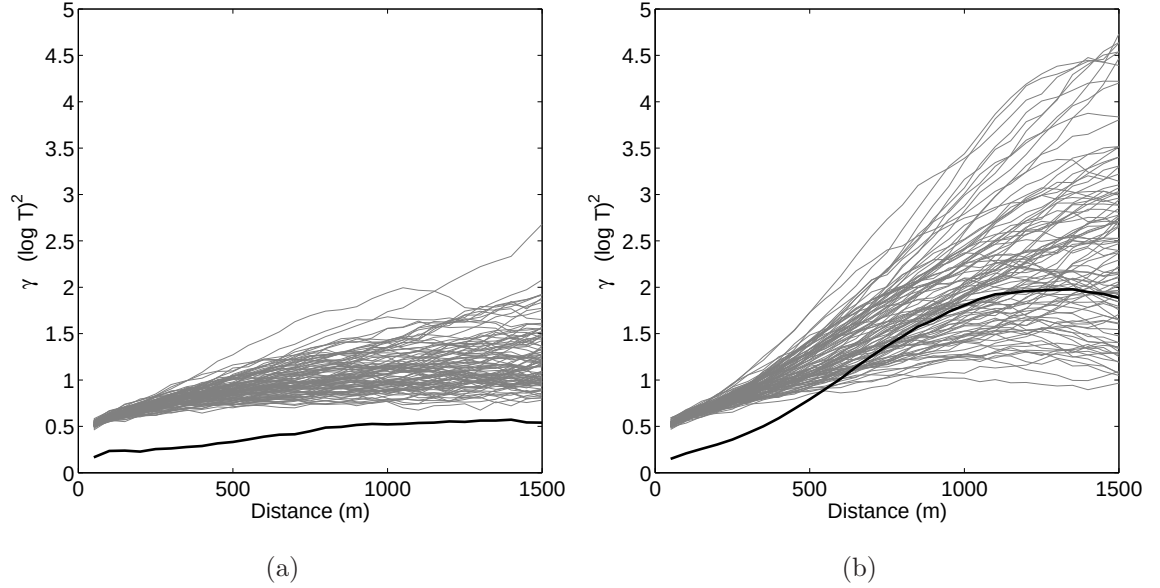


Figure 3.11: Variogrammes de l'ensemble des germes et du modèle de référence (en gras) $(\log_{10} T)^2$. (a) Direction est-ouest et (b) nord-sud.

3.4 Charges hydrauliques estimées

La méthode d'inversion présentée au chapitre 2 nécessite l'utilisation de champs de charges hydrauliques. Puisqu'en pratique on ne dispose que de mesures ponctuelles de h^R , l'approche préconisée consiste à utiliser ces observations afin d'obtenir une estimation de h^R , notée $\hat{h}$, par krigeage (voir section 2.3). La précision de l'estimation de h^R , et donc celle de l'inversion, est tributaire du nombre d'observations piézométriques. Afin d'évaluer l'influence du nombre d'observations piézométriques sur la performance des méthodes d'inversion, plusieurs champs $\hat{h}$ différents seront utilisés lors des inversions. Cette section s'attarde à les décrire.

Les champs $\hat{h}$ sont obtenus en supposant les conditions frontières Γ_1 et Γ_2 parfaitement connues. Afin de bien reproduire les conditions frontières Γ_1 et Γ_2 , des valeurs de 110m ou de 125m ont été imposées aux nœuds de la grille d'éléments finis présents sur ces frontières. Les frontières imperméables (Γ_3) ont été modélisées à l'aide de 40 paires de points doublons espacées de 50m et orientées perpendiculairement aux

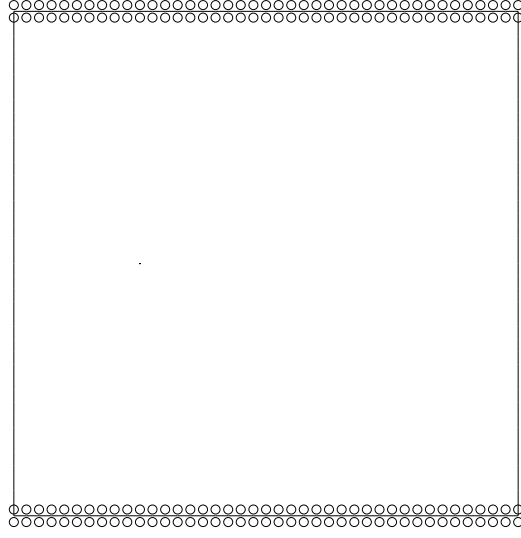


Figure 3.12: Configuration des points doublons.

frontières. Les différences de charges entre les points d'une même paire sont imposées nulles. Les paires de doublons sont présentées à la figure 3.12. Le modèle de covariance *ad hoc* utilisé est un modèle gravimétrique ayant une portée de $400m$ et un effet de pépité correspondant à $1/1000$ du plateau. Le modèle de covariance gravimétrique a été retenu pour son caractère dérivable (imposé par l'équation de diffusion) et ses bonnes propriétés numériques. La portée est choisie assez grande par rapport au domaine pour éviter la création de maximums et de minimums artificiels. Le faible effet de pépité utilisé permet de bien reproduire les mesures de charges. L'effet du puits de pompage est pris en compte par l'ajout de la dérive de puits au système de krigeage universel. L'estimation des charges est réalisée au moyen des jeux de données obtenus à 10, 25, 50 et 100 piézomètres synthétiques situés aux nœuds primaires de la grille d'éléments finis. Les estimations sont effectuées aux nœuds primaires et secondaires de la grille.

En régime permanent, les estimations sont réalisées avec des mesures de h^R prises à $t = \infty$ alors qu'en régime transitoire, des mesures de h^R prises à 0, 0.01, 0.12, 1.2, 11.6 et 116d sont utilisées. Les différents *scénarios piézométriques* sont résumés au tableau 3.1. La localisation des mesures de h^R ainsi que les champs de charges krigés en régime permanent et transitoire sont présentés aux figures 3.13 et 3.14.

TAB. 3.1: Scénarios piézométriques évalués et erreurs d'estimation des charges

Scénario piézométrique	Régime	n_{Piezo}	n_t	Frontières Γ_1 et Γ_2	$MAE(\hat{h}, h^R)$ (m)
1	Permanent	6380 (∞)	1	Connues	0
2	Permanent	100	1	Connues	0.1180
3	Permanent	50	1	Connues	0.1594
4	Permanent	25	1	Connues	0.1764
5	Permanent	10	1	Connues	0.3269
6	Transitoire	6380 (∞)	5	Connues	0
7	Transitoire	100	5	Connues	0.1210
8	Transitoire	50	5	Connues	0.1613
9	Transitoire	25	5	Connues	0.1770
10	Transitoire	10	5	Connues	0.3242

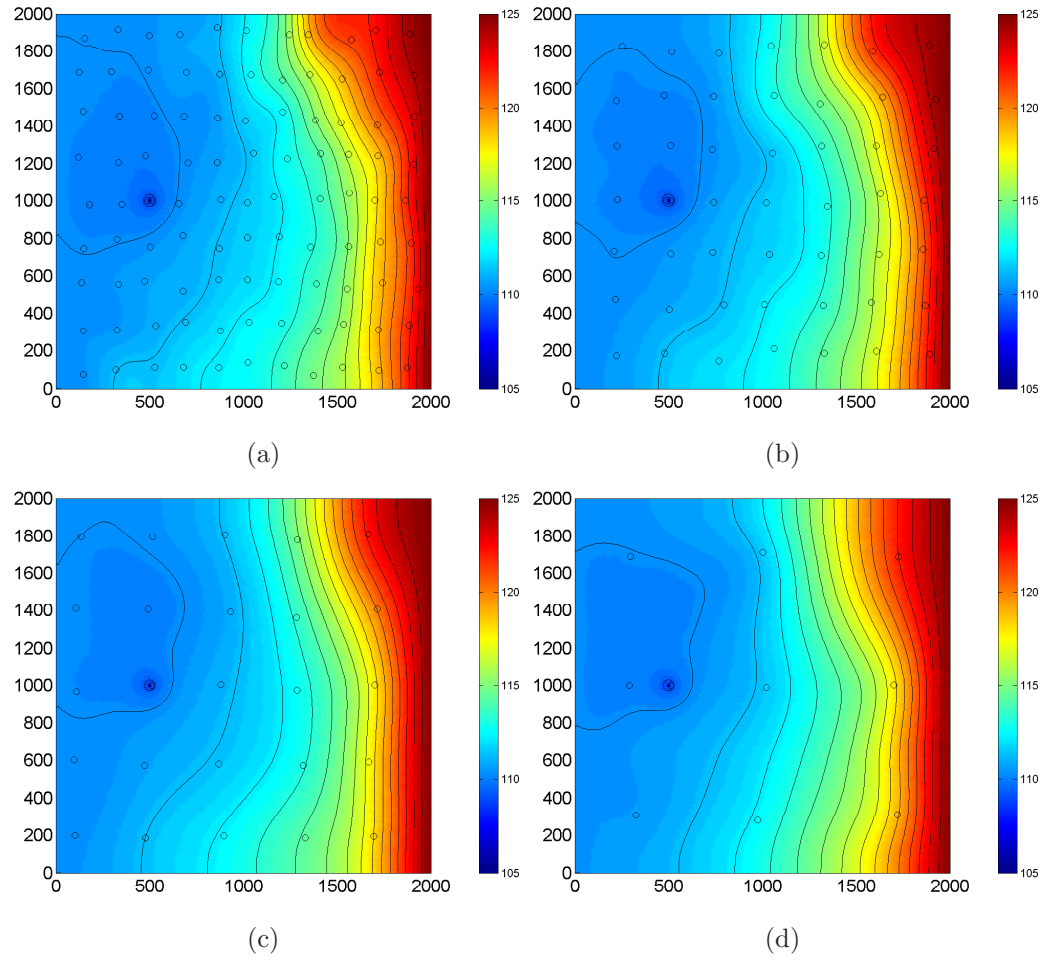


Figure 3.13: Localisation des piézomètres et charges krigées à $t = \infty$ (m). (a) 100 piézomètres, (b) 50 piézomètres, (c) 25 piézomètres et (d) 10 piézomètres.

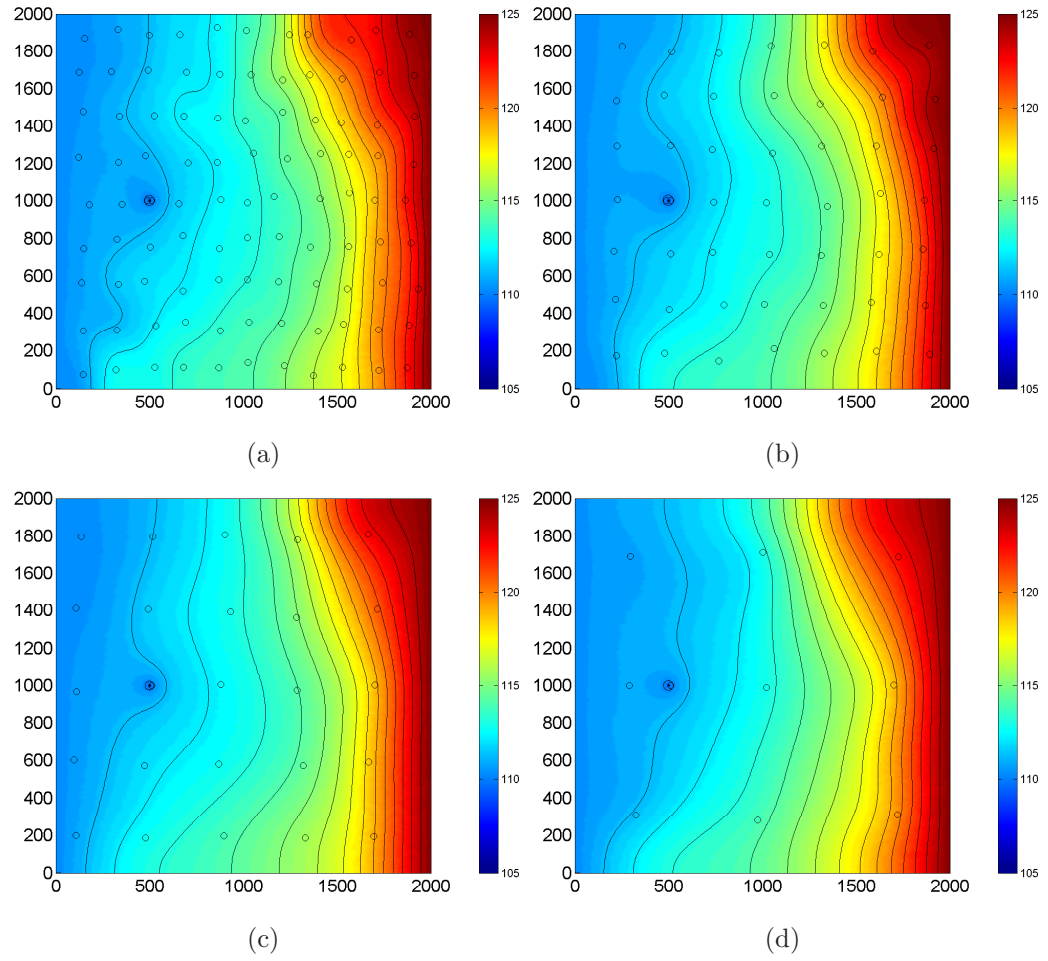


Figure 3.14: Localisation des piézomètres et charges krigées à $t = 0.12d$ (m).

(a) 100 piézomètres, (b) 50 piézomètres, (c) 25 piézomètres et (d) 10 piézomètres.

Chapitre 4

Exemples numériques d'inversion et temps de calcul

L'objectif de ce chapitre est d'illustrer l'efficacité, la robustesse et la rapidité de la méthode d'inversion développée au chapitre 2. Dans un premier temps, quelques exemples d'inversion sont présentés et analysés pour la méthode de l'estimation successive des flux en régime permanent et transitoire. Une inversion réalisée en présence d'une recharge ainsi qu'une inversion tridimensionnelle sont présentées. Une comparaison avec la méthode des points maîtres termine cette partie. Dans la seconde partie de ce chapitre, une analyse détaillée du temps nécessaire à l'exécution d'une inversion pour chaque méthode est réalisée. Une discussion des résultats obtenus clôt ce chapitre.

Le choix et l'influence des paramètres de contrôle de l'algorithme (fonction d'amortissement, β^0 , α ,...) seront abordés au chapitre 5. Il apparaissait plus naturel de présenter d'abord quelques exemples déterministes d'inversion avant d'évaluer la performance des différents paramètres dans un contexte stochastique. Les inversions déterministes ont été réalisées avec un schéma d'amortissement exponentiel ($\beta^0 = 0.025$, $\alpha = 15$ itérations), un facteur de correction central et un schéma temporel de $\lambda_k = 0.2$ pour k compris entre 1 et 5. De plus, elles ont été effectuées avec $\hat{h} = h^R$ et avec un coefficient d'emmagasinement uniforme de 1×10^{-4} . L'effet des erreurs d'estimation sur les charges sera abordé en détail au chapitre 6.

4.1 Exemples numériques d'inversion

4.1.1 Estimation successive des flux en régime permanent

À titre de premier exemple, le champ 96 est utilisé comme solution initiale. Ce champ correspond au percentile 50 en terme de $MAE(Y^0, Y^R)$ et constitue un germe de qualité médiane qui est relativement différent du modèle synthétique de T (figure 4.1(a)). La figure 4.2(a) montre l'allure générale de ce champ initial et la figure 4.2(b) expose le champ de charges obtenu lorsque le problème direct est résolu avec le germe 96. On constate d'abord que le germe de transmissivités engendre un champ de charges très différent du champ de référence. En amont, les rabattements sont trop faibles alors que dans le secteur immédiat du puits, des rabattements importants produisent des gradients hydrauliques trop élevés.

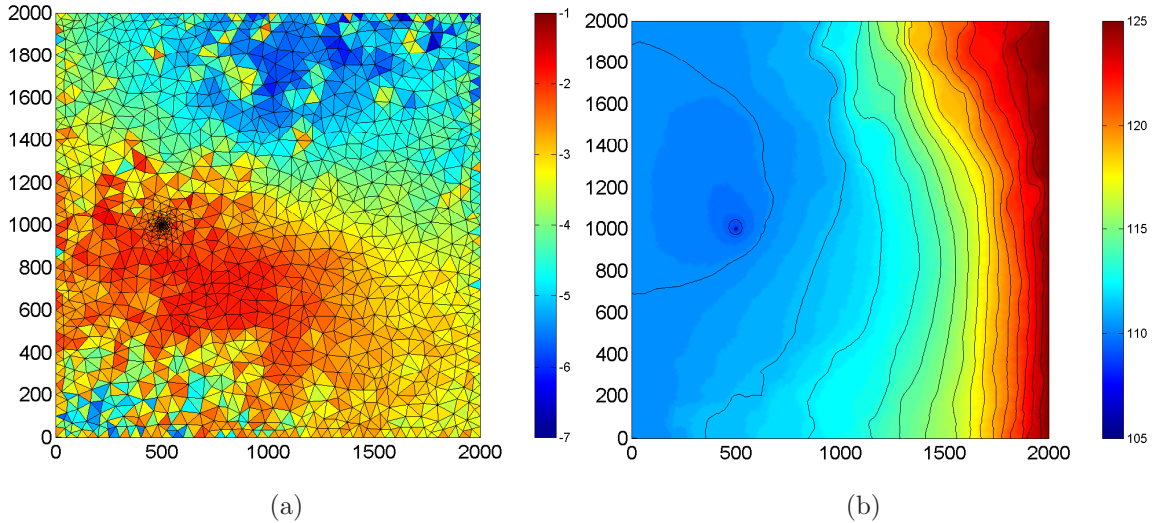


Figure 4.1: Modèle de référence. (a) Champ de $\log_{10}T$ et (b) charges (m).

Après inversion (figure 4.2(c)), la structure générale de l'aquifère est reproduite. Les limites du cordon perméable sont mieux définies, les transmissivités plus continues et les hétérogénéités locales du modèle synthétique identifiées. L'erreur de reconstruction des transmissivités ($MAE(Y^{30}, Y^R)$) a diminué d'un facteur de trois lors de l'inversion et vaut, à la dernière itération, 0.3012. Le champ de charges obtenu avec T^{30} est quant à lui presque identique au champ de référence (figure 4.2(d) versus

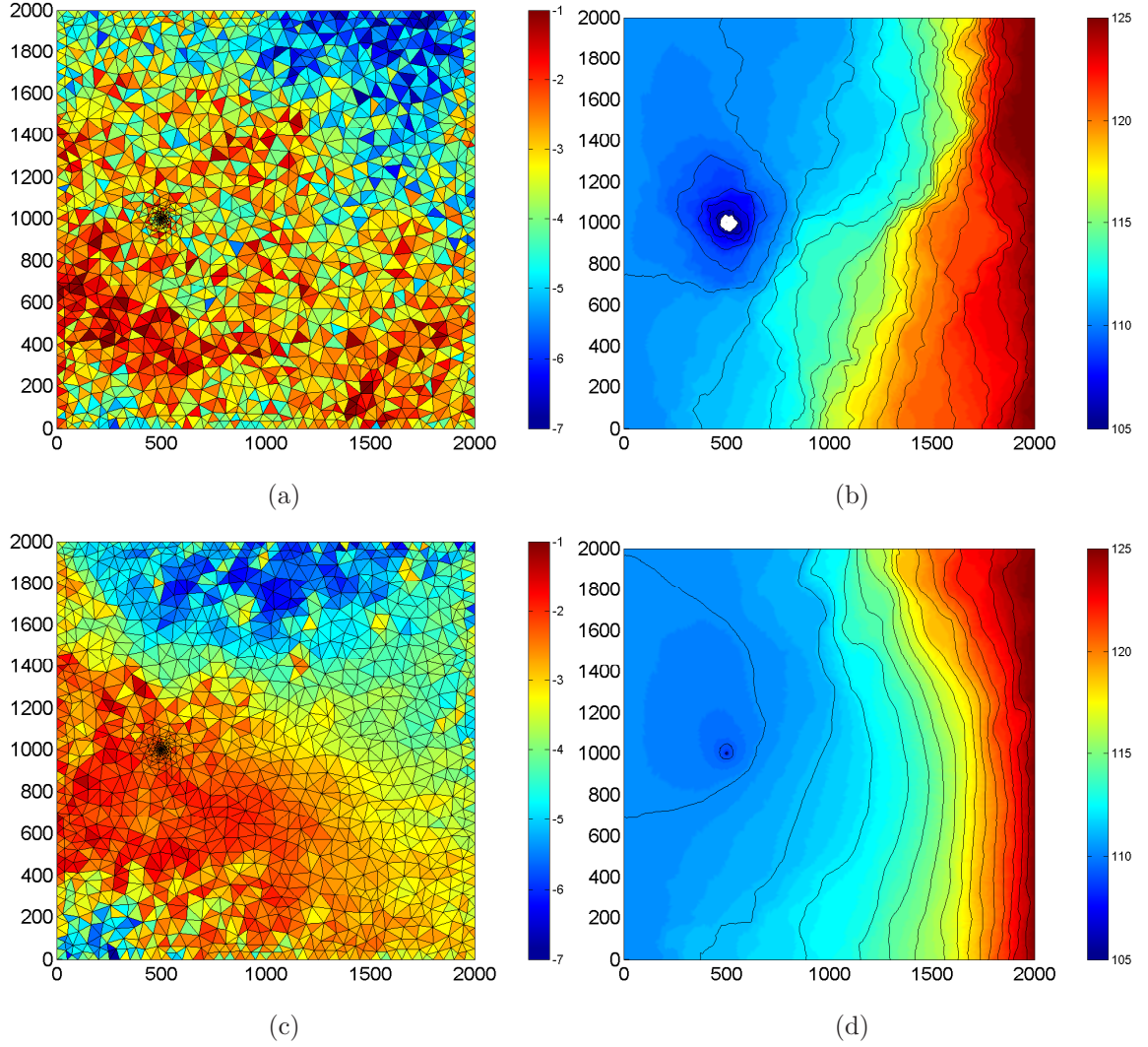


Figure 4.2: Exemple 1 réalisé par la méthode de l'estimation successive des flux en régime permanent avec le germe 96. (a) Champ de $\log_{10}T$ initial et (b) charges initiales (m), (c) champ de $\log_{10}T$ calibré et (d) charges ajustées (m).

4.1(b)) et les brisures des équipotentiels sont également bien reproduites. Finalement, l'erreur de calibration entre le champ de référence et le champ optimisé est réduite de 1.66m à 1.83cm.

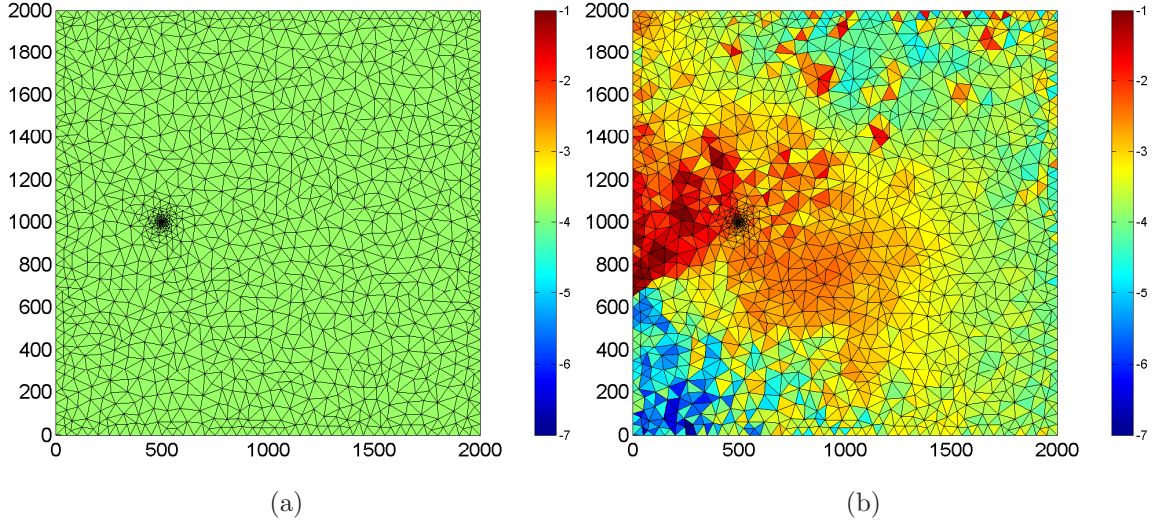


Figure 4.3: Exemple 2 réalisé par la méthode de l'estimation successive des flux en régime permanent. (a) Champ de $\log_{10}T$ initial et (b) champ de $\log_{10}T$ calibré.

Les exemples 2, 3 et 4 sont présentés aux figures 4.3 à 4.5. Les solutions initiales de ces trois exemples ont été choisies afin d'illustrer la capacité de la méthode à altérer adéquatement des champs initiaux assez différents du modèle de référence. Seules les solutions initiales de transmissivité et les champs obtenus après inversion sont présentés. Les erreurs initiales et finales de reconstruction, de reproduction des charges et les corrélations sont résumées au tableau 4.1.

Pour l'exemple 2, un champ homogène de transmissivités à $10^{-4}m^2/s$ a été soumis à l'algorithme. En seulement 30 résolutions du problème direct, l'algorithme est en mesure d'altérer profondément le champ homogène et de produire une image qui calque bien l'allure générale du modèle de référence. Les différentes erreurs sont fortement diminuées, le $MAE(Y^{30}, Y^R)$ passe de 0.9679 à 0.7884 pour un ajustement final des charges de 5.5cm. Une zone de transmissivités élevées à l'ouest du puits contraste cependant avec l'allure générale du champ de référence. Ces valeurs sont expliquées par le fait qu'à la première itération, la transmissivité est bien en deçà de la transmissivité réelle de l'aquifère. Ainsi, les charges hydrauliques calculées dans le secteur du puits à la première itération sont beaucoup trop faibles engendrant ainsi

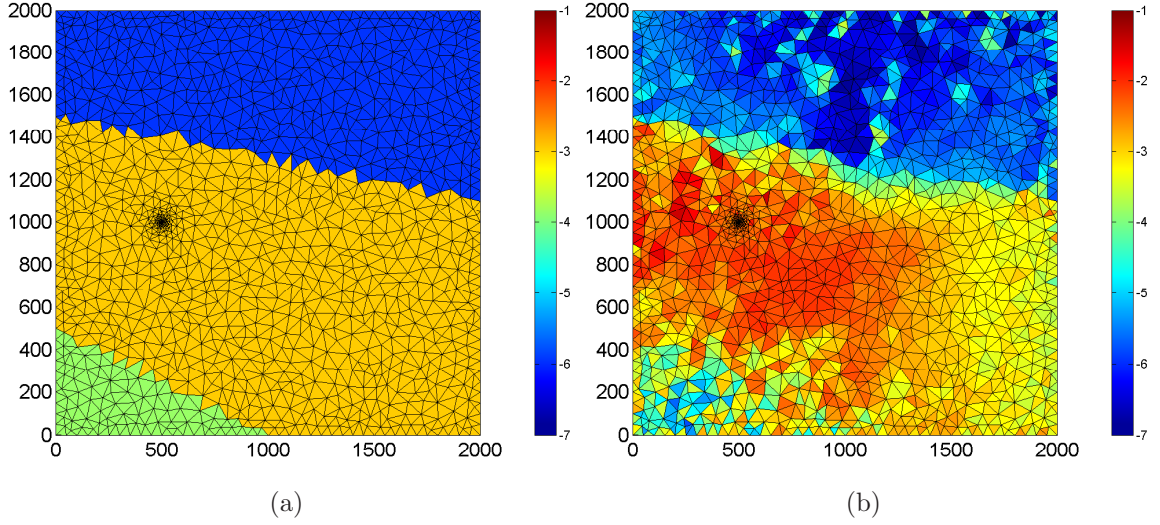


Figure 4.4: Exemple 3 réalisé par la méthode de l'estimation successive des flux en régime permanent. (a) Champ de $\log_{10}T$ initial et (b) champ de $\log_{10}T$ calibré.

des gradients hydrauliques entre le puits et la frontière Γ_1 trop élevés. Il s'en suit des facteurs de correction qui vont surcorriger les transmissivités dans ce secteur par comparaison au reste du modèle. La proximité d'une frontière de Dirichlet (Γ_1) contribue également à la dégradation de l'inversion dans ce secteur. En effet, la frontière de Dirichlet n'ayant pas de flux imposé, le flux la traversant sera modifié de façon à accommoder les transmissivités proposées par l'algorithme.

Dans l'exemple 3, un parallèle avec la populaire méthode de la zonation pure est fait. La solution initialement proposée à l'algorithme d'inversion est un champ où des frontières franches délimitent trois unités hydrostratigraphiques distinctes. Initialement, même si ces zones miment les principales structures du champ de référence, celui-ci ne permet pas de reproduire adéquatement les charges ($MAE(h^0, h^R) = 2.1084m$). Malgré cela, l'algorithme est rapidement en mesure de modifier cette solution et de fournir une image calant le champ de charges. On remarque que les limites initiales du germe sont conservées dans l'image finale. L'algorithme préserve la texture supposée du germe mais en l'altérant pour caler les charges.

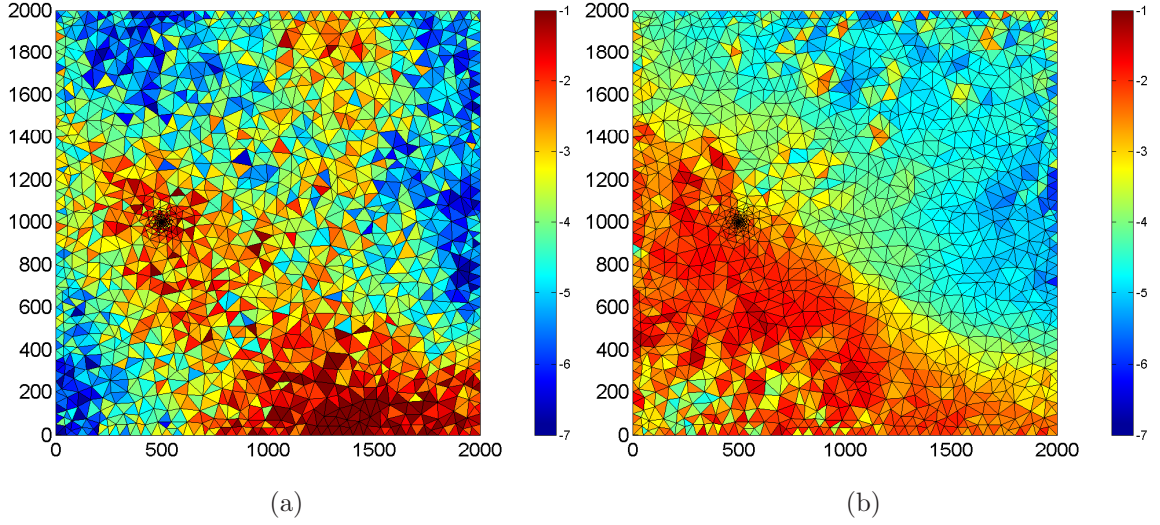


Figure 4.5: Exemple 4 réalisé par la méthode de l'estimation successive des flux en régime permanent. (a) Champ de $\log_{10}T$ initial et (b) champ de $\log_{10}T$ calibré.

Dans l'exemple 4, une simulation géostatistique de transmissivités est fournie à l'algorithme. Dans ce champ, une zone de forte transmissivité est située au sud-est du domaine et est séparée d'une seconde zone transmissive localisée près du puits. Initialement ces deux zones sont discontinues, mais après inversion la continuité entre les deux zones est rétablie et le cordon granulaire partiellement reconstruit (figure 4.5(b)). La reconstruction n'est cependant pas parfaite et l'orientation du cordon est légèrement différente de celle du modèle de référence. On retient également que l'empreinte de l'image initiale est, bien qu'altérée, encore présente dans l'image optimisée. Par ailleurs, bien que les erreurs de calibration des charges soient comparables pour les quatre premiers exemples, les images finales de T contiennent des différences notables illustrant, si besoin est, que le problème inverse n'est pas un problème à solution unique.

Le dernier exemple d'inversion (5) en régime permanent illustre de façon non-équivoque l'influence des frontières de type Neumann sur la résolution du problème inverse. Pour ce problème, un nouveau modèle synthétique est étudié. Celui-ci possède la même géométrie et la même discrétisation que le modèle synthétique présenté à la

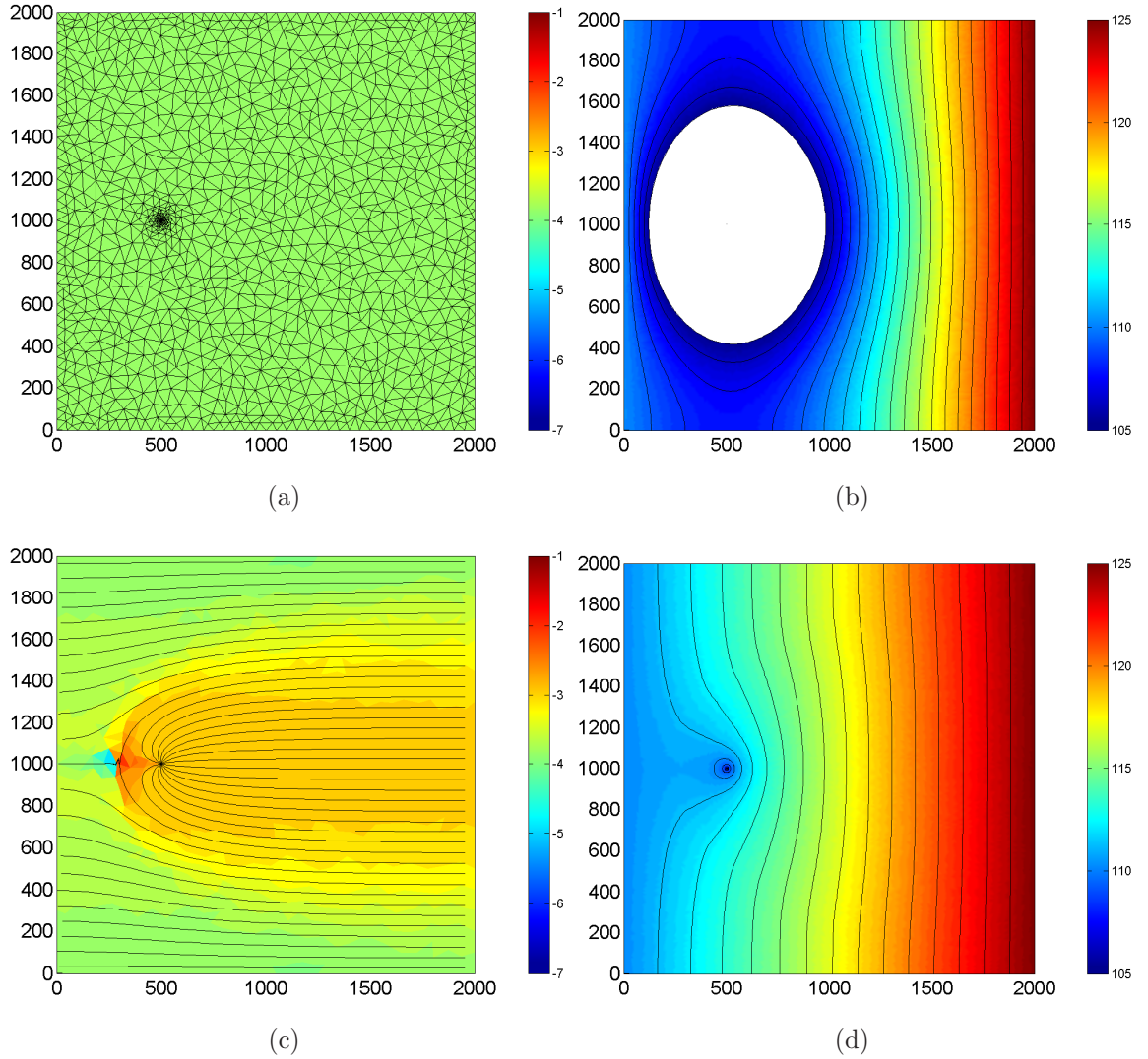


Figure 4.6: Exemple 5 réalisé par la méthode de l'estimation successive des flux en régime permanent avec un germe de T uniforme de $10^{-4}m^2/s$. (a) Champ de $\log_{10}T$ initial et (b) charges initiales (m), (c) champ de $\log_{10}T$ calibré et (d) charges ajustées (m).

section 3.1 mais la transmissivité y est homogène à $T = 10^{-3}m^2/s$ et le débit du puits de pompage y est réduit à $400l/min$ afin de restreindre la largeur de l'aire d'alimentation. Le germe soumis à l'algorithme est également homogène à $T = 10^{-4}m^2/s$ (voir la figure 4.6(a)). Les charges qui sont obtenues avec ce germe présentent un rabattement très prononcé dans le secteur du puits (figure 4.6(b)). Quelques lignes d'écoulement

ont été superposées au champ de transmissivité optimisé. On suppose qu'aucune mesure de T n'est disponible autant à l'intérieur de l'aire d'alimentation qu'à l'extérieur.

On observe tout d'abord que la transmissivité est beaucoup mieux reconstruite à l'intérieur de l'aire d'alimentation qu'à l'extérieur. Ce résultat illustre le fait qu'en présence d'un terme source, la résolution du problème de Cauchy permet de déterminer la transmissivité de façon unique si les charges et le flux hydrauliques sont connus le long d'une ligne de courant. Notre algorithme permet de retrouver approximativement et à l'erreur de discrétisation près ce résultat théorique.

Autre fait intéressant, on observe une brusque variation des transmissivités près du point de stagnation du puits. En aval du point de stagnation de h^R , les transmissivités sont plus faibles que la valeur de référence alors qu'entre le point de stagnation et le puits, les transmissivités sont légèrement plus élevées. Les divers points de stagnation sont schématisés à la figure 4.7. Ceci est causé par le fait qu'au point de stagnation

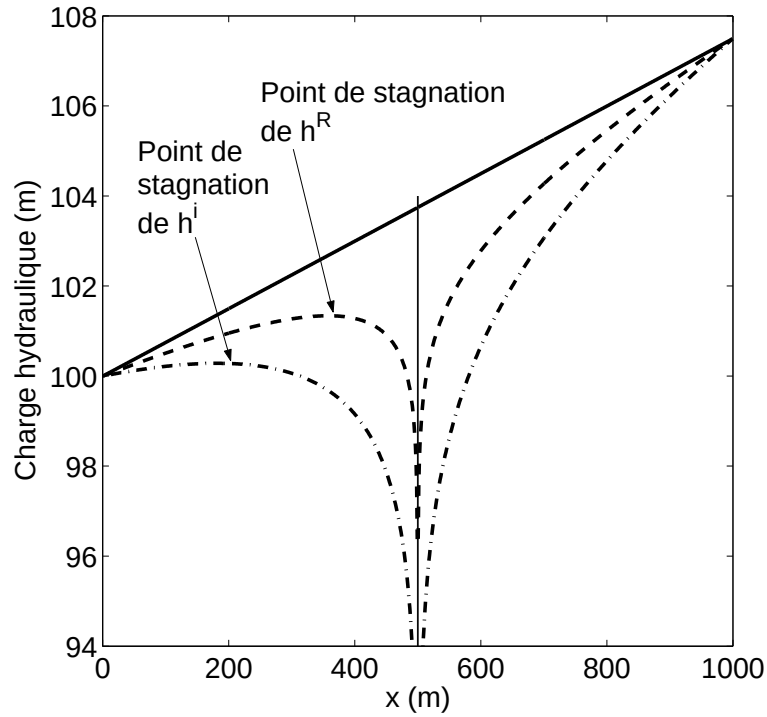


Figure 4.7: Schématisation des points de stagnation

de h^R , le facteur de correction est supérieur à 1 ($\delta^i = \frac{\nabla h^i + \beta^i}{\approx 0 + \beta^i} > 1$) ce qui engendre des corrections à la hausse dans cette région. Par contre, au fil des itérations, le point de stagnation de h^i se déplace vers h^R . Dans son sillage, les transmissivités sont corrigées à la baisse parce que le facteur de correction est inférieur à 1 ($\delta^i = \frac{\approx 0 + \beta^i}{\nabla h + \beta^i} < 1$). Lorsque la calibration est complétée, les deux points de stagnation coïncident et les zones de faibles et basses transmissivités se rencontrent, ce qui engendre la brusque variation de T observée. En l'absence d'amortissement, le contraste aurait été beaucoup plus marqué. Une indétermination de T au point de stagnation de h^R aurait alors été possible ce qui aurait engendré des problèmes numériques. La reconstruction de T bénéficie donc de l'utilisation d'un coefficient d'amortissement. Par ailleurs, un amortissement plus élevé aurait certainement diminué le contraste mais aurait augmenté le temps de calcul.

Le tableau 4.1 synthétise l'ensemble des résultats obtenus pour les exemples de cette section.

TAB. 4.1: Erreurs finales et initiales () des exemples des figures 4.2 à 4.6.

Exemple	Figure	$MAE(Y^{30}, Y^R)$	$MAE(h^{30}, h^R)$
		$\log_{10}(m^2/s)$	(m)
1	4.2	0.3012 (0.8721)	0.0183 (1.6551)
2	4.3	0.7884 (0.9679)	0.0554 (7.9008)
3	4.4	0.5316 (0.7939)	0.0295 (2.1084)
4	4.5	0.6202 (1.1096)	0.0548 (4.5573)
5	4.6	0.4816 (1.0000)	0.0467 (6.3281)

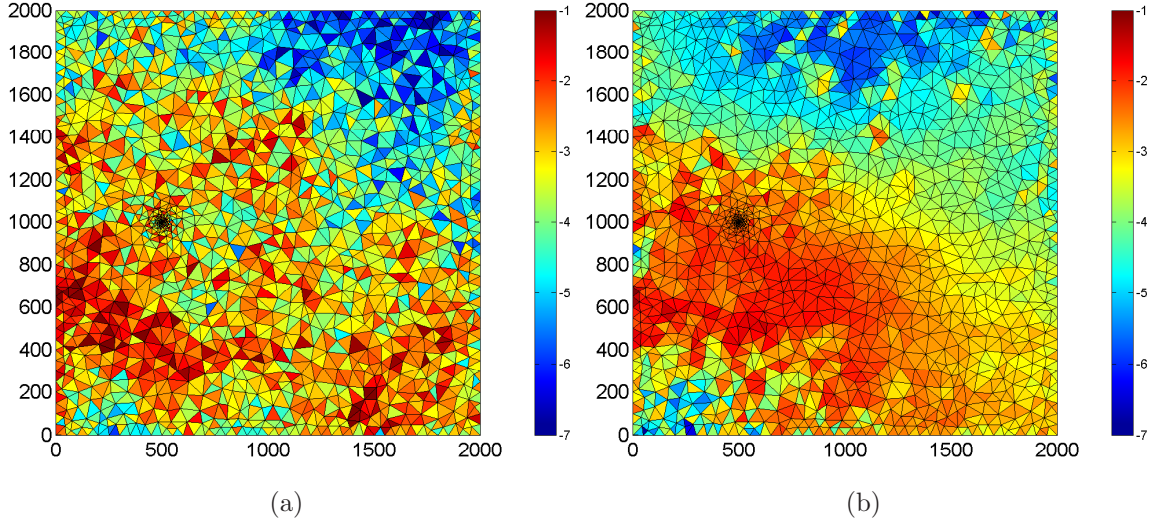


Figure 4.8: Exemple 6 réalisé par la méthode de l'estimation successive des flux en régime transitoire avec le germe 96. (a) champ de $\log_{10}T$ initial et (b) champ de $\log_{10}T$ calibré.

4.1.2 Estimation successive des flux en régime transitoire

Dans cette section, la méthode de l'estimation successive des flux en régime transitoire est utilisée pour altérer les germes de la section précédente. Le but premier de cette section est de mettre en relief les améliorations locales apportées par l'utilisation des charges transitoires. Une comparaison exhaustive des inversions permanente et transitoire est effectuée au chapitre 6.

Pour l'exemple 6 présenté à la figure 4.8, il y a peu d'avantages apparents découlant de l'utilisation des charges transitoires. Visuellement, les champs de T et de h sont presque identiques. Par contre, numériquement, l'erreur finale de reconstruction est légèrement plus faible en régime transitoire ($MAE(Y^{30}, Y^R) = 0.2748$) qu'en régime permanent ($MAE(Y^{30}, Y^R) = 0.3012$) et ce, même si la reproduction des charges est plus de deux fois moins bonne ($4.57cm$ à la fin de l'inversion transitoire).

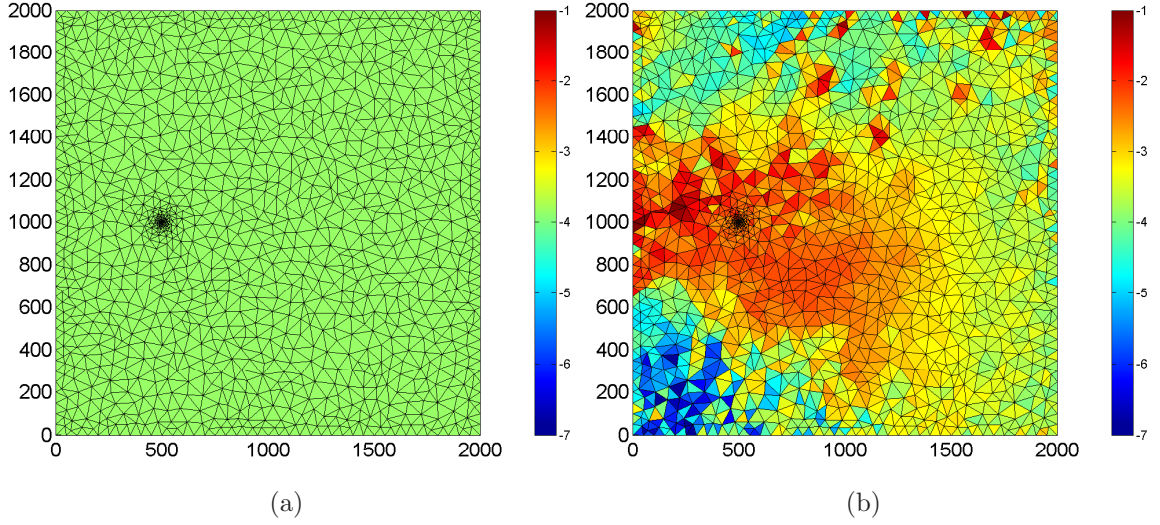


Figure 4.9: Exemple 7 réalisé par la méthode de l'estimation successive des flux en régime transitoire. (a) Champ de $\log_{10}T$ initial et (b) champ de $\log_{10}T$ calibré.

Pour l'inversion 7 présentée aux figures 4.9(a) et 4.9(b), l'amélioration induite par l'utilisation des variations temporelles des charges est plus claire. Visuellement, la zone de transmissivités élevées qui était observée à l'ouest du puits en régime permanent est beaucoup mieux reconstruite en régime transitoire. C'est l'utilisation des champs de charges $h^R(t = 0.01d)$ et $h^R(t = 0.12d)$ (figure 3.5) qui contribue à cette amélioration. En début d'optimisation, même si la transmissivité initiale est faible et engendre un rabattement important dans le secteur du puits, le cône de rabattement est peu étendu (surtout pour $t < 1d$) et la zone de gradients élevés relativement restreinte. Les facteurs de correction correspondants à $k = 1$ et $k = 2$ sont donc plus faibles que pour les trois autres pas de temps, ce qui permet d'obtenir un facteur de correction qui n'est pas excessif. Par ailleurs, l'évolution du cône de rabattement et le déplacement vers l'ouest du point de stagnation contribuent eux aussi à l'amélioration de la reconstruction dans ce secteur. Finalement, en fin de processus, l'erreur de reconstruction est meilleure (0.7175 versus 0.7884 en régime permanent) et ce, même si l'ajustement aux charges est trois fois moins bon.

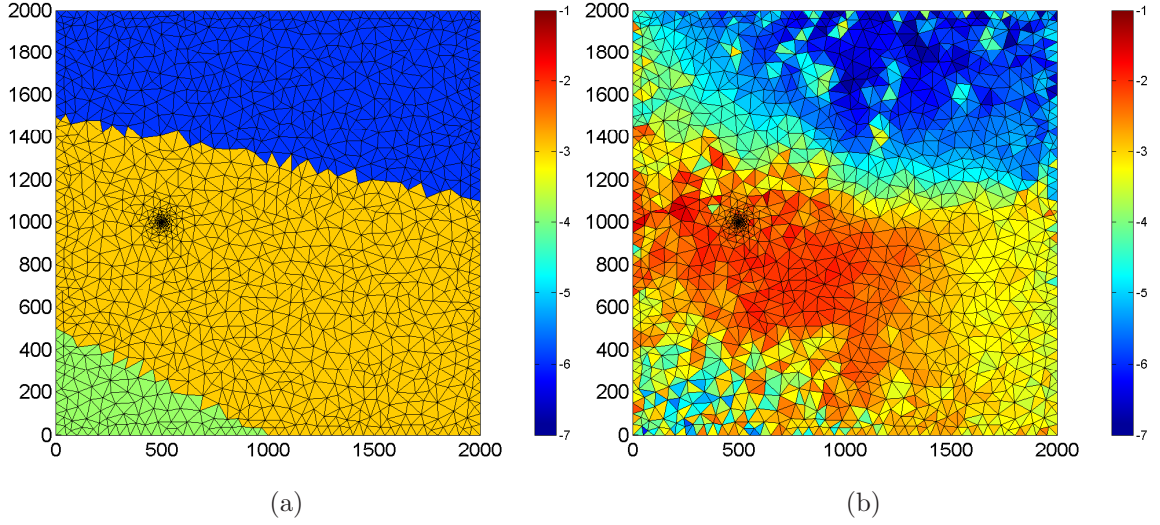


Figure 4.10: Exemple 8 réalisé par la méthode de l'estimation successive des flux en régime transitoire. (a) Champ de $\log_{10}T$ initial et (b) champ de $\log_{10}T$ calibré.

Pour l'exemple 8 (figures 4.10(a) et 4.10(b)), la réalisation d'une inversion en régime transitoire bonifie substantiellement la qualité de la reconstruction. Ainsi, l'erreur de reconstruction passe de 0.5316 en régime permanent à 0.4092 en régime transitoire pour une erreur de calibration de 5.77cm. Graphiquement, les limites initiales des zones, qui étaient toujours visibles après l'inversion permanente, sont plus émoussées et plus semblables au champ de référence après l'inversion transitoire. Il apparaît que ces limites franches étaient incompatibles avec l'évolution temporelle du cône de rabattement et que l'algorithme les a modifiées afin d'obtenir un champ de gradient comparable à ∇h^R .

L'inversion présentée aux figures 4.11(a) et 4.11(b) montre que l'utilisation des charges transitoires a amélioré légèrement la reconstruction de T par rapport aux résultats obtenus en régime permanent (0.6097 comparé à 0.6202) alors que la calibration des charges est presque deux fois moins bonne (0.1014m comparativement à 0.0548m). De plus, l'utilisation des charges transitoires n'a pas beaucoup rectifié l'orientation du cordon granulaire et l'image finale est assez semblable au résultat de l'inversion effectuée en régime permanent.

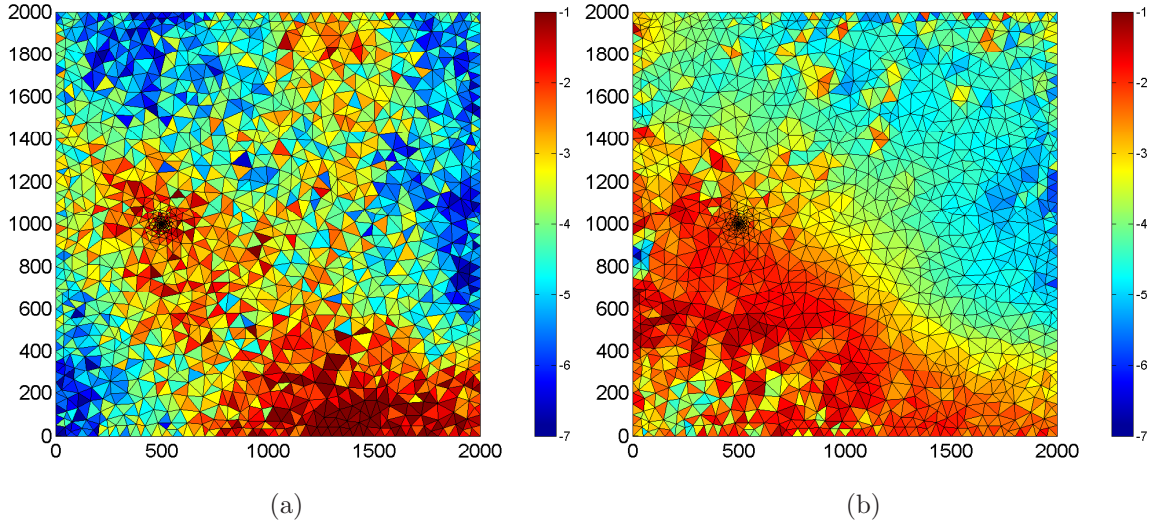


Figure 4.11: Exemple 9 réalisé par la méthode de l'estimation successive des flux en régime transitoire. (a) Champ de $\log_{10}T$ initial et (b) champ de $\log_{10}T$ calibré.

TAB. 4.2: Erreurs finales et initiales () des exemples des figures 4.8(b) à 4.12.

Exemple	Figure	$MAE(Y^{30}, Y^R)$	$MAE(h^{30}, h^R)$
		$\log_{10}(m^2/s)$	(m)
6	4.8	0.2748 (0.8721)	0.0457 (0.9412)
7	4.9	0.7175 (0.9679)	0.1650 (3.1113)
8	4.10	0.4092 (0.7939)	0.0577 (1.0315)
9	4.11	0.6097 (1.1096)	0.1014 (2.4058)
10	4.12	0.5210 (1.0000)	0.0954 (2.2692)

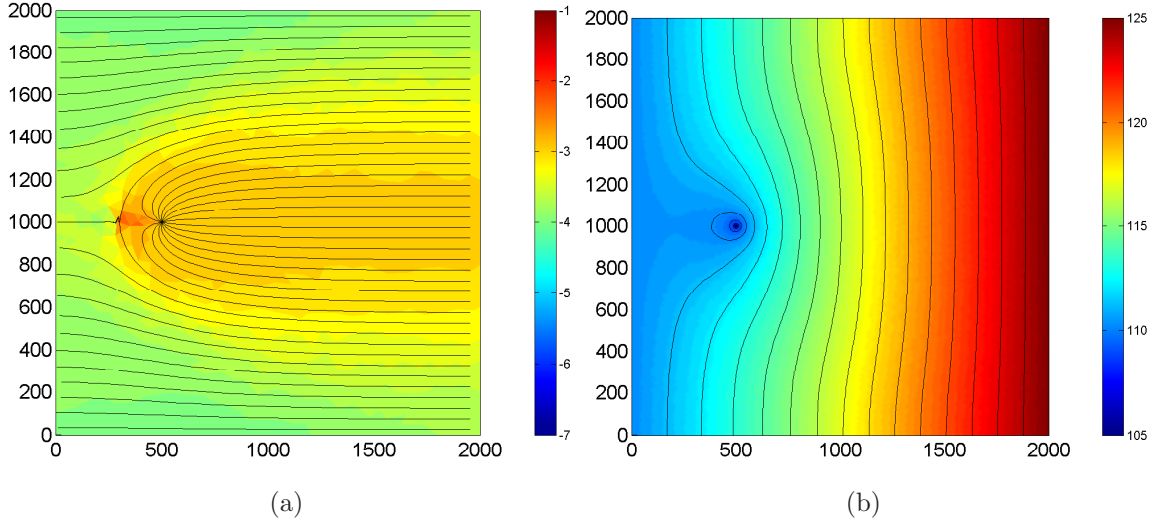


Figure 4.12: Exemple 10 réalisé par la méthode de l'estimation successive des flux en régime transitoire avec un germe de T uniforme de $10^{-4} m^2/s$. (a) champ de $\log_{10} T$ calibré et (b) charges ajustées (m).

La reconstruction du champ de T pour l'inversion présentée à la figure 4.12 est légèrement moins bonne en régime transitoire qu'en régime permanent. Mais le fort contraste qui était observé à l'ouest du puits en régime permanent est atténué après l'inversion transitoire. Il semble que l'utilisation de champs de charges hydrauliques ayant des points de stagnation à différents endroits permette de retoucher plus finement la transmissivité près des points de stagnation de $\hat{h}$ et d'améliorer ainsi localement la reconstruction.

4.1.3 Estimation successive des flux en régime permanent et en présence de recharge

On présente dans cette section un exemple d'inversion faite en présence d'un terme source non-nul. Le modèle de transmissivités de référence et les conditions frontières sont identiques à ce qui a été utilisé précédemment. Par contre, une recharge, comprise entre 50 et 550 (mm/an) et variant spatialement, est ajoutée pour la résolution du problème direct. La recharge est considérée parfaitement connue lors de l'inversion.

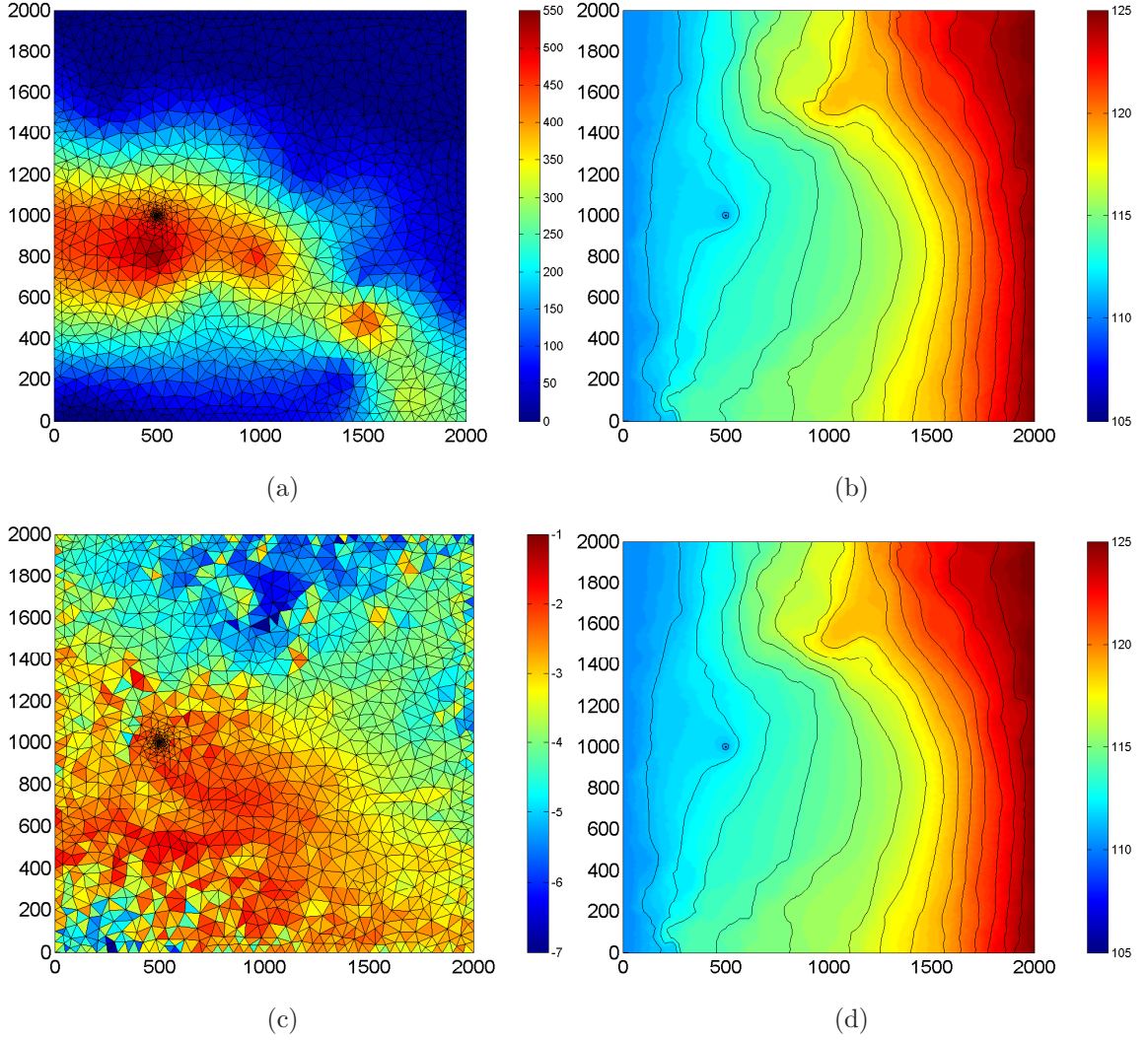


Figure 4.13: Exemple d'inversion en présence d'une recharge par la méthode de l'estimation successive des flux avec le germe 96. (a) champ de recharges (mm/an), (b) charges de référence (m), (c) champ de $\log_{10}T$ calibré et (d) charges ajustées (m).

La solution initiale de T fournie à l'algorithme est le germe 96 utilisé pour l'exemple 1 (voir la figure 4.2(a)). Les champs de recharges et de charges utilisés pour l'inversion sont présentés aux figures 4.13(a) et 4.13(b). Après inversion, les principales structures de l'aquifère sont identifiées, l'erreur de reconstruction de T ($MAE(Y^{30}, Y^R)$) s'établit à $0.2887 \log_{10}(m^2/s)$ et la corrélation finale est de 0.9509. L'erreur d'ajustement des charges, initialement de 1.855m passe à 2.07cm après inversion.

L'erreur de reconstruction obtenue en présence d'une recharge est plus faible que ce qui a été obtenu à l'exemple 1 (0.3012). Il semble que la présence d'une recharge améliore légèrement le résultat de l'inversion. Ceci peut être causé par le terme source lui-même puisque ce dernier contraint davantage le flux circulant dans un élément. Le fait que la recharge limite les rabattements dans le secteur du puits pourrait également expliquer ces meilleurs résultats.

4.1.4 Inversion 3D par la méthode de l'estimation successive des flux

Afin d'évaluer l'applicabilité de la méthode de l'estimation successive des flux en régime transitoire pour une situation tridimensionnelle, un exemple d'inversion 3D est présenté dans cette section. La géométrie du modèle numérique utilisé est illustrée à la figure 4.14. Celui-ci mesure $2000m \times 2000m \times 400m$. La base, le toit et les frontières nord et sud sont supposées imperméables. Les frontières ouest et est sont modélisées par une frontière de type Dirichlet valant 110 et 125 mètres respectivement. L'aquifère est traversé par un puits de 10m de rayon situé en (500, 1000). Celui-ci est crépiné sur 100m à partir de la base de l'aquifère et pompe à un débit constant de $62m^3/s$.

Le modèle synthétique de conductivités hydrauliques utilisé est similaire à celui utilisé pour les exemples 2D. Horizontalement, une bande plus perméable est coincée entre deux zones plus imperméables situées au nord-est et au sud-ouest alors que verticalement la conductivité diminue vers la surface. Deux coupes et un niveau du modèle synthétique de K sont présentés à la figure 4.15.

Le domaine a été discrétisé en 30474 éléments tétraédriques d'ordre 1. L'équation 1.1 a été solutionnée en régime transitoire avec un terme source $Q = 0$ et un emmagasinement spécifique $S_s = 1 \times 10^{-4} m^{-1}$ pour $0 \leq t \leq 2 \times 10^4$ s. Le champ de charges hydrauliques obtenu en absence de pompage est utilisé comme solution initiale à $t = 0$. Lors de la résolution du problème direct, une solution est extraite à 20 pas de temps différents.

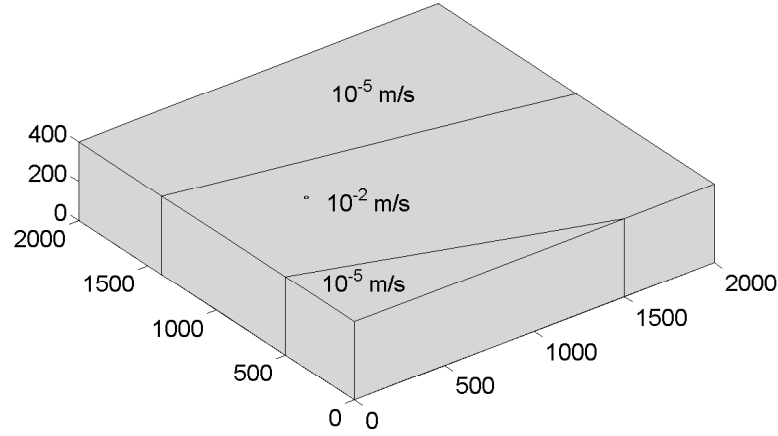


Figure 4.14: Géométrie du modèle numérique et zonation utilisée pour la solution initiale.

L'inversion est réalisée en régime transitoire pendant 80 itérations avec un schéma d'amortissement exponentiel avec $\beta^0 = 1$, une portée α de 30 itérations et un schéma temporel uniforme avec des valeurs $\lambda = 1/20$ pour $1 \leq k \leq 20$. Le champ de charges $\hat{h}$ utilisé pour l'inversion est le champ de charges de référence du modèle synthétique. Lors de l'inversion, des contraintes absolues de 1×10^{-1} et $1 \times 10^{-7} \text{ m/s}$ et des contraintes relatives de $\Delta Y = 3 (\log_{10}(\text{m/s}))$ ont été utilisées. La solution initiale de K soumise à l'algorithme est illustrée à la figure 4.14. Dans celle-ci, trois zones parfaitement homogènes miment les principales structures horizontales du champ de référence.

Le champ de conductivité hydraulique optimisé est comparé au champ de référence à la figure 4.15. Par comparaison à la solution initiale de K qui était homogène et assez différente du champ de référence, le champ de K obtenu après l'inversion est plus hétérogène et présente une forte variation verticale qui était absente du germe. Les coupes verticales (voir les figure 4.15(a), 4.15(b) et 4.15(c), 4.15(d)) montrent que la zone très perméable située à la base de l'aquifère est également bien identifiée. Cependant, les coupes des figures 4.15(a) et 4.15(b) montrent que près de (1500,1000,300), la transmissivité initiale a été peu modifiée par l'inversion. Horizontalement, les transitions latérales qui étaient nettes dans la solution initiale sont toujours assez présentes après calibration (voir les figures 4.15(e) et 4.15(f)).

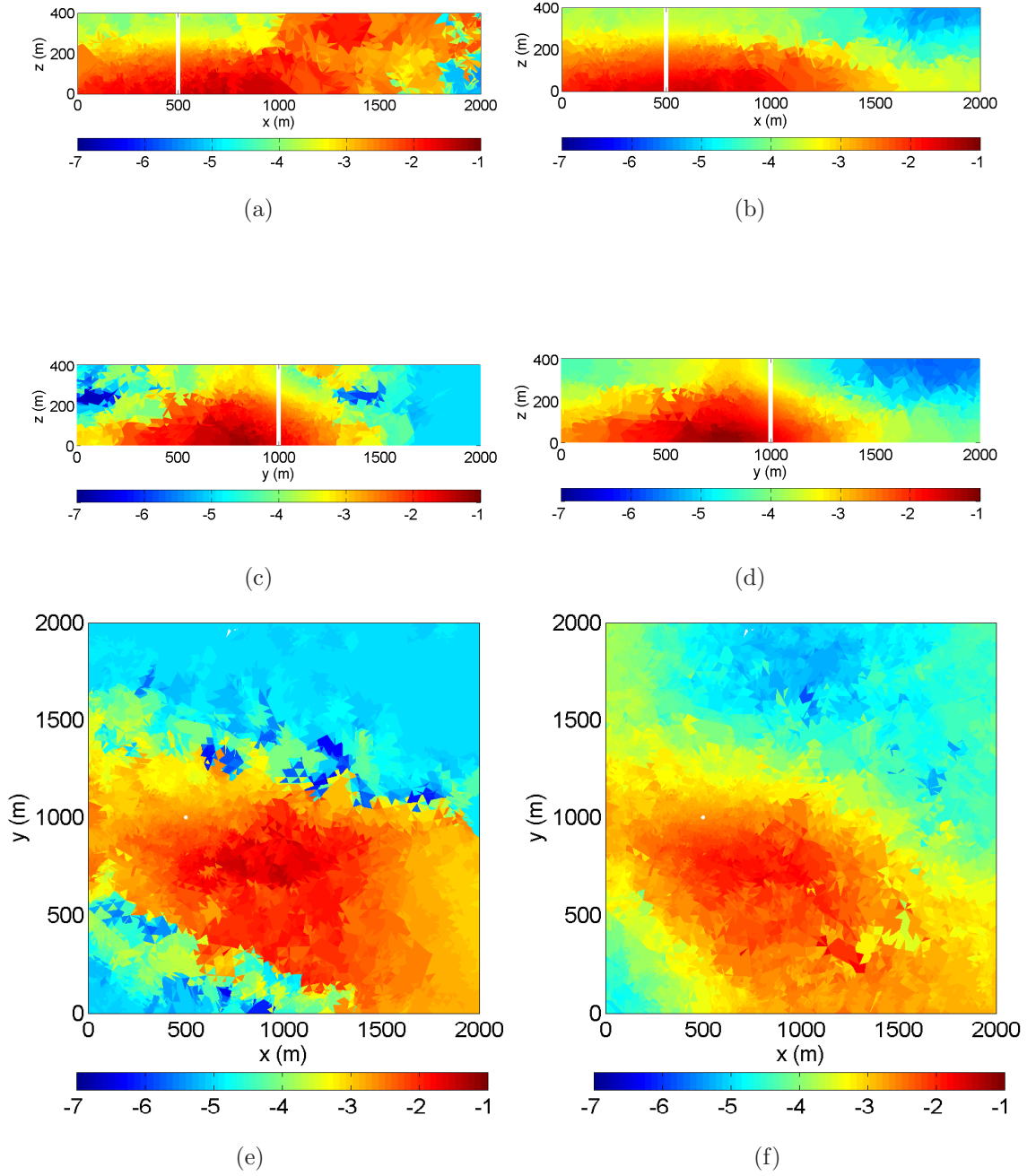


Figure 4.15: Inversion tridimensionnelle en régime transitoire. Coupes du champ de conductivités hydrauliques ($\log_{10}(m/s)$) pour (a) champ calibré ($y=1000\text{m}$), (b) champ de référence ($y=1000\text{m}$), (c) champ calibré ($x=500\text{m}$), (d) champ de référence ($x=500\text{m}$), (e) champ calibré ($z=200\text{m}$), (f) champ de référence ($z=200\text{m}$).

Les statistiques ont bénéficié largement de l'inversion. Le $MAE(h^{80}, h^R)$ qui était initialement de 0.5075m passe à 3.89cm. Même en 3D, l'ensemble du champ piézométrique est bien reproduit. L'erreur de reconstruction de la conductivité hydraulique est également diminuée. Initialement de 0.9702, celle-ci diminue à 0.6277 grâce à l'inversion. Finalement, on note qu'à la dernière itération, seulement 2 contraintes absolues et 23 contraintes relatives au germe initial étaient actives ce qui indique que même en 3D, les conductivités générées par l'algorithme demeurent réalistes.

4.1.5 Méthode des points maîtres en régime permanent

La méthode des points maîtres, proposée par Sahuquillo *et al.* (1992) d'après les travaux de de Marsily *et al.* (1984), est l'une des méthodes d'inversion les plus utilisées. On propose maintenant de refaire les inversions des exemples 1 et 4 présentés à la section 4.1.1 par la méthode des points maîtres et de comparer les résultats à ceux obtenus par la méthode de l'estimation successive des flux en régime permanent.

On rappelle que la méthode proposée par Sahuquillo *et al.* (1992) consiste à modifier des valeurs fictives de T de façon à minimiser les moindres carrés des erreurs d'ajustement piézométriques. Les valeurs des points maîtres sont régionalisées sur l'ensemble des éléments du domaine par simulation géostatistique (Gomez-Hernandez *et al.*, 1997) ou par krigeage (Carrera *et al.*, 2005). Les valeurs de T sont déterminées par optimisation non-linéaire, ce qui nécessite l'évaluation du problème direct et le calcul du gradient de la fonction objectif par différences finies.

Un module d'inversion implémentant la méthode des points maîtres a été greffé à *HydroGeo-Inv*. Dans ce module, l'optimisation des transmissivités aux points pilotes a été faite à l'aide de la méthode de Levenberg-Marquardt (Levenberg, 1944; Marquardt, 1963) qui est utilisée dans la fonction *Lsqnnonlin.m* de Matlab[®]. Le gradient de la fonction objectif a été calculé par différences finies et non par une méthode adjointe. Cent points maîtres ont été régulièrement espacés sur le domaine et la régionalisation des valeurs ponctuelles a été faite par krigeage avec un modèle de covariance sphérique ayant une portée de 2500m, un plateau de $2.5 \log_{10}(m^2/s)^2$ et un effet de pépite de $0.5 \log_{10}(m^2/s)^2$. Puisque la position des points maîtres et des points à kriger ne change

pas, les poids de krigeage ont été calculés et réutilisés pour les krigeages subséquents. Ceci a permis un gain appréciable en temps de calcul. On note au passage que la régionalisation des valeurs ponctuelles de T a été faite par krigeage puisque l'utilisation de simulations géostatistiques donnait des résultats nettement moins bons.

Pour la comparaison, on a supposé que seulement 10 mesures piézométriques étaient disponibles et que le régime d'écoulement était permanent (scénario piézométrique 5 présenté à la section 3.4). Ainsi, 10 termes constituent la fonction objectif utilisée par la méthode des points maîtres et 10 mesures piézométriques sont utilisées lors du krigeage du champ $\hat{h}$ utilisé par la méthode de l'estimation successive de flux.

Les inversions faites par la méthode des points maîtres ont nécessité 943 et 944 résolutions du problème direct par comparaison à seulement 31 appels du simulateur pour l'approche proposée dans ce travail. Les différentes erreurs d'ajustement sont synthétisées au tableau 4.3. Les deux premiers résultats correspondent à la méthode des points maîtres et les deux derniers à la méthode proposée. Pour l'exemple 1, la reconstruction du champ de transmissivités est meilleure pour l'inversion réalisée par la méthode de l'estimation successive des flux alors qu'on observe l'inverse pour l'exemple 4. Les charges mesurées (h_{obs}) sont mieux reproduites par la méthode des points maîtres. Ceci n'est pas surprenant puisque la méthode est construite de façon à minimiser l'erreur d'ajustement des mesures alors que la méthode de l'estimation

TAB. 4.3: Comparaison des erreurs obtenues par la méthode des points maîtres et de l'estimation successive des flux.

Exemple	Figure	$MAE(Y^i, Y^R)$ $\log_{10}(m^2/s)$	$MAE(h^i, \hat{h})$ (m)	$MAE(h^i, h^R)$ (m)	$MAE(h_{Obs}^i, h_{Obs}^R)$ (m)
1	4.16(a)	0.6047	-	0.6504	0.0186
4	4.16(b)	0.6321	-	0.6476	0.0311
1	4.16(c)	0.4983	0.0394	0.3031	0.0446
4	4.16(d)	0.7460	0.0819	0.2820	0.0897

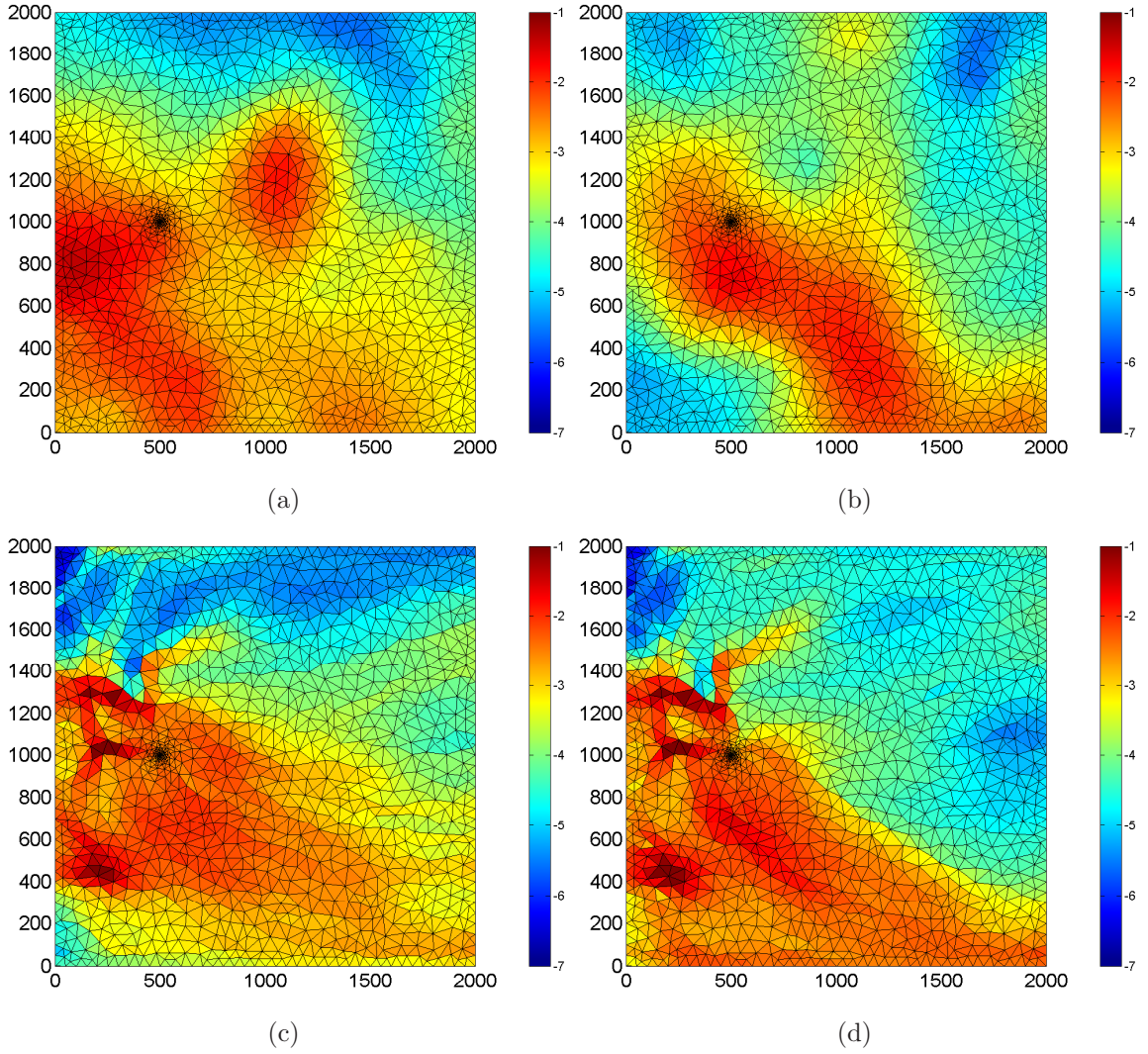


Figure 4.16: Comparaison de la méthode des points maîtres et de l'estimation successive des flux pour les exemples 1 et 4. (a) et (b) Champ de $\log_{10} T$ calibré par la méthode des points maîtres (exemple 1 et 4 respectivement); (c) et (d) Champ de $\log_{10} T$ calibré par la méthode de l'estimation successive des flux (exemple 1 et 4).

successive des flux minimise l'erreur avec la totalité du champ de charges estimé ($\hat{h}$). Néanmoins, l'erreur d'ajustement du véritable champ de charges ($MAE(h^i, h^R)$) est deux fois moindre pour les inversions faites avec la méthode de l'estimation successive des flux.

Les images obtenues après l'inversion des germes des exemples 1 et 4 (voir les figures 4.2(a) et 4.5(a)) sont présentées à la figure 4.16. On remarque que les images obtenues par la méthode des points maîtres sont visuellement très lisses puisqu'elles sont obtenues par krigeage alors que celles obtenues par la méthode de l'estimation successive des flux présentent quelques zones de plus fortes transmissivités (cet aspect sera abordé en détail au chapitre 6). On note que les perturbations faites aux points maîtres ont engendré des hétérogénéités circulaires sur la figure 4.16(a).

4.2 Temps de calcul

Le temps de calcul nécessaire à un algorithme pour réaliser une inversion est un aspect pratique important. Dans cette section, le temps nécessaire pour compléter l'inversion des exemples 1 et 6 par la méthode de l'estimation successive des flux est analysé en détail pour des inversions en régimes permanent et transitoire. La même analyse est faite avec méthode des points maîtres pour l'exemple présenté à la section 4.1.5. Tout les calculs analysés ont été effectués sur un ordinateur portable Pentium 4 cadencé à 2,66 MHz, possédant 512 Mb de mémoire vive et opérant sous Windows XP. La version 6.5.1 de Matlab[®] ainsi que la version 3.0a de Femlab[®] ont été utilisées pour ces analyses.

4.2.1 Estimation successive des flux en régime permanent

La répartition du temps de calcul présentée au tableau 4.4 constitue un exemple type du temps de calcul utilisé par *HydroGeo-Inv* lors d'une inversion en régime permanent par la méthode de l'estimation successive des flux. On observe qu'entre le chargement des fichiers de paramètres et la sauvegarde des résultats, seulement une trentaine de secondes se sont écoulées. Bien que la majeure partie du temps soit employée pour compléter l'inversion, un laps de temps important est utilisé pour la construction d'une structure d'affectation, le calcul des différentes erreurs d'inversion et pour les autres opérations d'initialisation ou de sauvegarde. À l'exception du calcul des erreurs, toutes les autres opérations représentent un coût fixe qui est amorti très rapidement par l'augmentation du nombre d'inversions.

TAB. 4.4: Répartition du temps de calcul dans *HydroGeo_Inv* lors d’une inversion en régime permanent par la méthode de l’estimation successive des flux.

Opération	Temps	Proportion
Chargement des fichiers	1.31s	4.2%
Initialisation et calculs préliminaires	1.33s	4.4%
Construction d’une structure d’affectation des paramètres	5.80s	19.3%
Résolution du modèle synthétique	0.51s	1.7%
Construction d’une structure d’interpolation	0.29s	1.0%
Inversion	16.79s	55.7%
- <i>Correction de T</i>	<i>3.47s</i>	<i>20.7%</i>
- <i>Résolution du problème direct</i>	<i>13.32s</i>	<i>79.3%</i>
Calcul des erreurs	3.66s	12.1%
Sauvegarde des résultats	0.46s	1.5%
Temps total de calcul	30.15s	100%

L’inversion en elle-même est complétée en seulement 16.79 secondes. La correction des transmissivités, comprenant le calcul des gradients hydrauliques au centre des éléments finis ainsi que le calcul des valeurs de T corrigées, ne représente que 21% de ce temps (voir le tableau 4.4). La résolution du problème direct (0.43 seconde par résolution) constitue la grande part du temps consacré à l’inversion. Bien que 30 itérations aient été réalisées, une résolution supplémentaire du problème direct est effectuée afin de calculer les erreurs obtenues avec le champ de T proposé à la dernière itération. Par conséquent, 31 résolutions du problème direct sont réalisées.

4.2.2 Estimation successive des flux en régime transitoire

La répartition du temps total de calcul lors d’une inversion en régime transitoire par la méthode de l’estimation successive des flux est très différente de celle vue précédemment (voir le tableau 4.5). En effet, l’inversion est complétée en un peu plus de 4 minutes et la majeure partie du temps est utilisée pour l’achèvement de l’inversion. Les opérations d’initialisation et de post-traitement représentent, pour leur

TAB. 4.5: Répartition du temps de calcul dans *HydroGeo_Inv* lors d’une inversion en régime transitoire par la méthode de l’estimation successive des flux.

Opération	Temps	Proportion
Chargement des fichiers	1.32s	0.5%
Initialisation et calculs préliminaires	2.92s	1.2 %
Construction d’une structure d’affectation des paramètres	9.18s	3.7%
Résolution du modèle synthétique	7.53s	3.0%
Construction d’une structure d’interpolation	0.48s	0.2%
Inversion	216.72s	87.6%
- <i>Correction de T</i>	<i>19.36s</i>	<i>8.9%</i>
- <i>Résolution du problème direct</i>	<i>197.36s</i>	<i>91.1%</i>
Calcul des erreurs	8.48s	3.5%
Sauvegarde des résultats	0.80s	0.3%
Temps total de calcul	247.43 s	100%

part, un coût fixe négligeable. Le temps de calcul total plus long est dû au temps requis pour la résolution du problème d’éléments finis en régime transitoire. Bien que la solution soit calculée à seulement cinq pas de temps, elle est également calculée à l’interne à de nombreux pas de temps intermédiaires afin d’obtenir une convergence adéquate. La résolution du problème direct atteint donc 6.4 secondes par itération comparativement à 0.43s en régime permanent.

La correction des transmissivités représente une fraction assez faible du temps nécessaire à l’exécution de l’inversion. Puisque la correction de T ne nécessite pas d’opérations coûteuses numériquement, comme une inversion matricielle, la mise à jour des paramètres se fait rapidement. Qui plus est, la taille restreinte des matrices ∇h^R et ∇h^i ($n_{el} \times n_t$) limite l’utilisation de la mémoire tampon de l’ordinateur ce qui résulte en des temps de transfert nuls vers le disque dur et donc en un gain très appréciable en temps de calcul.

4.2.3 Inversion en régime permanent par la méthode des points maîtres

La répartition du temps de calcul pour l'inversion de la figure 4.16(a) faite par la méthode des points maîtres est illustrée au tableau 4.6. L'inversion est complétée en un peu moins de 17 minutes et le chargement, l'initialisation et la construction des structures d'affectation représentent un coût négligeable (4.76%) par rapport à celui de l'inversion (95.24%). Cette importante augmentation de temps de calcul nécessaire à l'inversion est surtout causée par les 943 appels fait au simulateur d'écoulement. Néanmoins, une proportion importante est également allouée pour le krigage des transmissivités et le calcul du gradient de la fonction objectif.

TAB. 4.6: Répartition du temps de calcul dans *HydroGeo-Inv* lors d'une inversion en régime permanent par la méthode des points maîtres.

Opération	Temps	Proportion
Chargement des fichiers	1.24s	0.13%
Initialisation et calculs préliminaires	1.36s	0.14 %
Construction d'une structure d'affectation des paramètres	6.02s	0.61%
Résolution du modèle synthétique	0.45s	0.05%
Construction d'une structure d'interpolation	0.32s	0.03%
Inversion	947.95s	95.24%
- <i>Calcul des poids de krigage</i>	<i>65.60s</i>	<i>6.92%</i>
- <i>Krigage de T</i>	<i>168.45s</i>	<i>17.77%</i>
- <i>Résolution du problème direct</i>	<i>679.58s</i>	<i>71.69%</i>
- <i>Gradient de la fonction objectif</i>	<i>34.32s</i>	<i>3.62%</i>
Calcul des erreurs	37.62s	3.77%
Sauvegarde des résultats	0.34s	0.03%
Temps total de calcul	935.30 s	100%

4.3 Discussion

Les éléments présentés dans ce chapitre ont permis de constater l'efficacité et la rapidité de la méthode de l'estimation successive des flux pour la reconstruction d'un champ de paramètres et la reproduction des charges hydrauliques. D'un point de vue purement numérique, la méthode est apte à calibrer des solutions initiales de T très différentes du champ de référence et fournit en fin de processus des images conservant l'empreinte de la solution initiale mais reproduisant également les caractéristiques importantes du champ de référence. Pour la plupart des exemples présentés, les erreurs de calibration sont en deçà de 10cm ce qui est faible compte tenu de la différence de charge totale observée dans le modèle de référence. Les erreurs de reconstruction bénéficient légèrement de l'utilisation des charges transitoires mais demeurent somme toute élevées.

La présence d'une zone où le gradient hydraulique est nul constitue généralement une difficulté pour les méthodes d'inversion basées sur la résolution du problème de Cauchy. L'utilisation d'un coefficient d'amortissement limite l'instabilité numérique provoquée par la présence de points de stagnation. Néanmoins, ceux-ci ont tendance à générer des contrastes dans le champ de paramètres. L'utilisation d'un coefficient d'amortissement plus élevé aurait sans doute diminué cet effet mais augmenté le nombre d'itérations nécessaires à la calibration. Dans ce cas, un coefficient d'amortissement variable dans l'espace et lié à la magnitude de $\nabla \hat{h}$ ou à la variance de krigeage de $\hat{h}$ aurait pu être utilisé. Ceci aurait probablement pour avantage de diminuer l'apparition de tels artéfacts tout en permettant une calibration rapide du problème numérique. Somme toute, ces problèmes sont relativement faibles et affectent moins de 1% de la superficie du domaine. L'utilisation des charges transitoires diminue l'apparition de ces artéfacts numériques.

L'influence des frontières de type Neumann sur la qualité de l'inversion est illustrée dans ce chapitre. En l'absence de mesures de T , la moins bonne identification de T à l'extérieur de l'aire d'alimentation n'est pas propre uniquement à la méthode de l'estimation successive des flux mais aux méthodes d'inversion en général.

On ne peut voir dans l'approche proposée une méthode d'estimation de la recharge car celle-ci doit être connue *a priori*. Néanmoins, l'exemple réalisé dans ce chapitre démontre que la présence d'une recharge n'engendre pas d'instabilité particulière lors de l'inversion et que le champ de T obtenu à la fin du processus est comparable à ce qui est obtenu en l'absence de recharge.

L'approche proposée dans ce travail à également permis de reproduire les principales structures 3D d'un aquifère synthétique. Cependant, l'inversion a été réalisée en supposant la distribution tridimensionnelle du véritable champ de charges hydrauliques parfaitement connue. L'estimation 3D des charges hydrauliques demeure pour le moment un problème majeur qui limite la réalisation d'inversions tridimensionnelles pour des cas réels.

La méthode de l'estimation successive des flux est particulièrement rapide par comparaison aux méthodes d'inversion faisant appel aux techniques usuelles d'optimisation non-linéaires. Même si ces dernières peuvent utiliser la méthode de l'état adjoint (Chavent *et al.*, 1975) pour accélérer le calcul du gradient de la fonction objectif, le calcul du pas optimal réalisé dans la direction du gradient est nécessaire. Par comparaison, le modèle de comparaison permet de calculer, en un seul appel du simulateur d'écoulement, l'ensemble des gradients hydrauliques du domaine. Il en découle que les transmissivités sont corrigées à très faible coût sans faire appel aux techniques usuelles d'optimisation non-linéaires.

Par ailleurs, *HydroGeo-Inv* est programmé en langage Matlab 6.5.1 qui n'est pas un langage de programmation réputé pour sa rapidité d'exécution. L'utilisation d'un langage de type C++ permettrait sans doute une diminution appréciable du temps de calcul alloué à la correction des transmissivités. Malgré tout, le temps de calcul dépensé pour la correction des paramètres ne représente qu'une fraction du temps nécessaire à la résolution du problème direct.

L'étendue des solutions obtenues après inversion confirme la non-unicité des solutions au problème inverse et justifie la réalisation de plus en plus croissante d'expériences de Monte Carlo. Dans ce contexte, la nécessité de disposer d'une méthode d'inversion à la fois robuste et rapide prend donc toute son importance. La rapidité de l'approche proposée en fait donc un outil particulièrement approprié à la réalisation d'inversions stochastiques.

Chapitre 5

Détermination des paramètres opérationnels

À la section 2.5, plusieurs possibilités ont été proposées pour la mise en oeuvre de la méthode de l'estimation successive des flux (fonctions d'amortissement, facteurs de correction, contraintes sur les paramètres, poids temporels). Ces aspects opérationnels influencent-ils la capacité de la méthode d'inversion à calibrer adéquatement et rapidement le modèle numérique ? La reconstruction du champ de paramètres en est-elle grandement affectée ? En pratique, quels paramètres devrait-on utiliser ? Ce chapitre aborde ces questions d'un point de vue empirique par le biais d'expériences numériques. L'objectif de ces expériences est de choisir les paramètres opérationnels permettant une calibration rapide des charges et une reconstruction adéquate du champ de transmissivités. L'obtention de paramètres généraux, valides dans la plupart des situations est préférée à des paramètres optimum numériquement mais spécifiques au modèle synthétique étudié.

Les expériences numériques sont réalisées de façon à évaluer dans l'ordre le facteur ayant le plus d'influence tel que noté lors d'analyses préliminaires. À la section 5.1, l'influence du schéma d'amortissement est évaluée. Pour ce faire, quinze schémas d'amortissement différents sont comparés entre eux et le schéma le plus performant est retenu pour les évaluations subséquentes. La section suivante aborde l'utilisation des contraintes relatives lors de l'inversion. Quatre situations sont évaluées et la

plus adéquate est retenue lors des analyses suivantes. Dans la section 5.3, les quatre méthodes de calcul du facteur de correction (δ) sont comparées entre elles et la plus performante est conservée pour la réalisation des inversions. Enfin, la quatrième partie de ce chapitre discute de l'influence des poids temporels sur la qualité des inversions en régime transitoire. Une discussion termine ce chapitre.

Puisque les combinaisons entre facteurs de correction, schémas d'amortissement, poids temporels et contraintes relative et absolue sont nombreuses, seules quelques situations jugées représentatives sont présentées. Par ailleurs, les tests numériques sont réalisés dans un ordre où le paramètre ayant le plus d'influence est déterminé en premier et ainsi de suite. On note que l'influence du nombre d'itérations ne sera pas évalué. Cette décision s'explique par le besoin d'obtenir un modèle numérique calibré en un très faible temps de calcul et par le fait que le schéma d'amortissement contrôle indirectement le nombre d'itérations nécessaire à l'ajustement des charges.

5.1 Détermination du schéma d'amortissement

L'objectif de cette section est d'évaluer l'effet du type de fonction d'amortissement et des paramètres α et β^o sur la qualité des inversions. Pour chaque aspect, 100 inversions sont réalisées à partir des germes de transmissivités présentés à la section 3.3. Le processus itératif est limité à 30 itérations par inversion. L'évolution des erreurs et les résultats numériques obtenus à la dernière itération sont comparés entre eux. Afin de restreindre les paramètres d'influence, les expérimentations numériques sont réalisées avec le champ de charges de référence en régime permanent (scénario piézométrique 1, $\hat{h} = h^R$). Les inversions sont exécutées à l'aide du facteur de correction δ_{geom} . On verra ultérieurement que le choix du facteur de correction a peu d'influence sur les résultats.

Dans un premier temps, dix schémas d'amortissement différents sont comparés. Ceux-ci sont illustrés graphiquement à la figure 5.1 et les paramètres correspondant à chaque schéma sont affichés au tableau 5.1. Les valeurs de α pour les schémas 5 à 7 ont été choisies afin d'obtenir des amortissements comparables aux schémas 8 à 10 à la trentième itération.

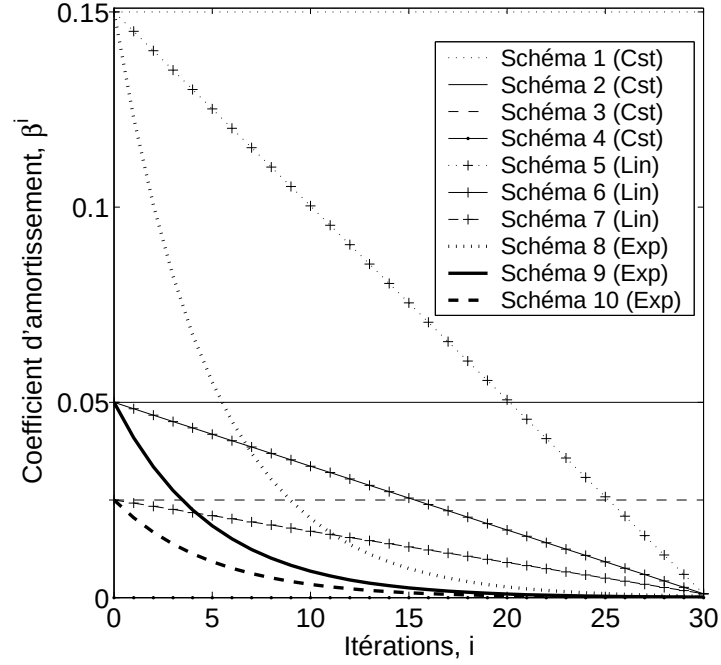


Figure 5.1: Évolution des schémas d'amortissement 1 à 10

Pour les dix premiers schémas d'amortissement, la figure 5.2(a) illustre l'évolution moyenne des erreurs de reconstruction de T . Dans tous les cas, les $EMAE(Y^i, Y^R)$ des schémas d'amortissement 1 à 10 affichent un comportement strictement décroissant tout au long du processus de calibration. L'erreur finale est toujours plus faible que l'erreur initiale ($EMAE(Y^0, Y^R) = 0.8902$).

Les erreurs moyennes à la trentième itération ainsi que les écarts-types associés sont présentés au tableau 5.1. Pour les schémas d'amortissement constant et linéaire (1 à 7), la valeur finale de l'erreur semble intimement liée à la valeur de l'amortissement initial (β^o). Plus β^o est élevé, plus l'erreur finale à la trentième itération l'est aussi. Ce commentaire ne s'applique pas aux schémas exponentiels (8 à 10) puisque les erreurs de reconstruction ($EMAE(Y^{30}, Y^R)$) de ces schémas sont statistiquement équivalentes au niveau $\alpha = 0.025$ ¹.

¹Test d'égalité des moyennes avec $z = (EMAE_1 - EMAE_2) / \sqrt{\frac{S_1^2}{n_{inv}} + \frac{S_2^2}{n_{inv}}}$ et $S^2 = \sum_{m=1}^{n_{inv}} (MAE_m - EMAE)^2 / (n_{inv} - 1)$. Valide si n est > 30 (Johnson, 2000, p. 256).

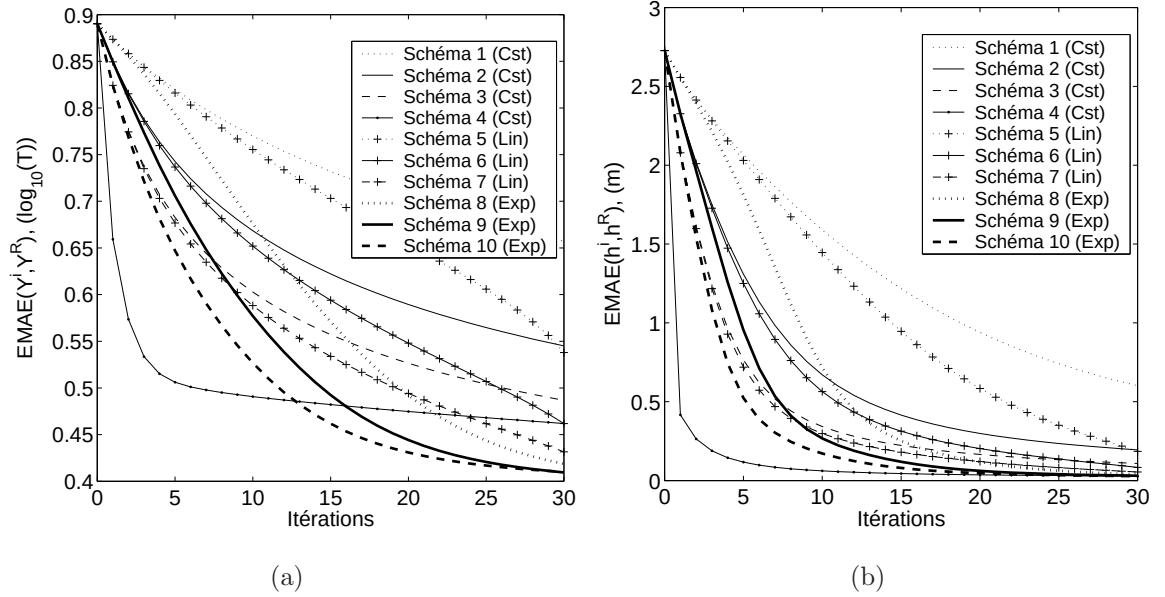


Figure 5.2: Évolution des erreurs pour les schémas d'amortissement 1 à 10. (a) $EMAE(Y^i, Y^R)$ et (b) $EMAE(h^i, h^R)$

Une différence importante entre les différents types de schémas utilisés est observée. À amortissement initial égal, les schémas d'amortissement exponentiels sont plus aptes à reproduire le véritable champ de transmissivités. Toutes catégories confondues et à l'exception du schéma 7 qui est statistiquement équivalent aux schémas 8 à 10, les schémas exponentiels ont des erreurs de reconstruction de T significativement plus faibles que les autres types de schémas. Fait intéressant, la valeur finale de l'erreur est la même et semble indépendante de la valeur de β^o .

L'évolution des erreurs moyennes de calibration des charges est illustrée à la figure 5.2(b). Les erreurs finales sont généralement beaucoup plus faibles que l'erreur obtenue avec les germes ($EMAE(h^1, h^R) = 2.7273m$). Pour la plupart des schémas, la décroissance de $EMAE(h^i, h^R)$ se produit surtout durant les 20 premières itérations et semble adopter un comportement asymptotique par la suite. Pour les schémas d'amortissement exponentiels, la diminution de l'erreur se produit essentiellement durant les 20 premières itérations, le gain subséquent est relativement faible. Cependant, on observe encore une nette amélioration de $EMAE(Y^i, Y^R)$ durant les 10 dernières itérations.

TAB. 5.1: Paramètres et performance des schémas d'amortissement 1 à 10.
Espérance des erreurs et écart-type correspondant ().

Schéma	Type	β^o	α (itération)	$EMAE(Y^{30}, Y^R)$ $\log_{10}(m^2/s)$	$EMAE(h^{30}, h^R)$ (m)
1	Constant	0.15	-	0.6574 (0.0598)	0.6014 (0.2699)
2		0.05	-	0.5451 (0.0699)	0.1944 (0.0641)
3		0.025	-	0.4867 (0.0779)	0.1082 (0.0353)
4		0	-	0.4619 (0.1508)	0.0278 (0.0146)
5	Linéaire	0.15	-0.005	0.5379 (0.0713)	0.1851 (0.0606)
6		0.05	-0.0016	0.4618 (0.0829)	0.0835 (0.0279)
7		0.025	-0.0008	0.4316(0.0904)	0.0546 (0.0190)
8	Exponentiel	0.15	15	0.4187 (0.1037)	0.0398 (0.0141)
9		0.05	15	0.4095 (0.1138)	0.0305 (0.0122)
10		0.025	15	0.4100 (0.1201)	0.0276 (0.0118)

Les erreurs d'ajustement des charges à la trentième itération ($EMAE(h^{30}, h^R)$) sont présentées au tableau 5.1. La distinction entre l'effet des fonctions d'amortissement est plus franche pour l'ajustement des charges que pour la reconstruction. De plus, on remarque que les schémas d'amortissement exponentiels (8, 9 et 10) et le schéma sans amortissement (4) sont significativement (au niveau $\alpha = 0.025$) plus performants d'un point de vue de la reproduction des charges que les autres schémas évalués. À l'exception des schémas 1 et 5, la valeur finale de l'erreur semble indépendante de la valeur de β^o mais plutôt liée au type de fonction d'amortissement utilisé. Également, les $EMAE(h^{30}, h^R)$ des schémas 9 et 10 ne sont pas significativement différents. Fait intéressant, l'écart-type des erreurs semble proportionnel à l'erreur de calibration.

Le schéma 4 constitue une situation particulière parce qu'il ne présente pas d'amortissement. Pour ce schéma, la calibration des charges est surtout réalisée durant la première itération et l'erreur de reconstruction décroît essentiellement durant les 3 premières itérations et demeure stable par la suite. L'erreur de reconstruction à la

trentième itération est légèrement plus élevée que celles des schémas 8, 9 et 10. À la lumière de ces résultats, l'utilisation d'un coefficient d'amortissement ne semble pas apporter un gain important à l'inversion. Cependant, lorsqu'un champ de charges krigées est utilisé pour compléter l'inversion, les erreurs d'estimation sur $\hat{h}$ engendrent des erreurs sur $\nabla \hat{h}$. Pour une telle situation, le coefficient d'amortissement apporte une stabilité et une robustesse importante à l'inversion. Pour illustrer cette caractéristique, les schémas d'amortissement 4 et 10 sont comparés lors d'inversions réalisées avec le champ du scénario piézométrique 5 (10 observations piézométriques en régime permanent).

L'apport de l'amortissement est illustré à la figure 5.3. Celle-ci compare l'image finale du champ de T obtenue pour une inversion réalisée sans amortissement (figure 5.3(a)) à celle obtenue avec le schéma d'amortissement 10 (figure 5.3(b)). On remarque que pour $\beta = 0$, le champ de transmissivités final présente des variations brusques de T près de (400,1300) et (250,1000) qui ne sont pas contenues dans le champ de référence. De plus, l'image finale obtenue avec un amortissement ressemble davantage au champ de référence.

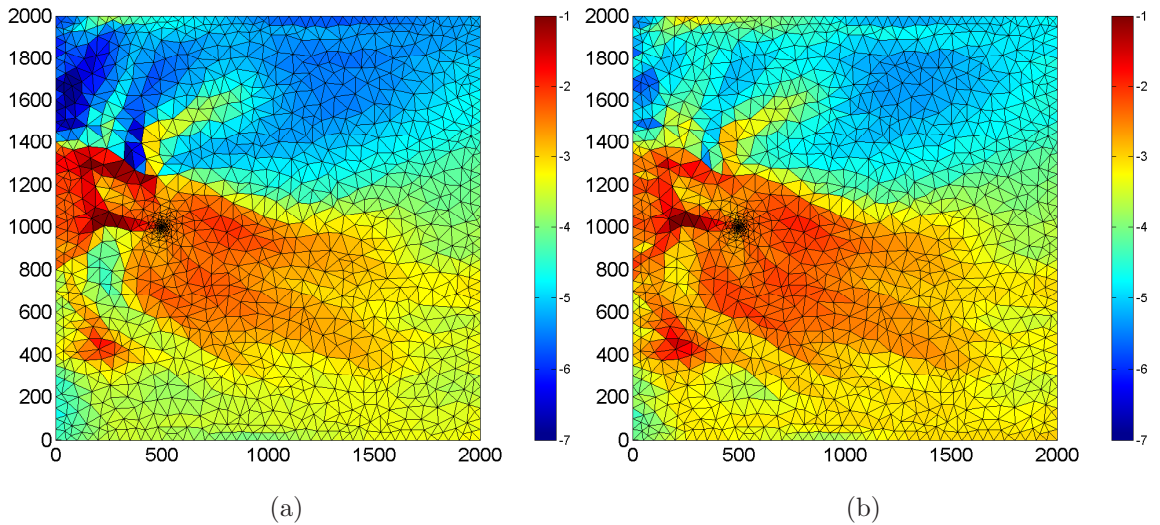


Figure 5.3: Apport de l'amortissement en présence d'erreur d'estimation sur $\hat{h}$. (a) Schéma d'amortissement 4 avec $\beta = 0$ et (b) Schéma d'amortissement 10 avec $\beta = 0.025$.

TAB. 5.2: Apport de l'amortissement en présence d'erreur d'estimation sur $\hat{h}$. Espérance des erreurs et écart-type correspondant ().

Schéma	$EMAE(Y^{30}, Y^R)$ $\log_{10}(m^2/s)$	$EMAE(h^{30}, h^R)$ (m)
4	0.6463 (0.1002)	0.0481 (0.0141)
10	0.5749 (0.0818)	0.0457 (0.0098)

En moyenne, la reproduction des charges est comparable pour les deux situations (voir le tableau 5.2). Cependant, la présence d'un amortissement (schéma 10) améliore significativement la qualité de la reconstruction du champ de transmissivité et réduit la variance des différentes erreurs. On remarque qu'en présence d'erreur d'estimation sur $\hat{h}$, les statistiques du tableau 5.2 sont plus élevées que celles du tableau 5.1. Ceci sera abordé en détail au chapitre 6.

Suite aux résultats présentés aux tableaux 5.1 et 5.2, il apparaît évident que les schémas d'amortissement de type exponentiel permettent de mieux ajuster les charges hydrauliques et de mieux reconstruire le champ de paramètres que les autres types de fonction d'amortissement. Cependant, la valeur de α , qui contrôle le nombre d'itérations nécessaires pour que β^i ne représente plus que 95% de sa valeur initiale, influence-t-elle la performance de la méthode d'inversion ? Afin d'évaluer l'influence du paramètre α , cinq nouveaux schémas d'amortissement différents sont comparés. Ceux-ci sont présentés à la figure 5.4 et au tableau 5.5 .

L'évolution des erreurs de reconstruction des transmissivités pour ces cinq schémas est présentée à la figure 5.5(a). À l'exception des schémas 11 et 12, l'évolution des erreurs est assez similaire et les erreurs finales sont presque identiques quelque soit la valeur de α utilisée (voir le tableau 5.3). Les tests d'égalité des moyennes indiquent que les schémas 10 à 15 sont statistiquement équivalents les uns aux autres en termes de reconstruction du champ de transmissivités ($EMAE(Y^{30}, Y^R)$). La variance des erreurs semble inversement proportionnelle à la valeur de α , ce qui indique que plus la décroissance de l'amortissement est lente, plus les champs finaux ont tendance à présenter la même précision pour la reconstruction.

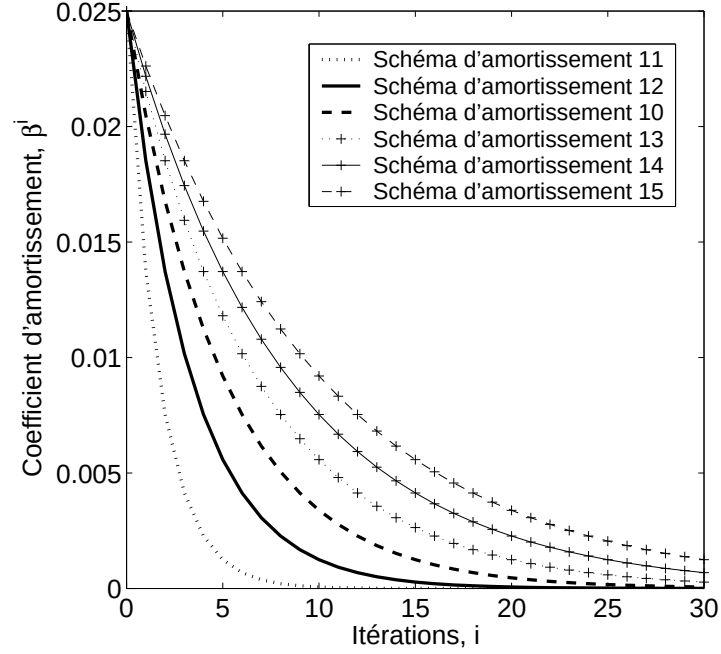


Figure 5.4: Évolution des schémas d'amortissement 10 à 15

L'évolution des erreurs de calibration est légèrement affectée par la valeur de α . Plus α augmente, moins la décroissance de $EMAE(h^{30}, h^R)$ est rapide (voir les courbes de la figure 5.5(b)). En fait, plus la valeur de α diminue, plus l'erreur de calibration adopte un comportement similaire à celui des schémas 3 et 4. En termes de reproduction des charges à la trentième itération ($EMAE(h^{30}, h^R)$), le schéma 10 apparaît statistiquement équivalent aux schémas 11, 12 et 13. Ces quatre schémas sont significativement plus performants que les schémas 14 et 15. La sélection d'un schéma d'amortissement parmi les schémas 10 à 13 constitue un choix éclairé pour une inversion se limitant à 30 itérations.

Les tests numériques effectués en première partie de cette section ont mis en évidence la supériorité des schémas d'amortissement exponentiels, l'insensibilité des erreurs face à la valeur de β^0 et la faible influence de α sur les statistiques. Parmi les schémas 10 à 13, l'utilisation du schéma d'amortissement 10, avec un amortissement initial $\beta^0 = 0.025$ et une portée α de 15 itérations, est un choix judicieux.

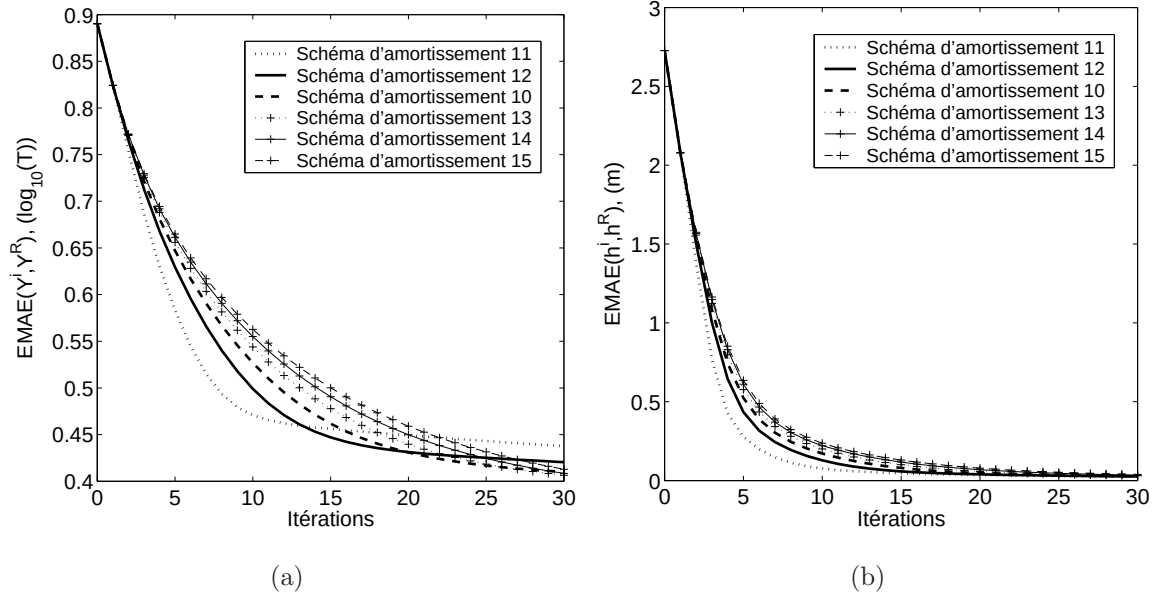


Figure 5.5: Évolution des erreurs pour les schémas d'amortissement 10 à 15.

(a) $EMAE(Y^i, Y^R)$ et (b) $EMAE(h^i, h^R)$

5.2 Détermination des contraintes relatives

Les contraintes relatives permettent de restreindre l'espace des solutions possibles en limitant les transmissivités à l'intérieur d'une plage dont la valeur centrale est celle du germe initial. Une contrainte relative trop lâche risque d'engendrer une solution très différente de la solution initialement fournie. À l'opposé, une valeur trop contraignante risque d'enlever de la flexibilité à l'algorithme.

L'objectif de cette section est d'évaluer l'effet de différentes valeurs de contraintes relatives sur les statistiques de calibration. Quatre contraintes relatives différentes y sont évaluées ($\Delta Y = 1, 2, 3$ et 4). Les simulations numériques sont effectuées avec le schéma d'amortissement 10 retenu à la section précédente. Des contraintes absolues de $T^{min} = 10^{-7} m^2/s$ et $T^{max} = 10^{-1} m^2/s$ sont utilisées. L'effet de celles-ci ne sera pas évalué.

La figure 5.6(a) illustre l'évolution des erreurs de reconstruction des transmissivités correspondant à chacune de ces situations. Dans un premier temps, on remarque

TAB. 5.3: Paramètres et performance des schémas d'amortissement 10 à 15.
Espérance des erreurs et écart-type correspondant ().

Schéma	Type	β^o	α (itération)	$EMAE(Y^{30}, Y^R)$ $\log_{10}(m^2/s)$	$EMAE(h^{30}, h^R)$ (m)
11	Exponentiel	0.025	5	0.4375 (0.1381)	0.0249 (0.0114)
12		0.025	10	0.4204 (0.1297)	0.0257 (0.0114)
10		0.025	15	0.4100 (0.1201)	0.0276 (0.0118)
13		0.025	20	0.4065 (0.1112)	0.0305 (0.0123)
14		0.025	25	0.4084 (0.1048)	0.0342 (0.0130)
15		0.025	30	0.4129 (0.1000)	0.0384 (0.0139)

que contrairement aux contraintes relatives 2, 3 et 4, les erreurs associées à l'intervalle 1 affichent une légère tendance à la hausse à partir de la quinzième itération. Cette hausse de l'erreur pour l'intervalle 1 est assez bien corrélée avec l'augmentation du nombre de contraintes relatives activées durant cet essai (voir la figure 5.7). L'algorithme suggère, dans certains éléments, des valeurs de transmissivité qui sont situées à l'extérieur de l'intervalle $[(Y_j^0 - \Delta Y) (Y_j^0 + \Delta Y)]$. La contrainte relative entre alors en action et restreint la nouvelle valeur de T à l'une des bornes $(Y_j^0 - \Delta Y)$ ou $(Y_j^0 + \Delta Y)$. Plus ΔY est large, moins le nombre moyen de contraintes activées est élevé (voir le tableau 5.4). Ce phénomène est d'autant plus marqué lorsque Y_j^R n'est pas compris à l'intérieur de la plage de valeurs permises. Par exemple, pour $\Delta Y = 1$, Y^R est situé à l'extérieur de l'intervalle $[(Y_j^0 - 1) (Y_j^0 + 1)]$ dans 1140 éléments sur une possibilité de 3088 éléments (37%). On note aussi que tout au long du processus, même si $(EMAE(Y^i, Y^R))$ affiche une légère augmentation, l'erreur de calibration $(EMAE(h^i, h^R))$ demeure stable.

Les différentes erreurs à la trentième itération sont résumées au tableau 5.5. Les tests d'égalité des moyennes indiquent que les erreurs $(EMAE(Y^{30}, Y^R))$ pour les intervalles 2, 3 et 4 sont statistiquement égales et plus faibles que celles de l'intervalle 1. L'activation d'un nombre important de contraintes nuit donc à la capacité de la méthode à reconstruire le champ de transmissivités. De ce fait, les erreurs d'ajustement finales $(EMAE(h^{30}, h^R))$ pour les intervalles 3 et 4 sont équivalentes et

TAB. 5.4: Nombre moyen de contraintes minimales et maximales activées à l'itération 30 et nombre d'éléments où Y^R n'est pas une valeur permise pour les intervalles 1 à 4.

Intervalle	Nombre moyen		Nombre moyen		Nombre d'éléments où Y^R n'est pas valeur permise
	de contraintes		de contraintes		
	relatives activées		absolues activées		
	minimale	maximale	minimale	maximale	
1	425.41	836.91	1.81	10.19	1140.20 (36.92%)
2	58.66	135.83	0.92	4.07	217.57 (7.05%)
3	5.67	12.15	0.85	4.25	22.31 (0.72%)
4	0.64	0.58	1.14	4.35	1.15 (0.04%)

significativement plus faibles que l'erreur des intervalles 1 et 2. Il semble donc que l'activation de contraintes relatives nuise elle aussi à la capacité de la méthode à caler le champ de charges. On mentionne que des conclusions similaires ont été obtenues lorsqu'un champ de charges krigés est utilisé pour la réalisation de ces tests.

On note au passage que sur une possibilité de 3088 éléments, peu de contraintes absolues minimales et maximales ont été activées en moyenne durant l'inversion (voir le tableau 5.4). La situation la moins bonne correspond également à l'intervalle 1. Pour l'intervalle 4 on remarque que, comparativement à l'intervalle 3, davantage de contraintes absolues ont été activées. Ceci s'explique par le fait que ΔY étant élevé, des contraintes absolues sont activées à la place des contraintes relatives.

Pour les intervalles 3 et 4, l'utilisation d'une contrainte relative lâche n'a pas empêché l'obtention de statistiques d'ajustement adéquates. Pour l'intervalle 4, presque aucune contrainte n'a été activée, ce qui revient à ne pas imposer de contraintes. Pour la poursuite de l'étude, une contrainte relative $\Delta Y = 4$ sera utilisée. Cette situation constitue une situation où plus de flexibilité est octroyé à l'algorithme et par conséquent une situation où les possibilités que l'algorithme s'éloigne grandement de la solution initiale et ne converge pas vers le champ de référence sont favorisées.

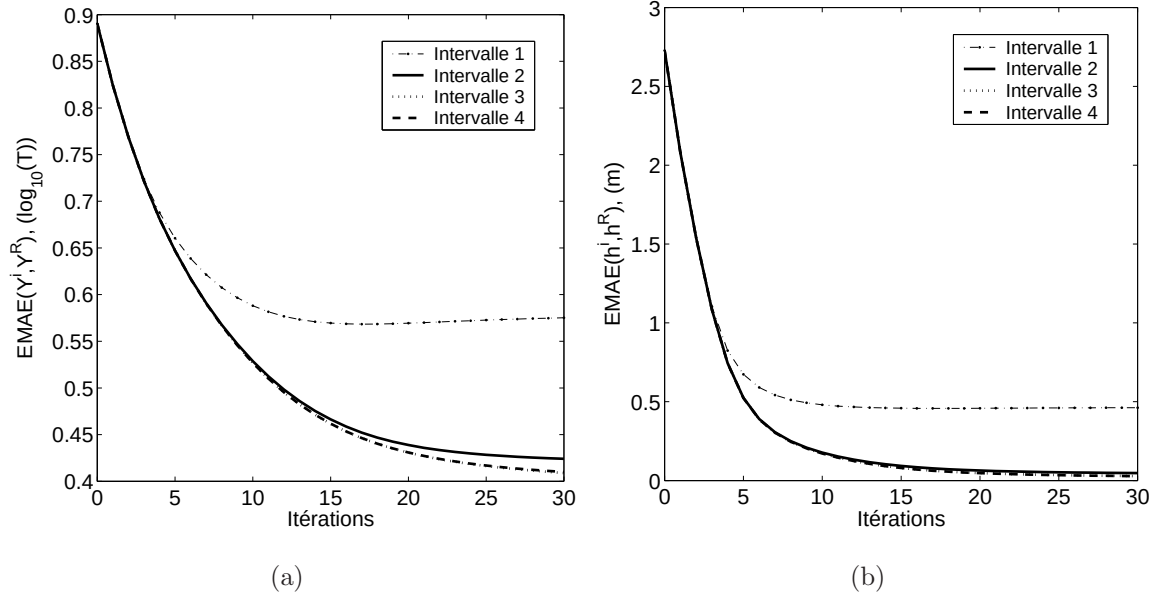


Figure 5.6: Évolution des erreurs pour les intervalles 1 à 4. (a) $EMAE(Y^i, Y^R)$ et (b) $EMAE(h^i, h^R)$

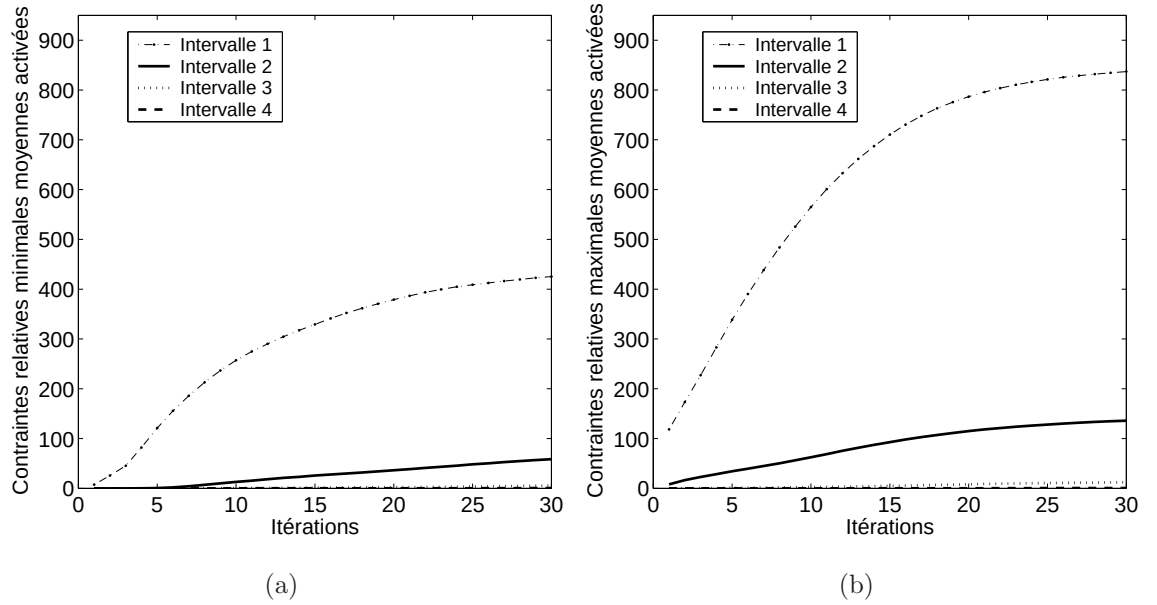


Figure 5.7: Contraintes relatives moyennes activées à l'itération 30 pour les intervalles 1 à 4. (a) Contraintes minimales et (b) contraintes maximales

TAB. 5.5: Performance des intervalles 1 à 4. Espérance des erreurs et écart-type correspondant ().

Intervalle	ΔY $\log_{10}(m^2/s)$	$EMAE(Y^{30}, Y^R)$ $\log_{10}(m^2/s)$	$EMAE(h^{30}, h^R)$ (m)
1	1	0.5752 (0.0848)	0.4622 (0.2766)
2	2	0.4241 (0.1091)	0.0469 (0.0200)
3	3	0.4088 (0.1191)	0.0283 (0.0123)
4	4	0.4100 (0.1201)	0.0276 (0.0118)

5.3 Détermination du facteur de correction

Quatre possibilités ont été précédemment identifiées quant au facteur de correction (δ) affectant chaque élément du modèle numérique. La première alternative consiste tout simplement à évaluer le gradient hydraulique au centre de chaque élément et à considérer celui-ci comme constant sur l'ensemble de l'élément. Les alternatives suivantes consistent à calculer le gradient hydraulique aux trois points de Gauss (où le gradient est le plus précis numériquement) et à calculer des facteurs de correction pour chaque point. Un estimé unique de T est obtenu en évaluant la moyenne arithmétique, géométrique ou harmonique des trois δ ainsi obtenus.

Le but visé par cette section est d'évaluer l'influence du facteur de correction sur le résultat final de l'inversion. À nouveau, le schéma d'amortissement 10, une contrainte relative de $\Delta Y = 4$ et des contraintes absolues $T^{min} = 10^{-7}m^2/s$ et $T^{max} = 10^{-1}m^2/s$ sont utilisés pour l'exécution des inversions.

L'évolution des erreurs de reproduction de T et d'ajustement de h est présentée à la figure 5.8. Les statistiques de la dernière itération sont, quant à elles, exposées au tableau 5.6. Il y a peu à dire concernant l'évolution des statistiques $EMAE(Y^i, Y^R)$ et $EMAE(h^i, h^R)$. Celles-ci sont presque identiques pour les quatre facteurs de correction. De plus, en fin de processus, les erreurs moyennes sont statistiquement équivalentes les unes aux autres et les quatre facteurs de correction semblent donc équivalents. Par ailleurs, les moyennes de T pour l'ensemble du champ à la dernière itération sont

TAB. 5.6: Performance des différents facteurs de correction. Espérance des erreurs et écart-type correspondant ().

Alternative	Facteur de correction	$EMAE(Y^{30}, Y^R)$ $\log_{10}(m^2/s)$	$EMAE(h^{30}, h^R)$ (m)
1	Valeur centrale (eq. 2.45)	0.4100 (0.1201)	0.0270 (0.0115)
2	Arithmétique (eq. 2.46)	0.4114 (0.1209)	0.0266 (0.0118)
3	Géométrique (eq. 2.47)	0.4082 (0.1207)	0.0270 (0.0117)
4	Harmonique (eq. 2.48)	0.4061 (0.1208)	0.0276 (0.0118)

statistiquement équivalentes les unes aux autres pour les quatres facteurs de correction. En vertu de l'inégalité fondamentale de Wiener ($\bar{T}_H \leq \bar{T}_G \leq \bar{T}_A$, Renard et de Marsily (1997)), on aurait dû obtenir des transmissivités plus faibles avec le facteur de correction harmonique qu'avec le facteur de correction arithmétique. Bien que ce résultat puisse paraître surprenant, il s'explique par le fait que la correction locale apportée par l'un ou l'autre des facteurs de correction ne sera pas nécessairement conservée à l'itération suivante. De plus, des essais réalisés avec des éléments finis plus grossiers ou très allongés ont donné des résultats similaires. Par conséquent, la similitude des statistiques ne peut être expliquée par la bonne qualité de la grille d'éléments finis utilisée.

Sur la base des résultats obtenus, le choix de la méthode de calcul du facteur de correction ne semble pas influencer les résultats des inversions. Le temps de calcul nécessaire à la correction des transmissivités (en excluant la résolution du problème direct) est cependant directement proportionnel au nombre de points où le gradient hydraulique est évalué. Par conséquent, l'utilisation du facteur de correction central permet une réduction significative du temps de calcul de l'ordre de 1.75s pour chaque inversion de 30 itérations et sera donc utilisé pour les expérimentations subséquentes.

5.4 Détermination des poids temporels

La dernière analyse concerne l'influence des valeurs de λ_k sur l'efficacité de la méthode de l'estimation successive des flux en régime transitoire. Les valeurs de λ_k

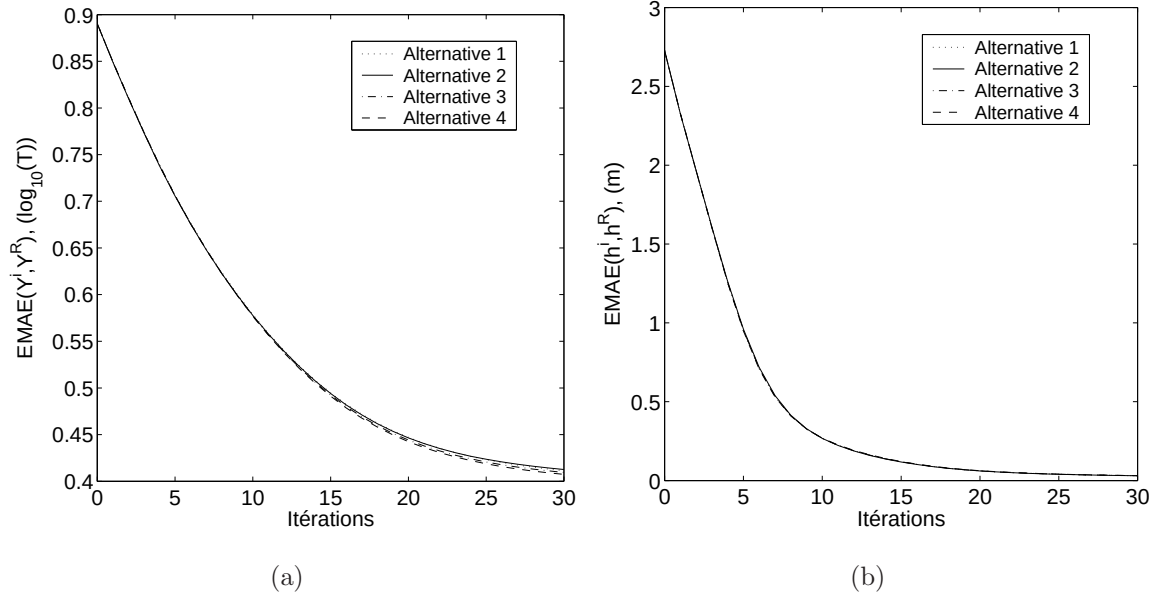


Figure 5.8: Évolution des erreurs pour différents facteurs de correction. (a) $EMAE(Y^i, Y^R)$ ($\log_{10} T$) et (b) $EMAE(h^i, h^R)$ (m)

pondèrent les n_t facteurs de correction et permettent ainsi de tenir compte de la variation temporelle des gradients hydrauliques en régime transitoire. Il est donc légitime de s'interroger sur l'impact de ces poids et sur une façon d'en déterminer les valeurs.

Plusieurs possibilités ont été envisagées mais seuls trois schémas temporels différents sont comparés. Les valeurs de λ_k pour chaque schéma temporel sont présentées au tableau 5.7 pour $k = 1, 2, 3, 4$, et 5. Ceux-ci correspondent aux temps $t_k = 10^3, 10^4, 10^5, 10^6$ et $10^7 s$ (figure 5.9). On rappelle que pour converger, la somme des $n_t \lambda_k$ doit être unitaire.

TAB. 5.7: Valeurs de λ_k pour les schémas temporels évalués.

Schéma temporel	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5
1	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2
2	0.0001	0.0009	0.009	0.09	0.9
3	0.35	0.1	0.1	0.1	0.35

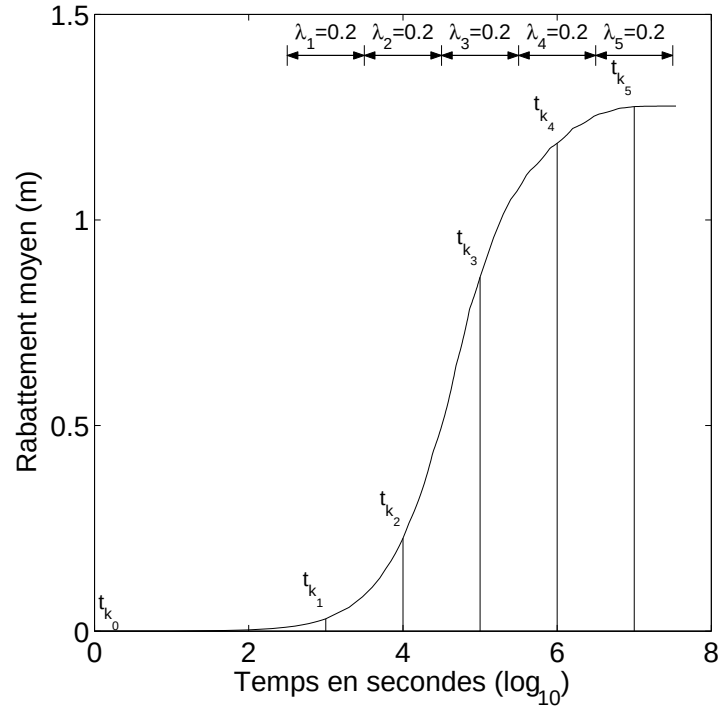


Figure 5.9: Schéma temporel logarithmique

Pour le premier schéma temporel, les cinq λ_k sont posés égaux. Comme les temps utilisés pour la résolution du problème direct sont également répartis sur une échelle logarithmique, le choix de poids égaux revient à attribuer plus de poids aux premiers moments du régime transitoire. Pour le second schéma temporel, un poids proportionnel au temps écoulé entre deux champs consécutifs est utilisé. Finalement, la troisième situation représente le cas où les poids sont liés à la qualité de l'estimation de charges. On suppose ici que l'estimation à t_1 et t_5 est plus précise et par conséquent des poids plus importants sont attribués à λ_1 et λ_5 .

La figure 5.10 illustre l'évolution des erreurs moyennes de reconstruction de T pour les trois schémas temporels. Les erreurs à la trentième itération sont présentées au tableau 5.8 pour les inversions réalisées avec le champ $\hat{h} = h^R$ (scénario piézométrique 6). Le comportement des erreurs de reconstruction est assez similaire durant les 15 premières itérations. Un léger écart favorisant le schéma temporel 1 apparaît par la suite. Cependant, la diminution de l'erreur de calibration de h (moyenne sur n_t pas

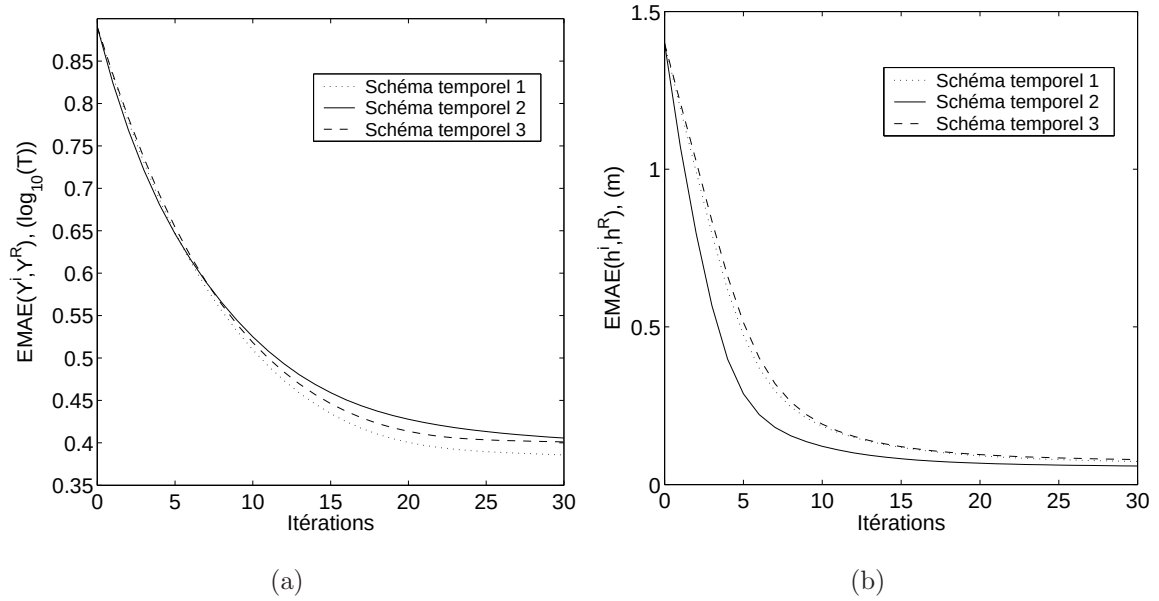


Figure 5.10: Évolution des erreurs pour les schémas temporels 1 à 3 pour le scénario piézométrique 6. (a) $EMAE(Y^i, Y^R)$ et (b) $EMAE(h^i, h^R)$

de temps) pour le schéma temporel 2 est légèrement plus rapide et celle-ci est, à l'itération 30, statistiquement meilleure que pour les schémas 1 et 3.

La meilleure reconstruction de T s'explique par le fait que les informations complémentaires apportées par chacun des champs de charges ont été également prises en compte avec l'utilisation du schéma 1. Inversement, puisqu'avec le schéma 2, un poids important (0.90) est attribué au dernier champ de charge ($k = 5$), l'algorithme tente essentiellement de caler le champ à t_5 , ce qui ne permet pas d'obtenir une erreur de reconstruction comparable à 1. Par contre, l'ajustement des charges est meilleur puisque c'est à t_5 que les rabattements sont les plus importants et donc les possibilités d'erreurs plus grandes.

Afin de différencier plus nettement les schémas temporels, les expérimentations sont répétées avec un champ de charges estimé par krigeage. Le champ $\hat{h}$ du scénario piézométrique 7 estimé à partir de 100 mesures piézométriques est utilisé. Les résultats sont présentés au tableau 5.8 et montrent un avantage plus clair en faveur du schéma

TAB. 5.8: Performance des schémas temporels 1 à 3 pour les scénarios piézométriques 6 et 10. Espérance des erreurs et écart-type correspondant ().

Schéma temporel	Scénario piézométrique	$EMAE(Y^{30}, Y^R)$ $\log_{10}(m^2/s)$	$EMAE(h^{30}, h^R)$ (m)
1	6	0.3857 (0.1102)	0.0732 (0.0325)
2		0.4056 (0.1182)	0.0588 (0.0229)
3		0.4011 (0.1148)	0.0791 (0.0343)
1	7	0.4930 (0.0781)	0.0769 (0.0283)
2		0.5477 (0.0904)	0.0635 (0.0200)
3		0.5044 (0.0821)	0.0827 (0.0288)

temporel 1 en termes de reconstruction du champ de transmissivités. L'utilisation de poids égaux tempère les facteurs de correction associés aux erreurs d'interpolation à certains pas de temps. Il en résulte des corrections plus justes et plus robustes.

5.5 Discussion

Parmi les aspects évalués, le choix du schéma d'amortissement est le facteur qui influence le plus la performance de la méthode de l'estimation successive des flux. Nos résultats montrent qu'en présence d'erreurs d'estimation sur $\nabla \hat{h}$, l'ajout d'un amortissement apporte beaucoup de robustesse et de stabilité à l'inversion. L'utilisation d'un schéma d'amortissement exponentiel permet de mieux reproduire les transmissivités de référence. Les résultats obtenus sont robustes face au choix des paramètres α et β^0 . Ceci est d'un intérêt opérationnel important puisqu'ils pourront être choisis avec beaucoup de latitude par l'opérateur. Les cas étudiés pointent les valeurs $\alpha = 15$ et $\beta^0 = 0.025$ comme raisonnables pour une inversion de 30 itérations.

L'ajout de contraintes relatives à la solution initiale est un aspect qui a initialement été proposé par Gomez-Hernandez *et al.* (1997) pour la méthode des points maîtres afin de restreindre l'espace des solutions possibles et limiter l'écartement de la solution finale par rapport à la solution initiale. Nos résultats indiquent que l'uti-

lisation d'une contrainte relative nuit à la capacité de la méthode de l'estimation successive des flux à reconstruire le champ de transmissivités. Il semble que le coefficient d'amortissement puisse, à lui seul, être en mesure de limiter l'écartement de la solution et régulariser le champ de transmissivités. De possibles erreurs de conceptualisation lors de la génération des germes peuvent donc être tempérées par le coefficient d'amortissement.

Les expérimentations réalisées ont montré que l'influence de la méthode de calcul du facteur de correction sur les résultats obtenus était statistiquement négligeable. Ce résultat est apparemment surprenant car les facteurs de correction auraient dû traiter différemment la variation non-linéaire de la charge hydraulique sur l'élément fini. Localement, à une itération donnée les transmissivités obtenues pour chaque facteur de correction sont ordonnées conformément aux bornes de Wiener $T(\delta_{Harm}) \leq T(\delta_{Geom}) \leq T(\delta_{Arit})$ (Renard et de Marsily, 1997) et un résultat intermédiaire est obtenu avec le facteur de correction central (δ_{Mid}). Cependant, d'une itération à l'autre et pour un élément donné, rien ne garantit que les facteurs de correction sont systématiquement inférieurs pour la moyenne harmonique par exemple. En effet, le facteur calculé à l'itération $i + 1$ dépend de l'ensemble des transmissivités de départ et des facteurs appliqués à toutes les itérations précédentes. En l'absence d'un résultat favorisant l'un ou l'autre des facteurs de correction, le facteur de correction central a été préféré en raison d'un temps de calcul presque trois fois moindre.

Nos résultats montrent que le choix du schéma temporel influence la qualité de la reconstruction et de la calibration. Parmi les schémas évalués, le schéma temporel 1 est apparu légèrement supérieur en termes de reconstruction du champ de T et le schéma 2 plus apte à reproduire les charges hydrauliques. Cependant, en présence d'erreurs d'interpolation sur $\hat{h}$, le premier schéma temporel permet une meilleure caractérisation du champ de paramètres que les autres schémas temporels. Il semble que l'utilisation de λ égaux ne favorise pas démesurément les éventuelles erreurs d'interpolation de l'un ou l'autre des champs de charges. Par conséquent, le schéma temporel 1 a été retenu pour la poursuite des expérimentations du prochain chapitre. Par ailleurs, il pourrait être avantageux de lier λ à la dérivée temporelle du rabattement ou au

rabattement lui-même en faisant varier spatialement λ . La somme des λ_{jk} pour un élément j devrait être unitaire. Cet aspect n'a pas été évalué dans ce travail.

On conclut ce chapitre en présentant à nouveau l'algorithme schématique de la méthode de l'estimation successive des flux telle qu'elle apparaît la plus performante à la suite des expérimentations réalisées dans ce chapitre.

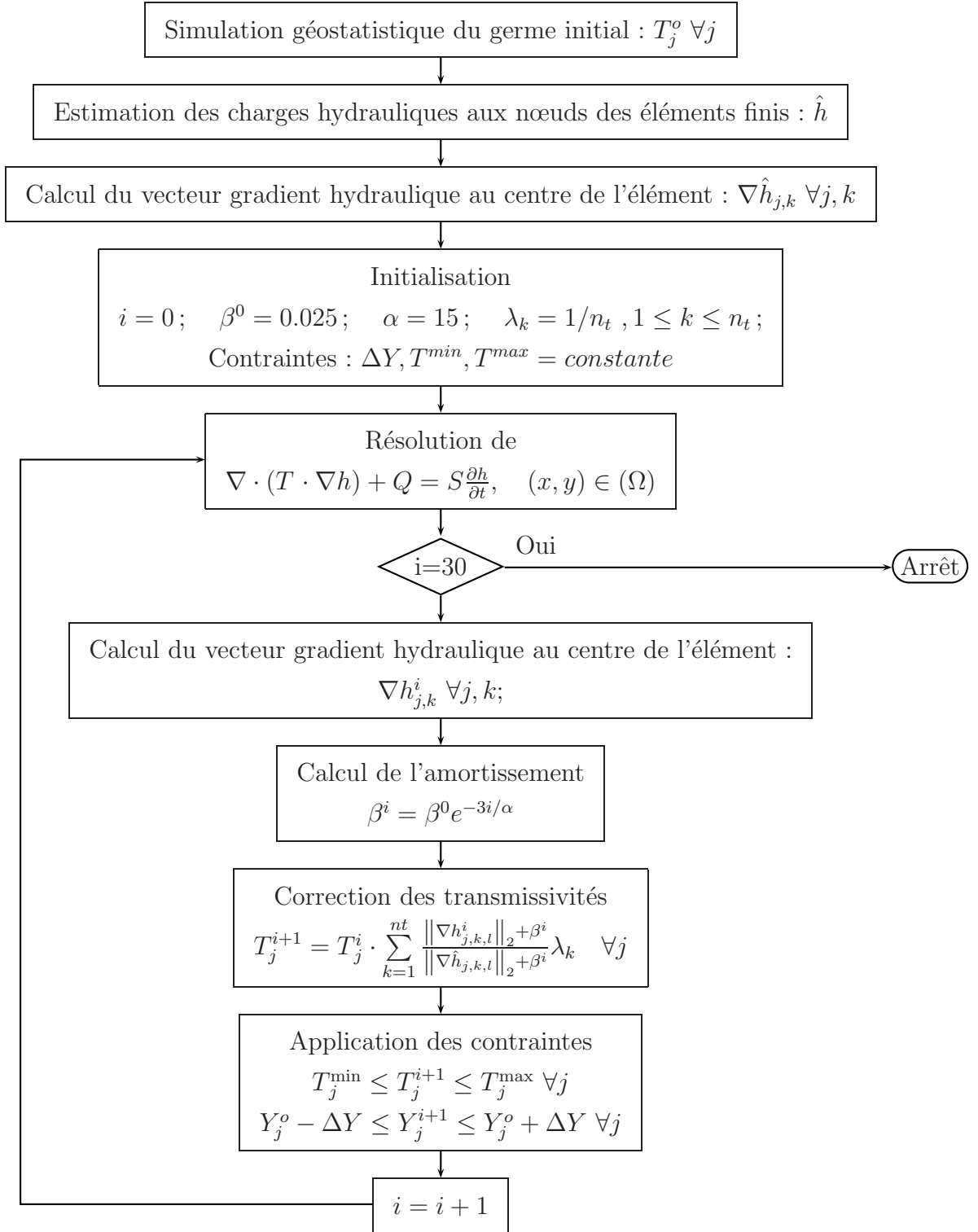


Figure 5.11: Algorithme schématique de la méthode de l'estimation successive des flux et paramètres itératifs utilisés

Chapitre 6

Influence des erreurs d'estimation piézométriques sur la qualité des inversions

La réalisation d'une inversion par la méthode de l'estimation successive des flux repose essentiellement sur l'utilisation d'un champ de potentiel hydraulique que l'on espère assez semblable au véritable champ de charges. Dans un contexte réel d'application, ces charges ne sont connues que ponctuellement et l'ensemble du champ doit être interpolé à partir des quelques mesures piézométriques disponibles. Le krigeage universel avec dérive et conditions frontières imposées s'est avéré particulièrement adapté à la régionalisation des charges hydrauliques. L'approche demeure toutefois une méthode d'interpolation et des erreurs d'estimation sont nécessairement produites loin des points de mesure, lesquels peuvent eux mêmes être entachés d'erreur.

L'effet de lissage introduit par le krigeage amoindrit les variations locales de h^R et modifie localement la magnitude et l'orientation du gradient hydraulique. Puisque la méthode d'inversion s'appuie sur une estimation du champ ∇h^R afin de reconstruire le champ de paramètres, il est légitime de s'interroger sur l'effet des erreurs d'estimation $(\hat{h} - h^R)$ sur la qualité de l'inversion.

Ce chapitre traite de l'effet de l'utilisation d'un champ de charges krigées sur la qualité de l'inversion. Dix *scénarios piézométriques (SP)* différents sont comparés. Ceux-ci représentent cinq situations en régime permanent ou transitoire pour lesquelles 6380 (∞), 100, 50, 25 et 10 piézomètres sont utilisés pour l'obtention du champ $\hat{h}$. Ces scénarios supposent les conditions frontières de type Dirichlet (Γ_1 et Γ_2) connues. La méthodologie complète utilisée pour le krigage des charges hydrauliques est présentée à la section 2.3. Par ailleurs, la localisation des piézomètres et des points doublons ainsi que le modèle de covariance utilisé pour l'estimation des champs $\hat{h}$ sont présentés à la section 3.4.

Les différents scénarios piézométriques, les erreurs d'estimation et l'effet de pépité de $\hat{h}$ qui sont associés à chaque champ sont résumés au tableau 6.1. Pour les scénarios piézométriques 1 et 6, puisque les champs $\hat{h}$ utilisés pour l'inversion sont les champs $\hat{h} = h^R$, l'erreur d'estimation est nécessairement nulle. Pour chaque scénario, 100 inversions sont réalisées avec le schéma d'amortissement exponentiel retenu au chapitre précédent ($\alpha = 15$ itérations, $\beta^0 = 0.025$). Le processus itératif est limité à 30 itérations.

TAB. 6.1: Scénarios piézométriques et erreurs d'estimation des charges.

Scénario piézométrique	Régime	n_{Piezo}	n_t	Frontières Γ_1 et Γ_2	$MAE(\hat{h}, h^R)$ (m)
1	Permanent	6380 (∞)	1	Connues	0
2	Permanent	100	1	Connues	0.1180
3	Permanent	50	1	Connues	0.1594
4	Permanent	25	1	Connues	0.1764
5	Permanent	10	1	Connues	0.3269
6	Transitoire	6380 (∞)	5	Connues	0
7	Transitoire	100	5	Connues	0.1210
8	Transitoire	50	5	Connues	0.1613
9	Transitoire	25	5	Connues	0.1770
10	Transitoire	10	5	Connues	0.3242

Afin de bien illustrer l'influence du krigeage des charges hydrauliques sur les résultats de l'inversion, des exemples d'inversion sont présentés et discutés en détail. Pour ces exemples, la solution initialement fournie à l'algorithme d'inversion est le champ de T 96 présenté à la figure 4.2(a). À nouveau, les résultats des 100 inversions sont comparés dans un cadre statistique. Les bases de comparaisons comprennent les statistiques de reconstruction du champ de transmissivités ($EMAE(Y^{30}, Y^R)$), les corrélations déclusterisées ($Corr(Y^{30}, Y^R)$), les erreurs d'ajustement du champ de charges utilisé lors de l'inversion ($EMAE(h^{30}, \hat{h})$), les statistiques d'ajustement du champ de charges de référence ($EMAE(h^{30}, h^R)$), les erreurs de calage des observations piézométriques ($EMAE(h_{Obs}^{30}, h_{Obs}^R)$) et les probabilités de capture d'une particule non-réactive ($P_{Cap}(t < 3ans)$).

6.1 Reconstruction du champ de transmissivités

6.1.1 Exemples d'inversion en présence d'erreurs d'estimation sur h^R

Les champs de transmissivités obtenus après inversion du champ 96 sont présentés à la figure 6.1 pour les inversions en régime permanent et à la figure 6.2 pour les inversions en régime transitoire. À titre de comparaison, le champ de transmissivités de référence T^R est également présenté aux figures 6.1(a) et 6.2(a).

Dans tous les cas, les champs de transmissivités obtenus après inversion reconstruisent bien les principales structures du modèle de référence. Même si le cordon granulaire et les zones imperméables situées au nord et au sud-ouest étaient peu apparentes dans la solution initiale (voir le germe 96 à la figure 3.2), la calibration a permis une reconstruction adéquate du champ de référence. Visuellement, on remarque que les inversions réalisées avec les champs de référence (SP 1 et 6) ont tendance à générer des champs de T plus hétérogènes alors que ceux obtenus avec les champs de charges krigées (SP 2 à 5 et 7 à 10) sont plus lisses. Qualitativement, il semble y avoir un lien entre l'erreur d'estimation du champ de charges et le degré de lissage du champ de T calibré.

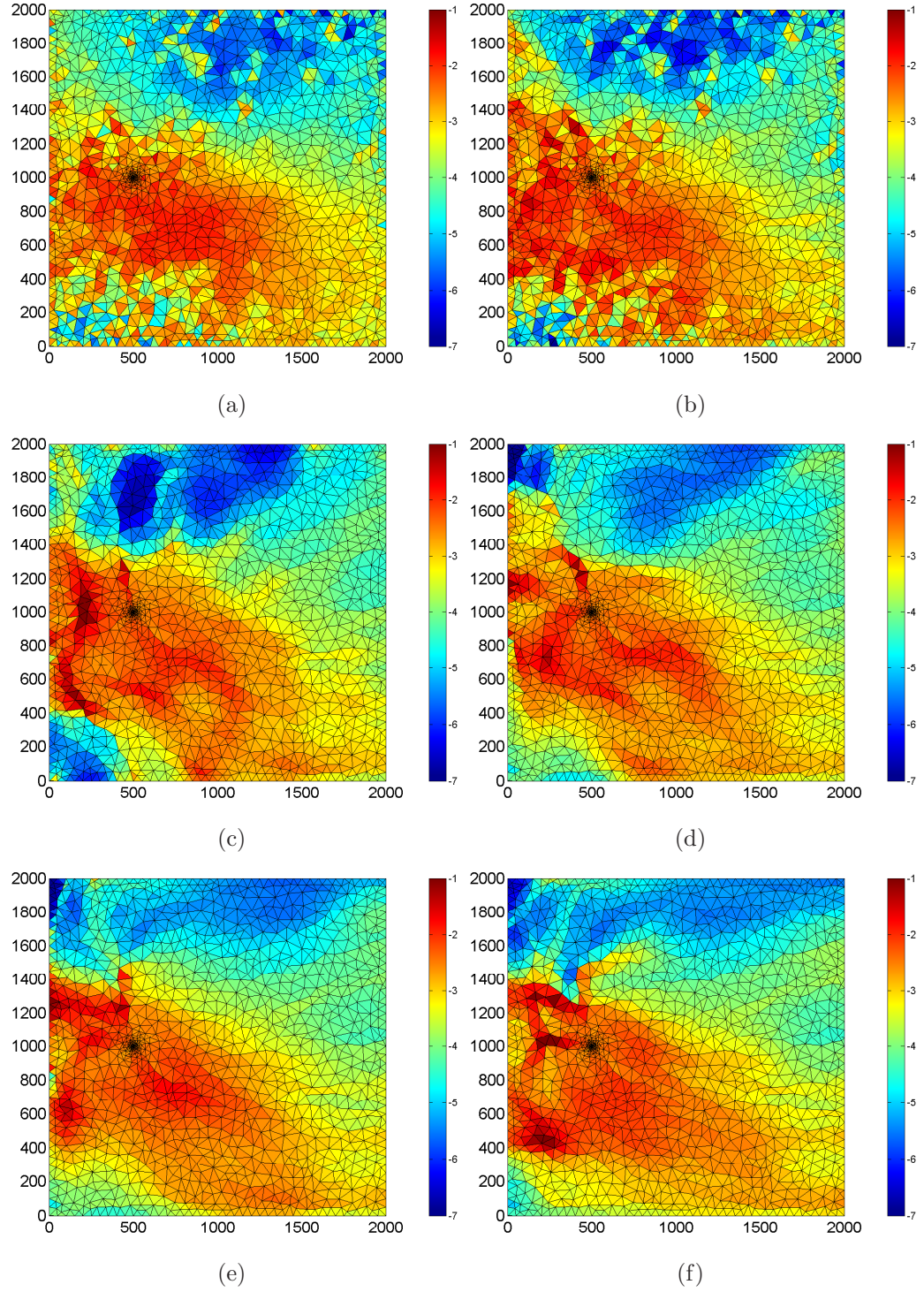


Figure 6.1: Champs de T obtenus pour les scénarios piézométriques 1 à 5 réalisés avec le germe 96 ($\log_{10}(m^2/s)$). (a) Champ de $\log_{10} T$ de référence, (b) à (f) champs de $\log_{10} T$ obtenus pour les scénarios piézométriques 1 à 5.

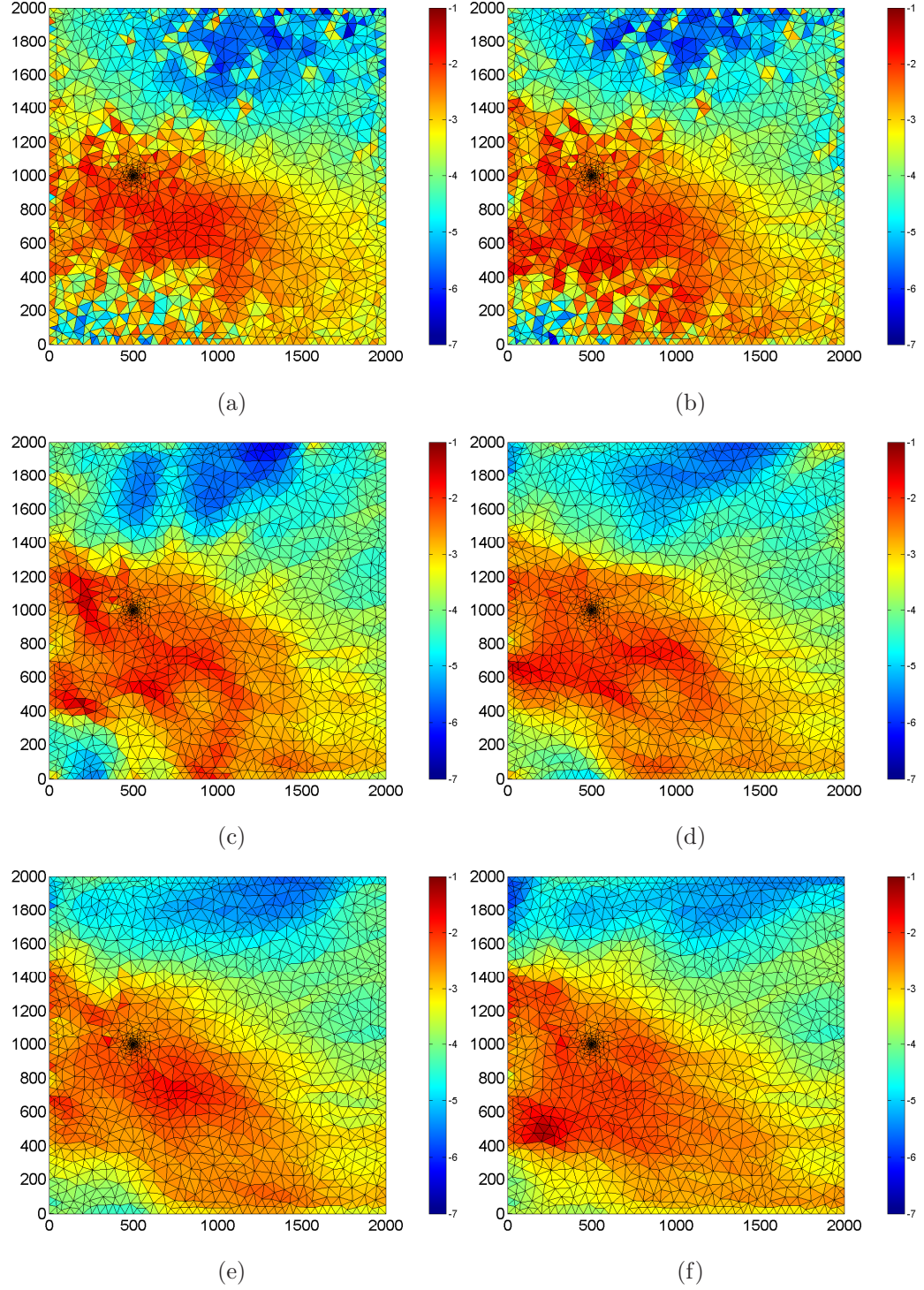


Figure 6.2: Champs de T obtenus pour les scénarios piézométriques 6 à 10 réalisés avec le germe 96 ($\log_{10}(m^2/s)$). (a) Champ de $\log_{10}T$ de référence, (b) à (f) champs de $\log_{10}T$ obtenus pour les scénarios piézométriques 6 à 10.

Quelques zones de fortes transmissivités sont observées à environ 250m à l'ouest du puits pour les inversions des *SP* 2, 4 et 5 (figure 6.1(d), 6.1(e), 6.1(f)). Ces transmissivités élevées sont causées par la présence de faibles gradients hydrauliques dans les champs $\hat{h}$. Ces minima sont en réalité des artéfacts d'interpolation (voir la figure 6.4) puisque les charges de référence (*SP* 1) diminuent régulièrement entre Γ_1 et Γ_4 . Il en résulte des facteurs de corrections légèrement supérieurs à un ($\delta = \frac{\nabla h^i + \beta^i}{\approx 0 + \beta^i} > 1$) et des transmissivités légèrement surestimées après 30 itérations. Néanmoins, l'amplitude de l'erreur de reconstruction est faible et la surface affectée est, quant à elle, limitée.

Pour les scénarios piézométriques 3, 4 et 5 présentés aux figures 6.1(d), 6.1(e) et 6.1(f), le processus de calibration a modifié à la baisse les transmissivités au nord-ouest du domaine. Ce secteur correspond à une région où $\nabla \hat{h}$ est surestimé (voir l'erreur relative à la figure 6.3) ce qui engendre des facteurs de correction inférieurs à 1. Les transmissivités obtenues en fin d'optimisation sont donc plus basses que celles du modèle de référence. Cette mauvaise estimation du champ de gradients se produit dans un secteur où les gradients de référence sont particulièrement faibles ($1/1000 \leq \nabla h^R \leq 1/10000$) comme en témoigne la figure 3.6. De faibles erreurs d'estimation sur h^R engendrent alors rapidement des erreurs d'estimation importantes sur ∇h^R . Le phénomène n'est apparu qu'au nord-ouest du domaine alors que d'autres erreurs d'interpolation (1000, 1750) n'ont pas créé d'artéfacts. On note aussi que ce phénomène n'est pas apparu dans toutes les inversions et qu'il a probablement été amplifié par la solution initiale de T fournie.

On remarque que de minces bandes de T se sont développées dans les images finales des scénarios piézométriques 2 à 5. Généralement orientés parallèlement aux lignes de courant, ces linéaments ont profité de l'indépendance mathématique existant entre deux lignes de courant adjacentes pour se développer.

Les inversions réalisées en régime transitoire (*SP* 6 à 10) produisent des champs de transmissivités plus lisses que ceux obtenus en régime permanent. Visuellement, la reconstruction du champ de transmissivités semble meilleure et les limites du cordon perméable plus semblables à celles du modèle de référence. Les artéfacts observés à

l'ouest du puits et au nord-ouest du domaine en régime permanent sont inexistantes en régime transitoire. Par ailleurs, les fines bandes de T observées dans les scénarios piézométriques 2 à 5 ne sont visibles qu'en amont du domaine pour les SP 7 à 10. L'utilisation de cinq champs de charges permet d'obtenir un facteur de correction moyen qui atténue l'effet d'une mauvaise estimation des gradients hydrauliques à l'un des pas de temps.

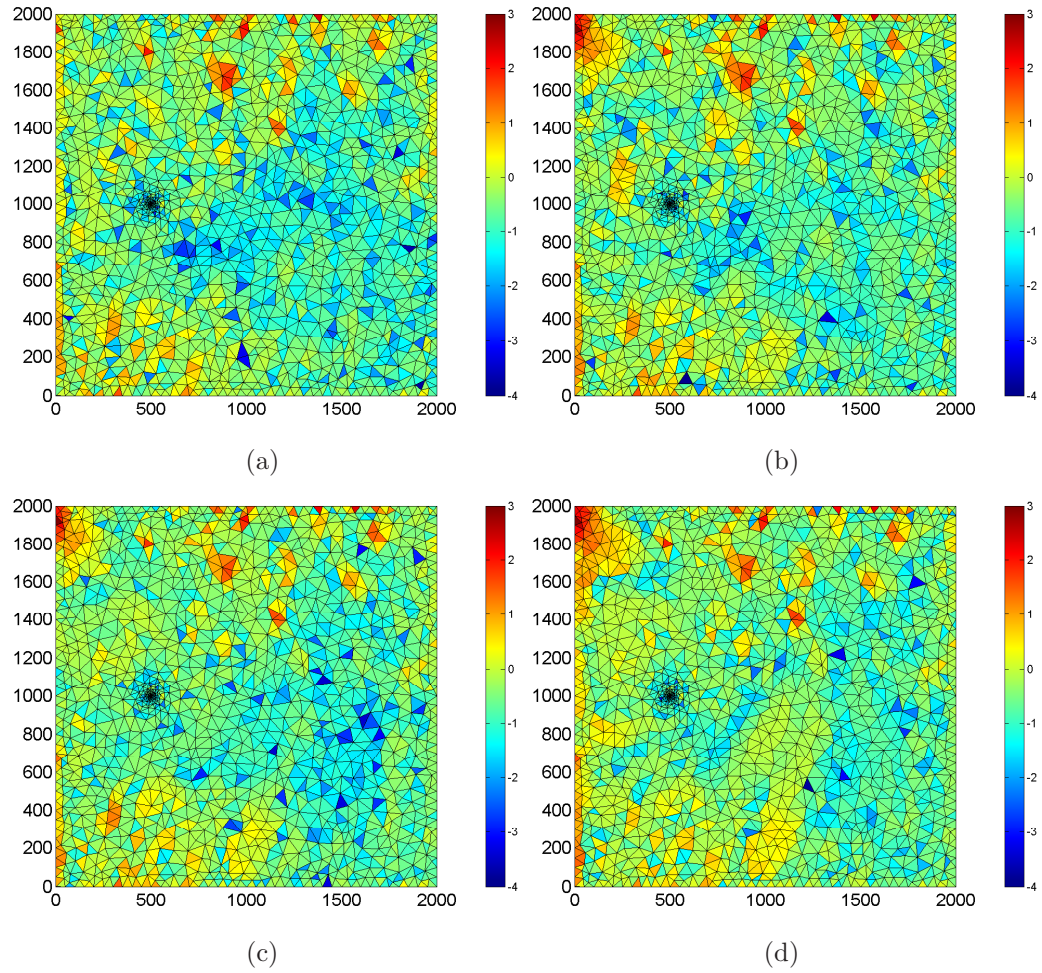


Figure 6.3: Erreur relative d'estimation des gradients pour les champs $\hat{h}$ des scénarios piézométriques 2 à 5. (a) à (d) $EAR(\nabla\hat{h}, \nabla h^R)$ pour les scénarios piézométriques 2 à 5.

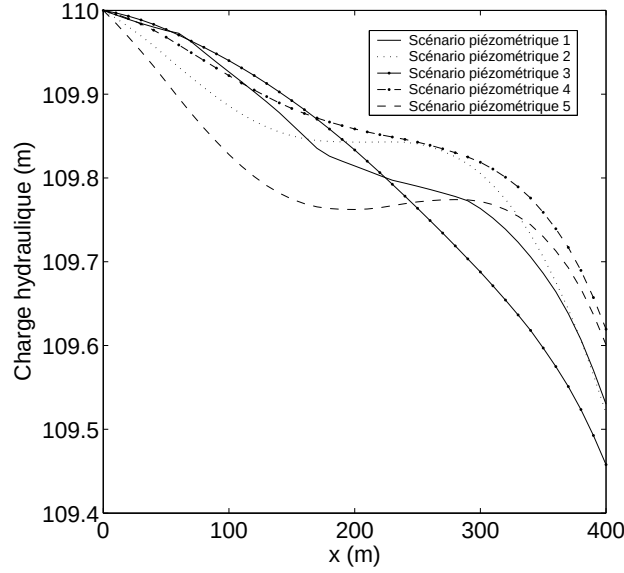


Figure 6.4: Variation de la charge hydraulique à partir de la frontière Γ_1 à Γ_4 pour $y=1000$ m.

6.1.2 Statistiques de reconstruction

Les différentes statistiques de reconstruction sont présentées au tableau 6.2. Pour les inversions réalisées en régime permanent, le conditionnement aux charges permet une diminution de l'erreur initiale (0.8902) de reconstruction de l'ordre de 35% à 54%. Le meilleur résultat est obtenu lorsque les inversions sont réalisées avec les charges de référence (scénario piézométrique 1). L'erreur de reconstruction du *SP* 2 est statistiquement égale à celle des scénarios piézométriques 3, 4 et 5. Cependant, l'erreur de reconstruction associée au *SP* 5 est statistiquement plus élevée que celle du *SP* 3, qui est elle-même significativement supérieure au $EMAE(Y^{30}, Y^R)$ du *SP* 1. Dans l'ensemble, il y a donc une corrélation entre le nombre de mesures piézométriques (*i.e.* la qualité de la carte de charges utilisée lors de l'inversion) et la qualité de la reconstruction du champ de paramètres.

Les corrélations moyennes ont également profité des inversions réalisées en régime permanent. Initialement de 0.5320, les corrélations finales sont comprises entre 0.7348 et 0.8850. Les tests d'égalités des moyennes des corrélations indiquent que les corrélations des scénarios piézométriques 2 à 4 et 3 à 5 sont statistiquement équivalentes

TAB. 6.2: Statistiques de reconstruction pour les scénarios 1 à 10.

Scénario	$EMAE(Y^{30}, Y^R)$	$Corr(Y^{30}, Y^R)$	$\bar{Y}^{30}$
piézométrique	$\log_{10}(m^2/s)$		$\log_{10}(m^2/s)$
1	0.4100 (0.1201)	0.8850 (0.0660)	-3.5712 (0.1433)
2	0.5570 (0.0954)	0.7563 (0.0761)	-3.6853 (0.1482)
3	0.5495 (0.0872)	0.7424 (0.0690)	-3.6270 (0.1423)
4	0.5667 (0.0919)	0.7353 (0.0796)	-3.6101 (0.1441)
5	0.5749 (0.0818)	0.7348 (0.0667)	-3.6144 (0.1428)
6	0.3857 (0.1102)	0.9034 (0.0555)	-3.5094 (0.1409)
7	0.4930 (0.0781)	0.8023 (0.0576)	-3.5537 (0.1342)
8	0.4921 (0.0805)	0.8011 (0.0588)	-3.5143 (0.1387)
9	0.5125 (0.0841)	0.7842 (0.0680)	-3.4988 (0.1382)
10	0.5307 (0.0777)	0.7739 (0.0619)	-3.4646 (0.1353)

entre elles alors que la corrélation du *SP* 1 est significativement plus élevée. Dans l'ensemble, on observe une amélioration significative des corrélations avec le champ de référence en allant des scénarios piézométriques 5 à 1. Celles-ci bénéficient donc d'une meilleure caractérisation de h^R .

Visuellement, l'inversion permet d'améliorer l'identification des variogrammes pour tous les scénarios piézométriques (voir figure 6.5). Néanmoins, l'inversion semble permettre une meilleure identification du variogramme de T dans le sens de l'écoulement régional (figures 6.5(a) et 6.5(c)).

Pour l'ensemble des scénarios piézométriques, la moyenne des champs calibrés est similaire à celle du champ de référence ($\bar{Y}^R = -3.63$). On observe cependant un léger biais pour les scénarios piézométriques 6 à 10.

L'ajustement des charges en régime transitoire (*SP* 6 à 10) a engendré une diminution de l'erreur de reconstruction de 40% à 57% par rapport à la valeur initiale de ($EMAE(Y^i, Y^R)$). Bien que les erreurs associées aux *SP* 7 à 9 et 9 et 10 soient statistiquement équivalentes les unes aux autres, le $EMAE(Y^{30}, Y^R)$ du scénario

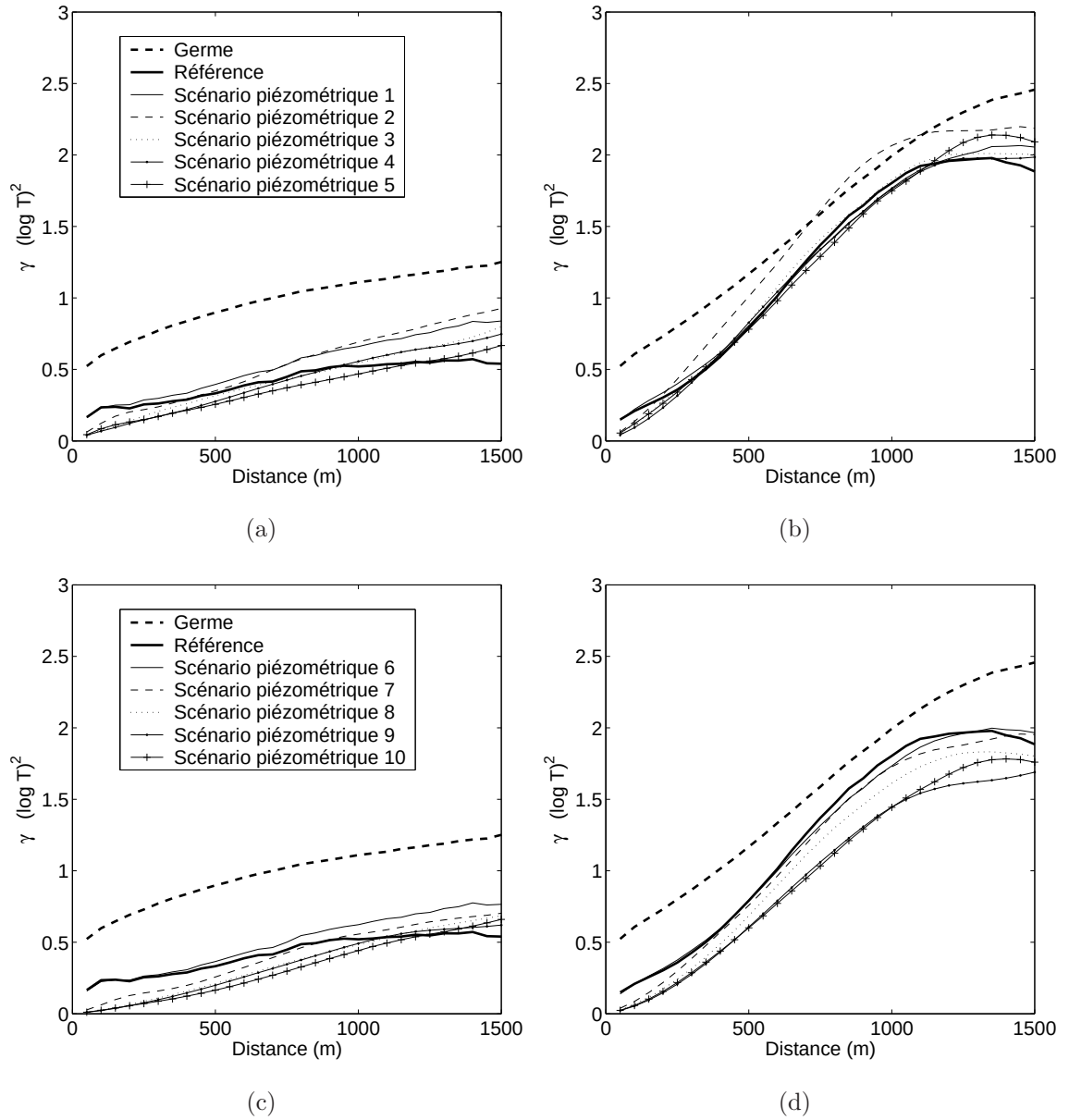


Figure 6.5: Variogrammes moyens des germes, du modèle de référence et des champs obtenus après inversion $(\log_{10} m^2/s)^2$. Ligne du haut : Scénarios piézométriques 1 à 5, ligne du bas : Scénarios piézométrique 6 à 10. Colonne de gauche : direction est-ouest, colonne de droite : direction nord-sud.

piézométrique 6 est significativement plus faible que celui du *SP* 8, qui est lui-même plus faible que l'erreur associée au *SP* 10. On observe donc, dans l'ensemble, une augmentation significative de l'erreur de reconstruction entre les scénarios 6 à 10. À nouveau, la meilleure reconstruction est obtenue lorsque l'inversion est réalisée avec les charges hydrauliques réelles (*SP* 6). À nombre de piézomètres égal, l'erreur de reconstruction est significativement plus faible après les inversions en régime transitoire qu'après les inversions en régime permanent.

L'inversion transitoire a également permis une amélioration des corrélations. Celles-ci sont passées de 0.5320 à une corrélation finale comprise entre 0.7739 et 0.9034. Les tests d'égalités des moyennes des corrélations indiquent que les corrélations des *SP* 7 et 8; 8 et 9 et 9 et 10 sont statistiquement équivalentes au niveau $\alpha = 0.025$. Globalement, on observe néanmoins une amélioration significative de la corrélation avec la diminution de l'erreur d'estimation de h^R . À nouveau, on note une amélioration significative des corrélations en passant du régime permanent au régime transitoire.

6.2 Ajustement des charges hydrauliques

6.2.1 Exemples d'inversion en présence d'erreurs d'estimation sur h^R

Les charges obtenues en solutionnant le problème direct avec les transmissivités des figures 6.1 et 6.2 sont présentées aux figures 6.6 et 6.7. Plutôt que de reproduire le champ de référence, le champ optimisé ressemble davantage au champ $\hat{h}$ utilisé lors de l'inversion (comparer avec les figures 3.13 et 3.14). Ceci est particulièrement apparent pour les scénarios piézométriques 1 et 6. Pour ces scénarios, l'algorithme a engendré un champ de T plus hétérogène et les discontinuités dans le champ h^R ont pu être reproduites.

Par ailleurs, pour les *SP* utilisant des charges krigées, même si les charges de référence ne sont pas reproduites sur tout le domaine, les charges hydrauliques mesurées aux piézomètres sont bien ajustées par le modèle après 30 itérations (figures 6.8 et 6.9). L'erreur moyenne d'ajustement pour ces exemples est comprise entre 2.4cm et 7.89cm.

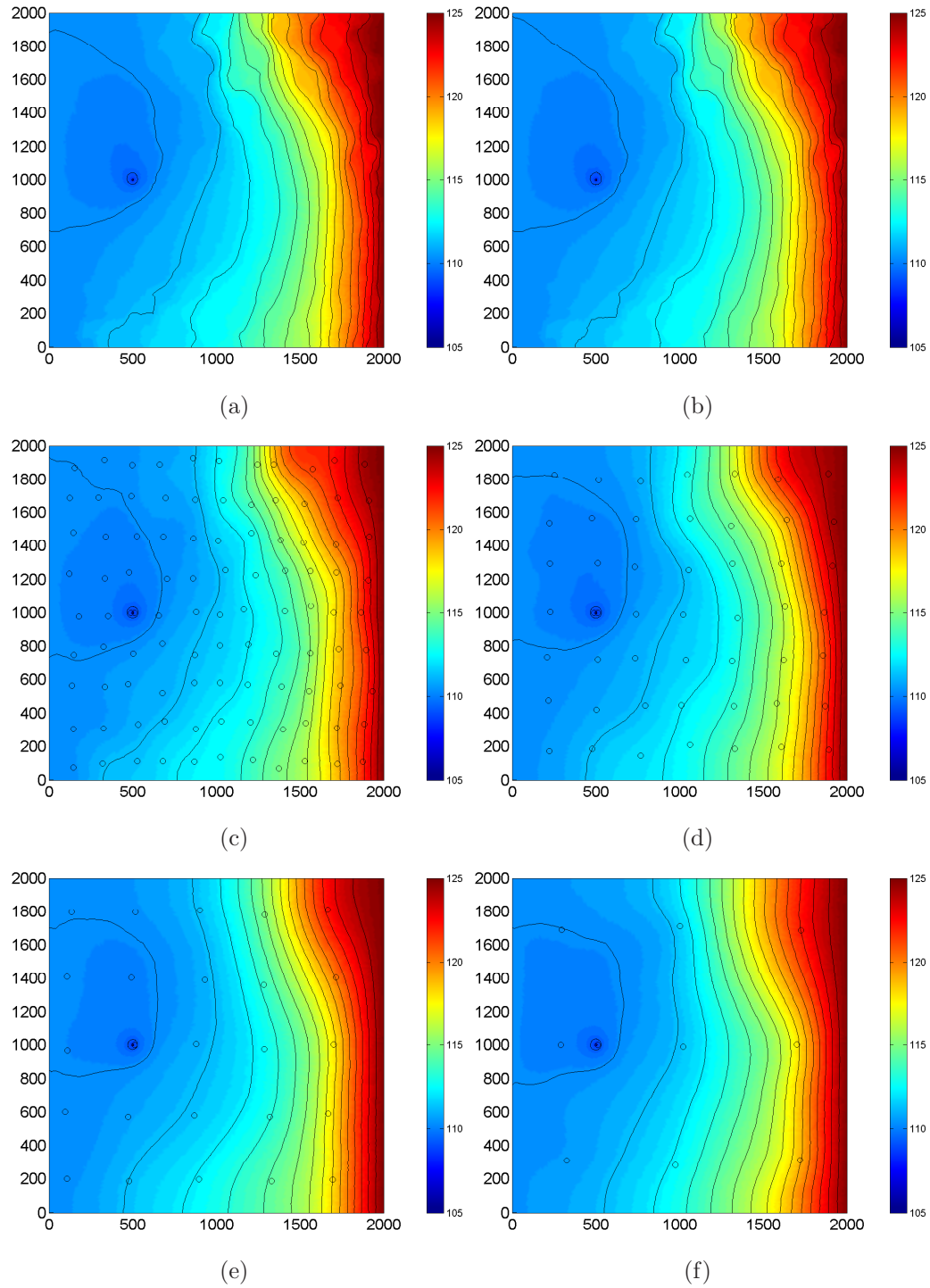


Figure 6.6: Champs de charges obtenus après calibration pour les scénarios piézométriques 1 à 5 avec le germe 96 (m). (a) Champ de référence, (b) à (f) champs obtenus pour les scénarios piézométriques 1 à 5.

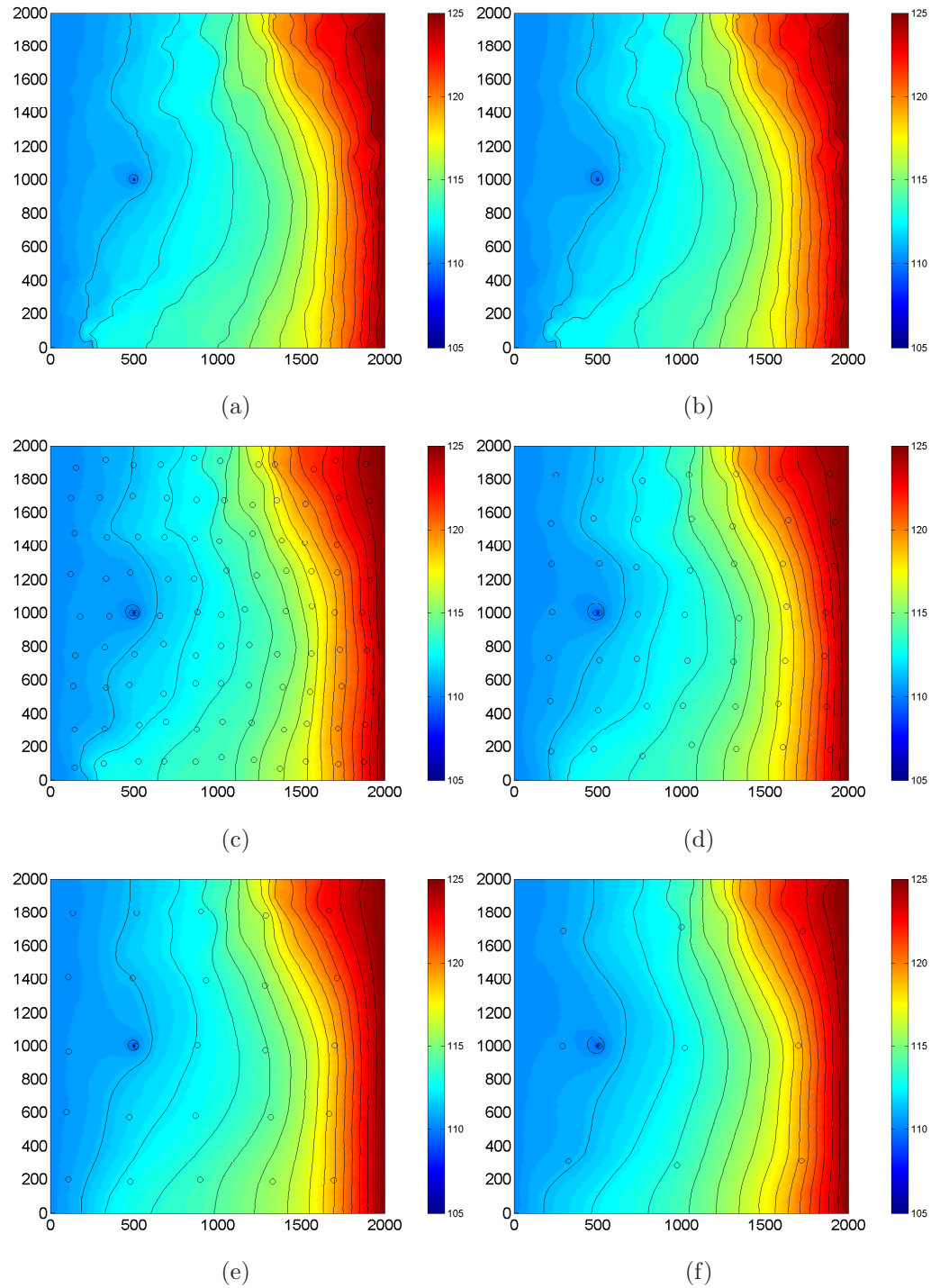


Figure 6.7: Champs de charges obtenus après calibration pour les scénarios piézométriques 6 à 10 avec le germe 96 (m) à $t = 0.12d$.(a) Champ de référence,(b) à (f) champs obtenus pour les scénarios piézométriques 6 à 1.

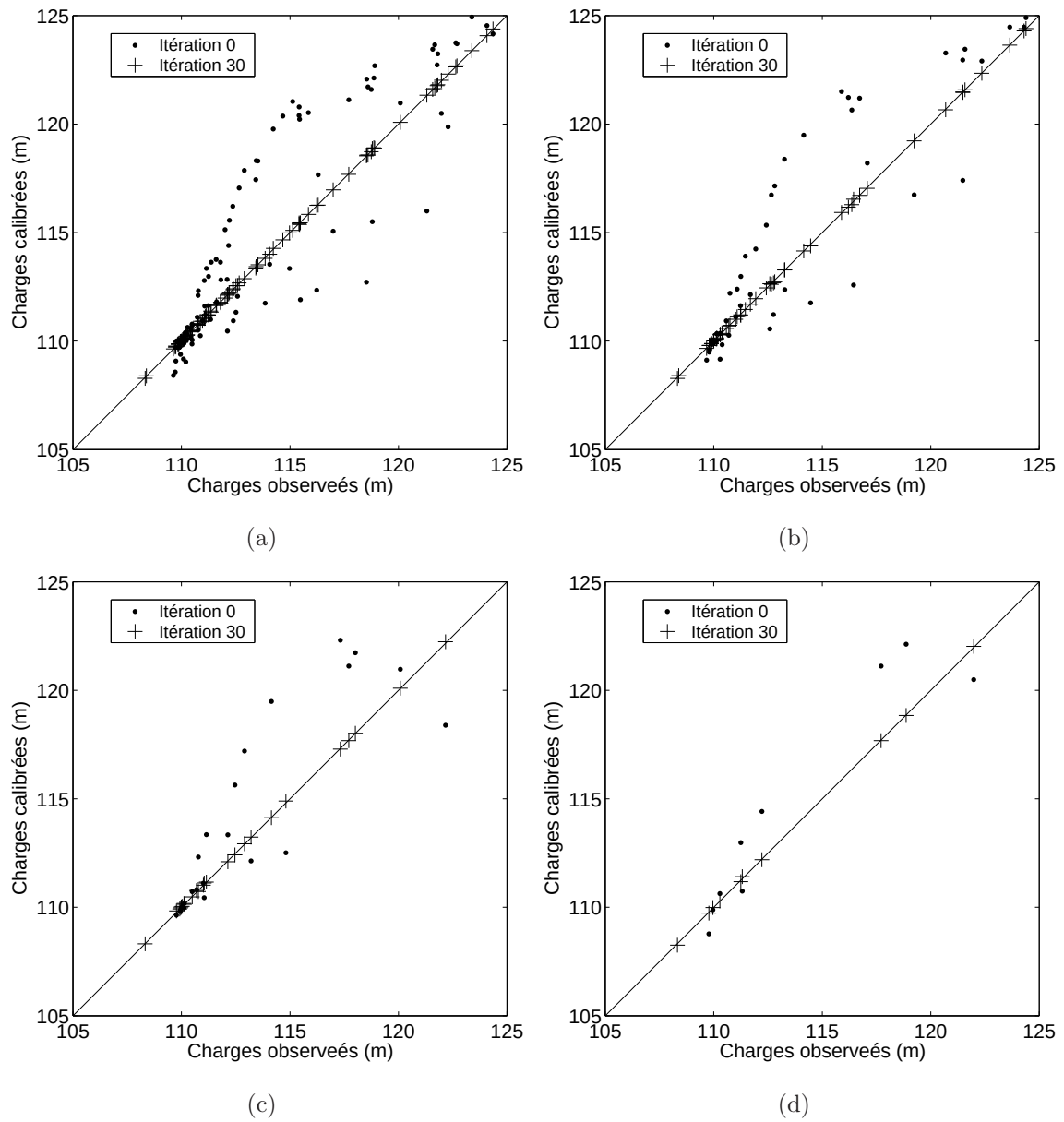


Figure 6.8: Comparaison des charges hydrauliques observées et ajustées pour les scénarios piézométriques 2 à 5 avec le germe 96. (a) à (d) scénarios piézométriques 2 à 5.

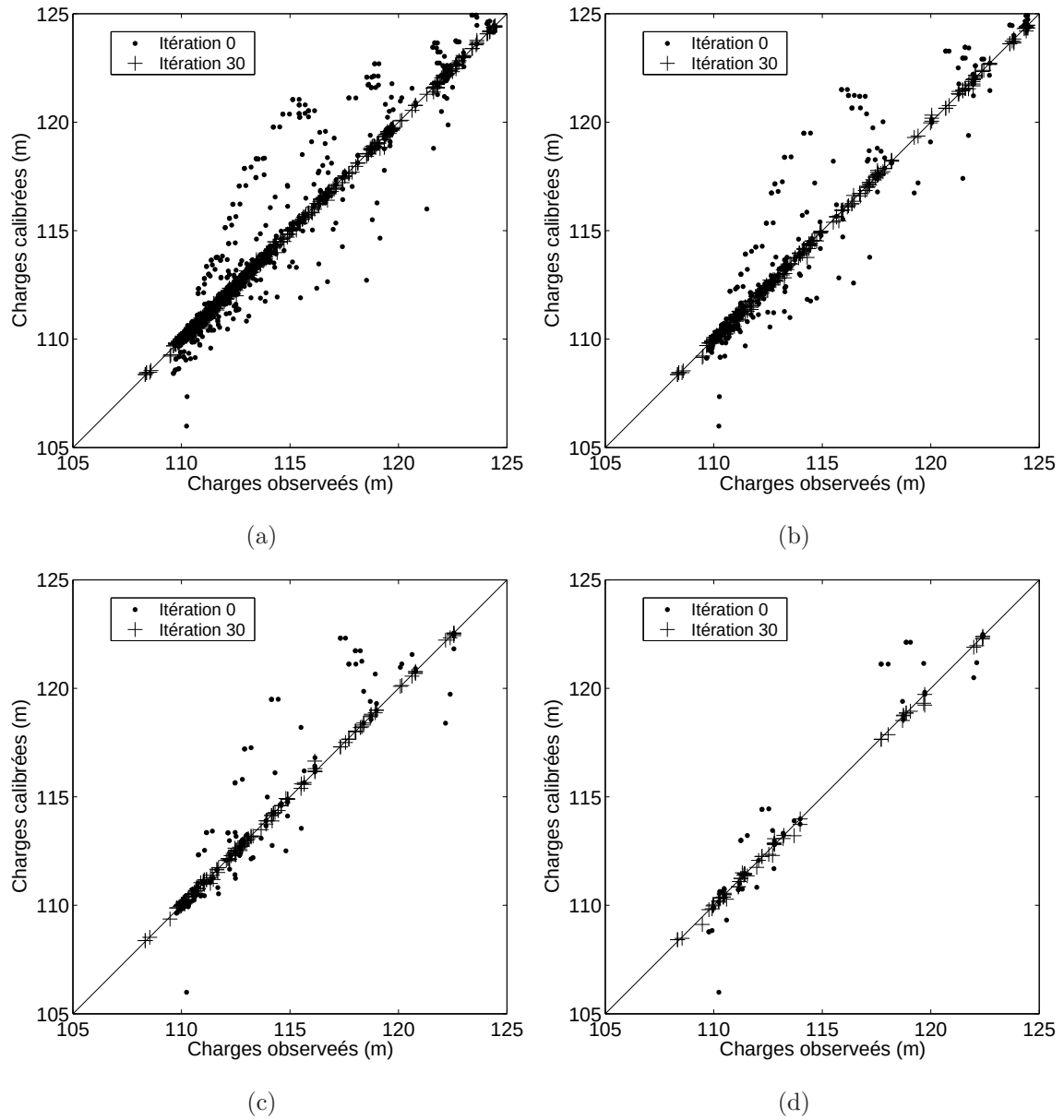


Figure 6.9: Comparaison des charges hydrauliques observées et ajustées pour les scénarios piézométriques 7 à 10 avec le germe 96. (a) à (d) scénarios piézométriques 7 à 10. Les charges observées à $t = 0.01, 0.12, 1.2, 11.6$ et $116d$ sont représentées.

6.2.2 Statistiques d'ajustement

Les statistiques d'ajustement des charges sont présentées au tableau 6.3. Pour les inversions en régime permanent, l'inversion permet un calage moyen des observations piézométriques ($EMAE(h_{Obs}^{30}, h_{Obs}^R)$) compris entre 2.91cm et 4.95cm. L'erreur d'ajustement pour les scénarios piézométriques 2, 3 et 4 est néanmoins statistiquement équivalente. L'erreur moyenne diminue ou demeure stationnaire avec l'augmentation du nombre de piézomètres. Il y a donc une amélioration de la capacité de la méthode de l'estimation successive des flux à caler les charges avec l'augmentation du nombre de charges à caler. Ceci constitue un trait distinctif de l'approche. En effet, on rapporte généralement dans la littérature (Capilla *et al.*, 1997; Gagnon, 1998) une diminution de la qualité de l'ajustement avec une augmentation du nombre de charges à caler. En régime transitoire, à échantillonnage égal de h^R , l'erreur d'ajustement est sensiblement plus élevée. Les erreurs pour les *SP* 6 et 7, 8 et 9 sont statistiquement équivalentes les unes aux autres. On observe toutefois le même phénomène qu'en régime permanent, à savoir une amélioration ou une stabilité de l'ajustement avec une augmentation de l'information piézométrique.

À l'exception des statistiques du scénario 2, les erreurs d'ajustement du champ $\hat{h}$ utilisé lors de l'inversion sont significativement croissantes pour les scénarios 1, 3, 4 et 5 respectivement. Qui plus est, une corrélation de 0.9903 est obtenue entre $EMAE(h^{30}, \hat{h})$ et $EMAE(h_{Obs}^{30}, h_{Obs}^R)$. Il y a donc un lien direct entre l'ajustement des observations piézométriques et l'ajustement du champ $\hat{h}$ complet. En régime transitoire, les résultats des scénarios piézométriques 6 et 7, 7 et 8, 8 et 9 ne sont pas significativement différents. On observe par contre une tendance significative à la hausse entre les scénarios piézométriques 6 à 10. Pour une erreur d'estimation équivalente, l'ajustement des charges hydrauliques en régime transitoire (*SP* 6 à 10) est significativement moins bon que pour les *SP* 1 à 5.

On observe un accroissement significatif du $EMAE(h^{30}, h^R)$ entre les scénarios piézométriques 1 à 5. La méthode reproduit donc davantage le champ $\hat{h}$ utilisé lors de l'inversion que le champ de référence h^R . En régime transitoire, à l'exception des scénarios piézométriques 8 et 9 qui semblent statistiquement égaux, on observe

TAB. 6.3: Statistiques d'ajustement des charges pour les scénarios 1 à 10 et écart-type correspondant ().

Scénario	$EMAE(h_{Obs}^{30}, h_{Obs}^R)$	$EMAE(h^{30}, \hat{h})$	$EMAE(h^{30}, h^R)$	$MAE(\hat{h}, h^R)$
piézométrique	(m)	(m)	(m)	(m)
1	0.0291 (0.0123)	0.0276 (0.0117)	0.0276 (0.0118)	0
2	0.0364 (0.0070)	0.0358 (0.0100)	0.1186 (0.0069)	0.1180
3	0.0354 (0.0138)	0.0337 (0.0123)	0.1610 (0.0068)	0.1594
4	0.0387 (0.0139)	0.0380 (0.0125)	0.1704 (0.0069)	0.1764
5	0.0495 (0.0147)	0.0457 (0.0098)	0.3057 (0.0114)	0.3269
6	0.0769 (0.0341)	0.0732 (0.0325)	0.0732 (0.0325)	0
7	0.0852 (0.0298)	0.0769 (0.0283)	0.1128 (0.0249)	0.1210
8	0.0942 (0.0308)	0.0833 (0.0285)	0.1360 (0.0238)	0.1613
9	0.0948 (0.0328)	0.0854 (0.0307)	0.1353 (0.0257)	0.1770
10	0.1243 (0.0289)	0.1022 (0.0247)	0.2007 (0.0195)	0.3242

un accroissement de l'erreur d'ajustement du champ de référence pour les scénarios piézométriques 6 à 10. Cet accroissement est corrélé (0.9991) avec l'erreur d'estimation des charges ($EMAE(\hat{h}, h^R)$).

Le tableau 6.4 présente l'effet de pépité moyen des champs de transmissivités à l'itération 30 ($C_{0Y^{30}}$) et l'effet de pépité des champs de charges hydrauliques $\hat{h}$ ($C_{0\hat{h}}$). Ceux-ci sont une mesure du lissage des champs. ¹ Puisqu'une corrélation de 0.6165 entre $C_{0Y^{30}}$ et $C_{0\hat{h}}$ est observée, il existe donc un lien entre le lissage de T^{30} et le lissage du champ utilisé lors de l'inversion ($\hat{h}$).

¹Pour l'obtention de $C_{0\hat{h}}$, la dérive induite par les conditions frontières et le pompage du puits a été soustraite aux champs $\hat{h}$. L'effet de pépité a été extrait du variogramme calculé à partir des résidus obtenus après soustraction de la dérive.

TAB. 6.4: Effet de pépite moyen des champs de transmissivités ($C_{0Y^{30}}$) et effet de pépite des champs de charges hydrauliques $\hat{h}$ ($C_{0\hat{h}}$).

Scénario piézométrique	$C_{0Y^{30}}$ ($\log_{10}(m^2/s)$)	$C_{0\hat{h}}$ (m^2)
1	0.1776 (0.0155)	0.0738
2	0.0762 (0.0250)	0.0696
3	0.0682 (0.0169)	0.0687
4	0.0579 (0.0159)	0.0671
5	0.0643 (0.0141)	0.0549
6	0.1685 (0.0088)	0.0603
7	0.0308 (0.0063)	0.0563
8	0.0186 (0.0064)	0.0550
9	0.0172 (0.0070)	0.0532
10	0.0239 (0.0086)	0.0440

6.3 Périmètres de protection stochastiques

La détermination des périmètres de protection d'un ouvrage de captage d'eau potable nécessite de déterminer les temps de transfert au puits. Ceux-ci sont obtenus en effectuant la trajectographie de particules à l'aide d'un modèle numérique préalablement calibré. Le temps associé à la calibration du modèle étant habituellement élevé, seuls quelques scénarios de recharge, de porosité ou de conditions frontières sont généralement évalués ce qui ne permet pas de balayer l'ensemble des solutions possibles. La plage des solutions évaluées étant restreinte, des situations potentiellement dangereuses pour la prise d'eau potable peuvent passer inaperçues.

Par opposition à ces périmètres de protection dits *déterministes*, les périmètres de protection *stochastiques* utilisent l'ensemble des champs de T et de h obtenus après calibration. Pour chaque solution, les différents périmètres de protection sont calculés et une probabilité de capture pour chaque point du domaine est facilement obtenue. Afin d'illustrer les avantages de cette approche, on présente dans cette section les périmètres de protection stochastiques pour un temps $t_{CAP} \leq 3$ ans.

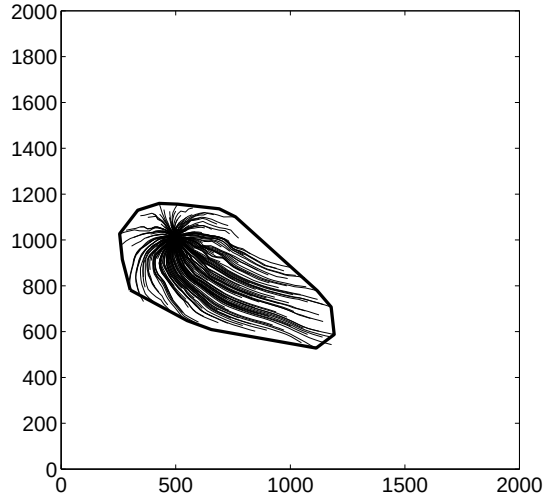


Figure 6.10: Trajectographie des particules ayant un temps de transfert $t_{CAP} \leq 3$ ans pour le modèle de référence.

L'approche utilisée pour l'obtention des périmètres de protection stochastiques est la suivante. Pour chaque paire (T^{30}, h^{30}) , une particule non-réactive est injectée au centre de chaque élément fini. À l'aide de l'algorithme décrit à la section 3.1.5, la trajectoire et le temps de transfert de chaque particule entre son point d'injection et son point de sortie sont calculés. Si la position finale de la particule se situe à l'intérieur du puits et que le temps de transfert est inférieur à 3 ans, l'élément contenant le point de départ se voit attribuer une valeur de 1 (0 sinon). Le processus est répété pour chacune des 100 inversions et la moyenne des indicatrices de chaque élément correspond alors à la probabilité de capture de la particule. On suppose ici une porosité effective uniforme de $n_e = 0.3$ et une épaisseur saturée de $b = 10m$. La trajectographie du modèle de référence pour un temps de transfert inférieur à 3 ans est présentée à la figure 6.10.

Afin de montrer l'apport de l'inversion à la détermination des périmètres de protection et d'illustrer la non-unicité des solutions au problème inverse, la trajectographie des particules ($t_{CAP} \leq 3$ ans) pour les inversions 63 et 71 est présentée à la figure 6.11. Même si le conditionnement aux charges permet une amélioration de la délimitation des périmètres de protection, ceux-ci sont assez différents du périmètre de protection de référence. La non-unicité des solutions au problème inverse ne permet pas une reproduction parfaite des temps de transfert et de la trajectographie de référence. D'où la différence observée entre les solutions 63 et 71.

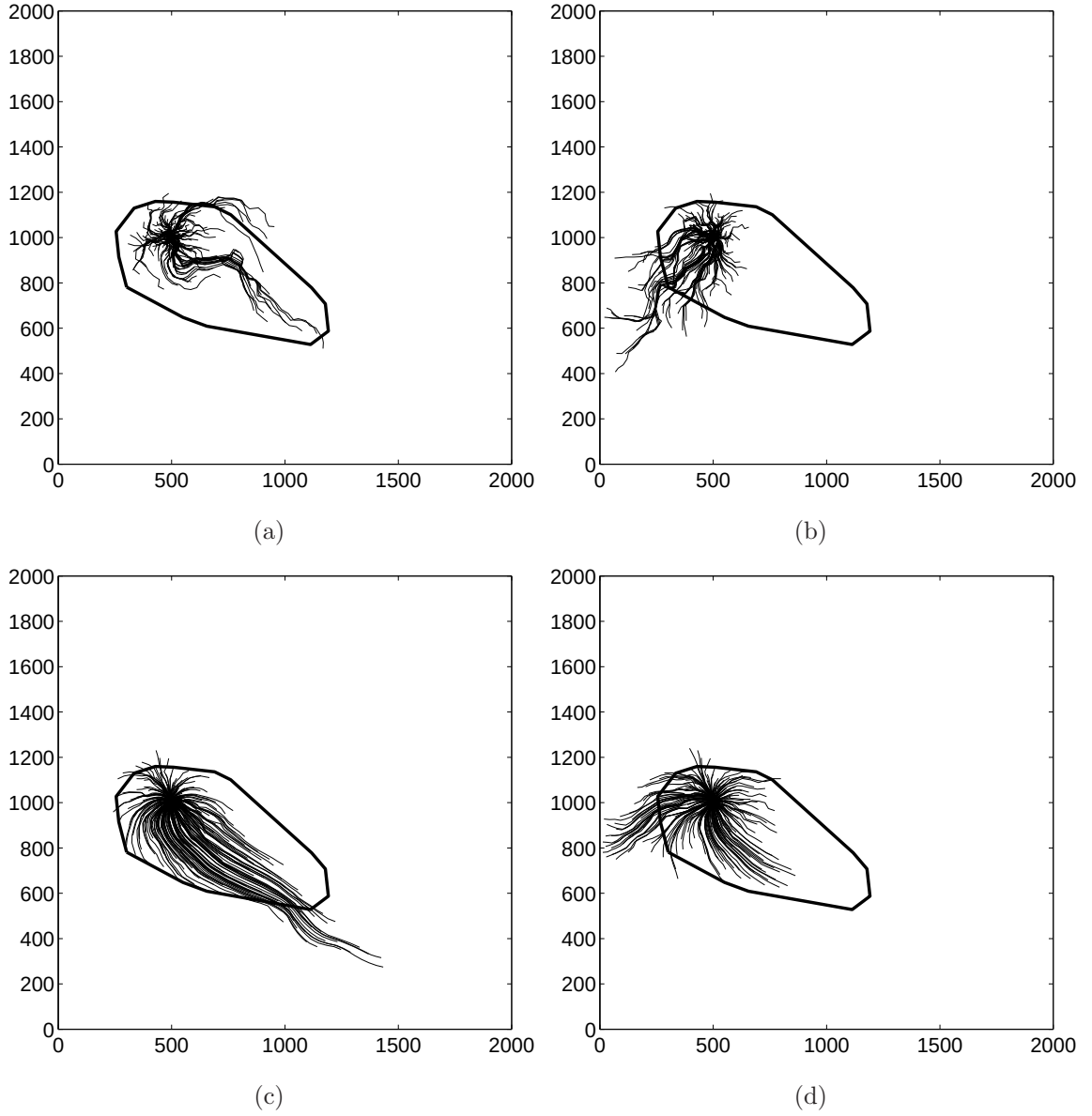


Figure 6.11: Trajectographie des particules ayant un temps de transfert $t_{CAP} \leq 3$ ans pour les germes 63 et 71 et périmètre de protection de référence (-). Trajectographie préalablement à l'inversion pour les germes (a) 63 et (b) 71. Trajectographie après inversion pour les germes (c) 63 et (d) 71.

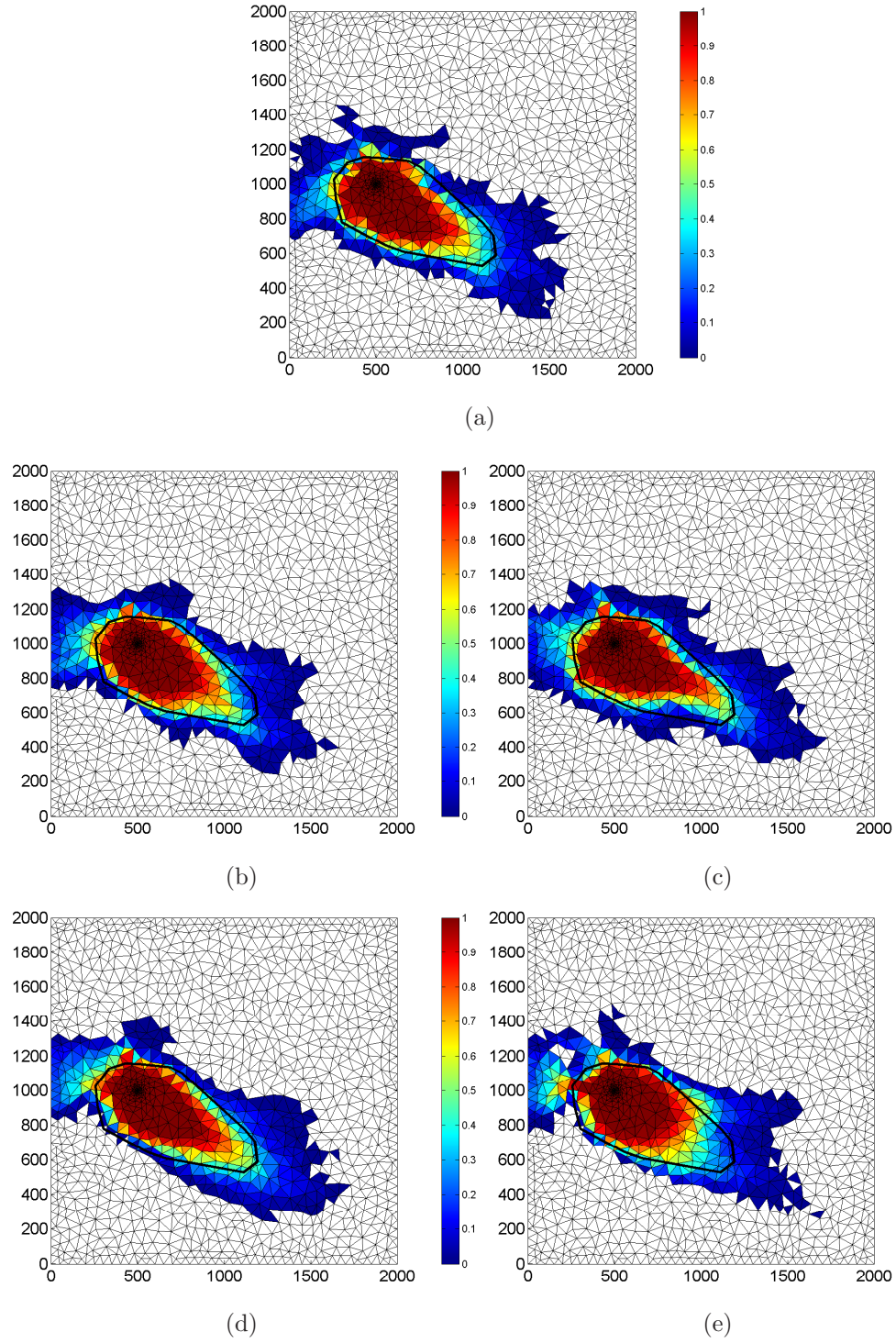


Figure 6.12: P rim tre de protection stochastique pour une probabilit  de capture de 3 ans ($P_{Cap}(t \leq 3ans)$). (a)   (e) sc narios pi zom triques 1   5.

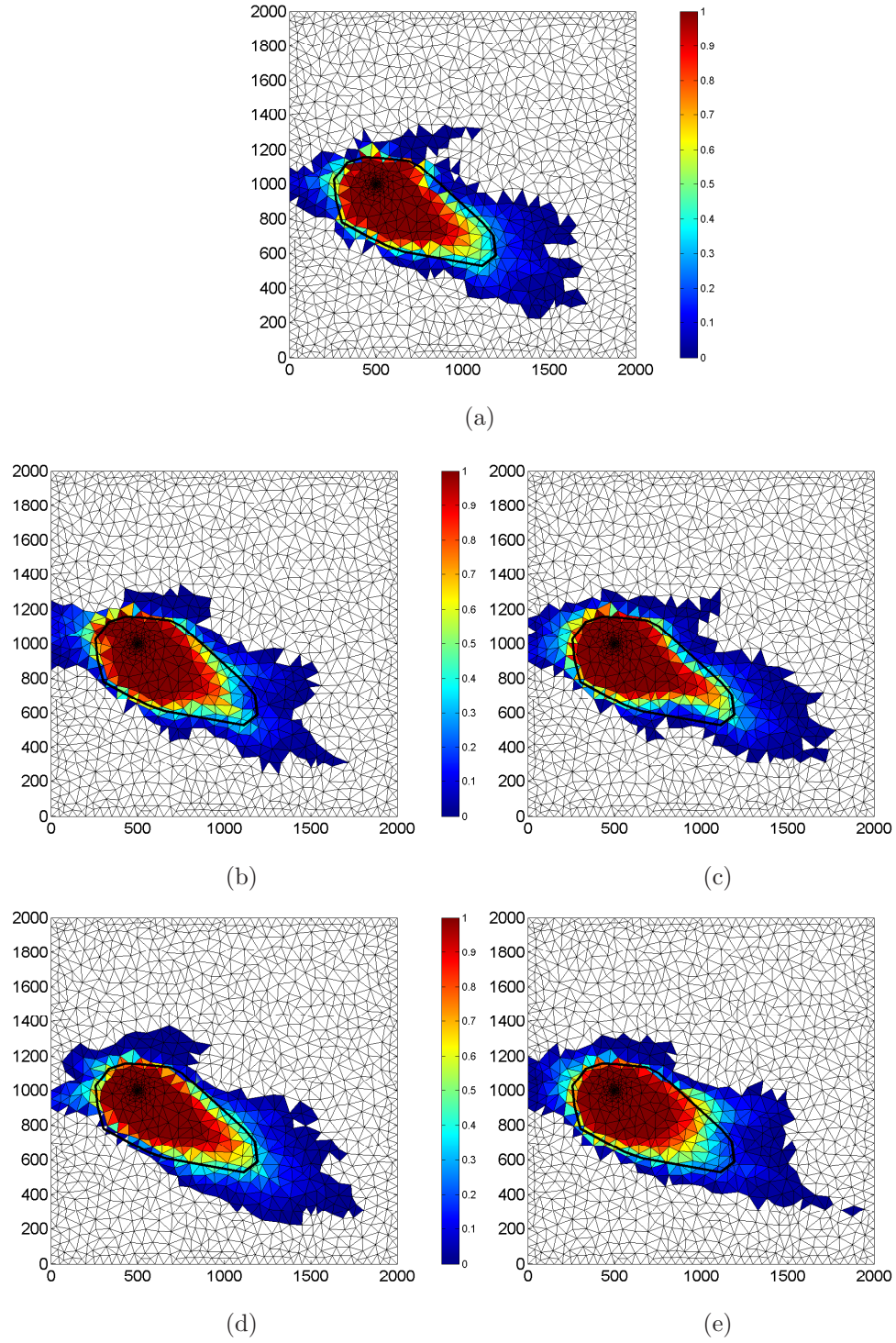


Figure 6.13: P rim tre de protection stochastique pour une probabilit  de capture de 3 ans ($P_{Cap}(t \leq 3ans)$). (a)   (e) sc narios pi zom triques 6   10.

Les périmètres de protection stochastiques pour les scénarios piézométriques 1 à 5 et 6 à 10 sont illustrés aux figures 6.12 et 6.13 respectivement. L'erreur d'identification de la probabilité de capture est, quand à elle, présentée au tableau 6.5. Celle-ci correspond à la somme pondérée de $1 - P_{CAP}(x, y; t \leq 3ans)$, $x, y \in CAP$ pour les éléments situés à l'intérieur du périmètre de référence.

Visuellement, on observe que les limites correspondant à une probabilité de capture $p > 0$ dépassent toujours le véritable périmètre de protection et que les probabilités de capture de 60% sont toujours à l'intérieur du véritable périmètre de protection. Généralement, la surface affectée d'une incertitude est légèrement plus faible en régime transitoire qu'en régime permanent. On note aussi que l'incertitude s'exprime surtout dans la direction de l'écoulement régional.

Dans l'ensemble, l'erreur est plus faible en régime transitoire qu'en régime permanent. Les variances relativement élevées associées aux erreurs proviennent du fait que la distribution des temps de transfert pour un élément donné est très étalée. Si on exclut le scénario piézométrique 2, on obtient une augmentation significative de l'erreur entre les scénarios piézométriques 1 à 5. Ce phénomène est moins apparent pour les inversions transitoires. Il semble que la détermination des périmètres de protection stochastiques bénéficie plus d'un accroissement de la couverture piézométrique que d'un conditionnement aux charges transitoires.

6.4 Discussion

À la lumière des résultats présentés dans ce chapitre, il apparaît clairement que la reconstruction du champ de transmissivités et l'ajustement des charges sont très adéquats même lorsqu'une estimation de la carte piézométrique est utilisée. Nos résultats indiquent toutefois que la qualité de l'inversion croît avec le nombre de mesures piézométriques à calibrer. L'augmentation de la couverture piézométrique permet une diminution de l'erreur d'estimation sur h^R et une meilleure reproduction du champ de gradients ∇h^R utilisé lors de l'inversion. Il s'en suit une meilleure reconstruction de T et une meilleure reproduction des charges aux points de mesures.

TAB. 6.5: Erreur d'identification de la probabilité de capture.

Scénario piézométrique	$E[1 - P_{CAP}(x, y; t \leq 3ans)]$
1	0.2087 (0.0851)
2	0.2296 (0.0922)
3	0.2237 (0.0882)
4	0.2366 (0.0827)
5	0.2506 (0.0952)
6	0.1721 (0.0617)
7	0.1970 (0.0665)
8	0.1932 (0.0683)
9	0.1939 (0.0585)
10	0.2068 (0.0731)

Le fait que l'approche proposée permette un meilleur ajustement des mesures piézométriques lorsque celles-ci sont nombreuses constitue un avantage important de l'algorithme par rapport aux autres méthodes d'inversion reconnues. En effet, Capilla *et al.* (1997) et Gagnon (1998) font état d'une diminution de la performance de la méthode des points maîtres avec une augmentation des mesures piézométriques à calibrer.

Nos expérimentations ont montré que l'utilisation de champs de charges krigées a favorisé l'apparition d'artéfacts et de fines bandes de T dans le champ de transmissivités calibré. Les linéaments ont profité de l'indépendance des flux hydrauliques entre des *tubes de courant* adjacents pour se développer. Ceux-ci sont plus fréquemment observés en régime permanent qu'en régime transitoire. Par ailleurs, la présence de faibles gradients hydrauliques dans le champ $\hat{h}$ a créé des zones de plus fortes transmissivités alors que les secteurs où les gradients hydrauliques étaient surestimés ont engendré des transmissivités moindres que les transmissivités de référence. L'amplitude et l'étendue du phénomène sont somme toutes limitées.

Nos résultats indiquent que la méthode a tendance à reproduire le champ de charges ($\hat{h}$) utilisé pour faire l'inversion plutôt que le champ de charges de référence (h^R). Néanmoins, l'approche reproduit les mesures piézométriques si celles-ci sont contenues dans le champ $\hat{h}$. Puisque l'ajustement n'est pas fait directement sur les mesures piézométriques mais plutôt sur $\hat{h}$, le calage parfait des observations n'est possible que si la surface $\hat{h}$ passe par les mesures. Si des erreurs de mesures sont suspectées, celles-ci peuvent être modélisées lors du krigage des charges et l'erreur minimale d'ajustement tendra alors vers $h_{Obs} - \hat{h}_{Obs}$. Cette approche est d'ailleurs recommandée puisqu'elle permet de tenir compte aisément des erreurs de mesure.

Par ailleurs, les charges hydrauliques sont krigées aux nœuds des éléments finis et les charges aux points de mesures sont obtenues à l'aide des fonctions d'interpolation des éléments finis. Des erreurs d'estimation liées aux fonctions d'interpolation peuvent être introduites. Cet effet indésirable s'estompe lorsque le nombre d'éléments finis à proximité du point de mesure augmente.

La corrélation observée entre C_{0Y30} et $C_{0\hat{h}}$ témoigne d'un aspect important de l'algorithme. En l'absence de mesures de T , le degré d'hétérogénéité des transmissivités calibrées sera fonction uniquement des variations brusques de $\hat{h}$. En d'autres termes, plus le champ de charges utilisé pour l'inversion sera lisse, moins le champ de paramètres optimisés sera hétérogène. Un champ de T hétérogène sera obtenu seulement si les charges utilisées lors de l'inversion témoignent de la présence de discontinuités dans T ou si le champ initial de T renferme lui-même des zones hétérogènes.

Par comparaison aux charges hydrauliques, l'erreur de reconstruction sur T demeure élevée. L'explication de ce phénomène réside essentiellement dans le fait qu'une erreur sur la reproduction du gradient engendre une erreur proportionnelle sur la transmissivité. Néanmoins, nos résultats se comparent à ceux présentés par Hendricks-Franssen et Gomez-Hernandez (2003) et Zimmerman *et al.* (1998) qui font état d'erreurs finales équivalentes, voire supérieures à celles présentées dans ce chapitre. Cette comparaison est sujette à caution car les erreurs initiales présentées par ces auteurs sont inconnues et dépendent fortement de la situation particulière modélisée.

Les expérimentations réalisées montrent que la reconstruction du champ de paramètres et la détermination des périmètres de protection bénéficient de l'information supplémentaire contenue dans la variation temporelle des charges. Nos résultats montrent qu'à échantillonnage égal de h^R , la reconstruction est significativement meilleure lorsque l'inversion est réalisée en régime transitoire et ce, même si les charges hydrauliques transitoires sont moins bien ajustées qu'en régime permanent. Cette meilleure reconstruction s'explique par deux raisons : 1 - la calibration temporelle des charges contraint davantage les transmissivités calibrées et 2 - l'utilisation de plusieurs champs de charges permet de compenser les erreurs d'interpolation introduites à l'un ou l'autre des pas de temps. Le dernier aspect est propre à la méthode de l'estimation successive des flux.

Chapitre 7

Application à l'aquifère de Lachenaie

Au cours des dernières années, le site expérimental de Lachenaie a été l'objet de nombreuses études de caractérisation (Acevedo (1996); Gagnon (1998); Gloaguen *et al.* (2001); Chapuis *et al.* (2005*a,b*)). Plus particulièrement, Gagnon (1998) a utilisé le site afin d'évaluer la performance de la méthode des points maîtres (Gomez-Hernandez *et al.*, 1997).

Dans ce chapitre, la méthode de l'estimation successive des flux est utilisée pour ajuster les mesures piézométriques rapportées par Gagnon (1998). Notre étude se veut néanmoins relativement modeste et a principalement pour but d'évaluer le comportement de la méthode d'inversion proposée dans une situation réelle d'application.

Ce chapitre se divise en trois parties. Dans un premier temps, une présentation des conditions hydrogéologiques prévalant au site et une présentation du modèle numérique utilisé sont effectuées. Dans la seconde partie du chapitre, les résultats de l'inversion sont exposés. Ceux-ci incluent une comparaison entre les conductivités hydrauliques mesurées sur le site et celles obtenues après inversion ainsi qu'une comparaison des erreurs d'ajustement des charges. Finalement, le chapitre se termine par une discussion des résultats.

7.1 Description du site

Le site expérimental de Lachenaie est situé à une cinquantaine de kilomètres au nord de Montréal (voir Chapuis *et al.* (2005b) pour la localisation du site). Le site a une superficie d'environ $100m \times 100m$ et en 1998, 48 sondages y avaient été effectués. Des piézomètres de 3.175 cm de diamètre ayant des ouvertures de 0.51mm ont été aménagés dans les sondages. À l'exception du puits situé en (-50,20), les piézomètres ne possèdent pas de massif filtrant. Dans le secteur à l'étude, les crépines sont aménagées à la base des sondages et ont des longueurs comprises entre 0.26 et 0.66 mètre.

Les sondages ont mis en évidence un aquifère à nappe libre composé d'un sable moyen contenant rarement de fines lentilles de silt (Chapuis *et al.*, 2005b). On retrouve, à une profondeur variant entre 2.6 et 4.0 mètres, des argiles marines de Champlain non-fissurées d'une conductivité hydraulique d'environ $10^{-9}m/s$. Cette unité hydrostratigraphique constitue le substratum imperméable de l'aquifère.

7.1.1 Champ piézométrique

On trouve au nord-ouest du site un plan d'eau à l'élévation 13 mètres que l'on considère en équilibre hydrostatique avec la nappe libre de l'aquifère. Cette information ainsi que le relevé piézométrique de Gagnon (1998) daté du 23 novembre 1996 ont été utilisés afin d'estimer la carte piézométrique présentée à la figure 7.1. Cette carte a été obtenue par krigeage universel avec un modèle de covariance gravimétrique ayant une portée effective de 30m, un plateau de $3.8m^2$ et un effet de pépité de $0.005m^2$. Puisque les piézomètres situés en (1,40), (1,60) et (-30,80), (-40,80) présentaient des charges identiques et que ces mesures nous semblaient incompatibles avec le régime d'écoulement du site, un effet de pépité supplémentaire de $0.01m^2$ a été ajouté à ces mesures afin d'inclure d'éventuelles erreurs de mesure (ceci expliquant pourquoi les équipotentielles apparaissent incompatibles avec ces mesures). L'erreur moyenne absolue entre les mesures piézométriques et les charges krigées aux piézomètres ($MAE(\hat{h}_{Obs}, h_{Obs}^R)$) est de $1.05cm$. On retient que 60.4% de cette valeur

provient d'une erreur de -10.50cm , -9.25cm et 4.98cm pour les piézomètres (1,40), (-30,80) et (-100,20) respectivement.

Suite à la discussion de Gagnon (1998), la mesure prise au piézomètre (20,-57) a été considérée erronée et a été retirée du jeu de données. Quelques points doublons ont été ajoutés afin d'étendre correctement les mesures piézométriques aux limites du domaine. Ceux-ci sont surtout situés au sud et au nord du domaine.

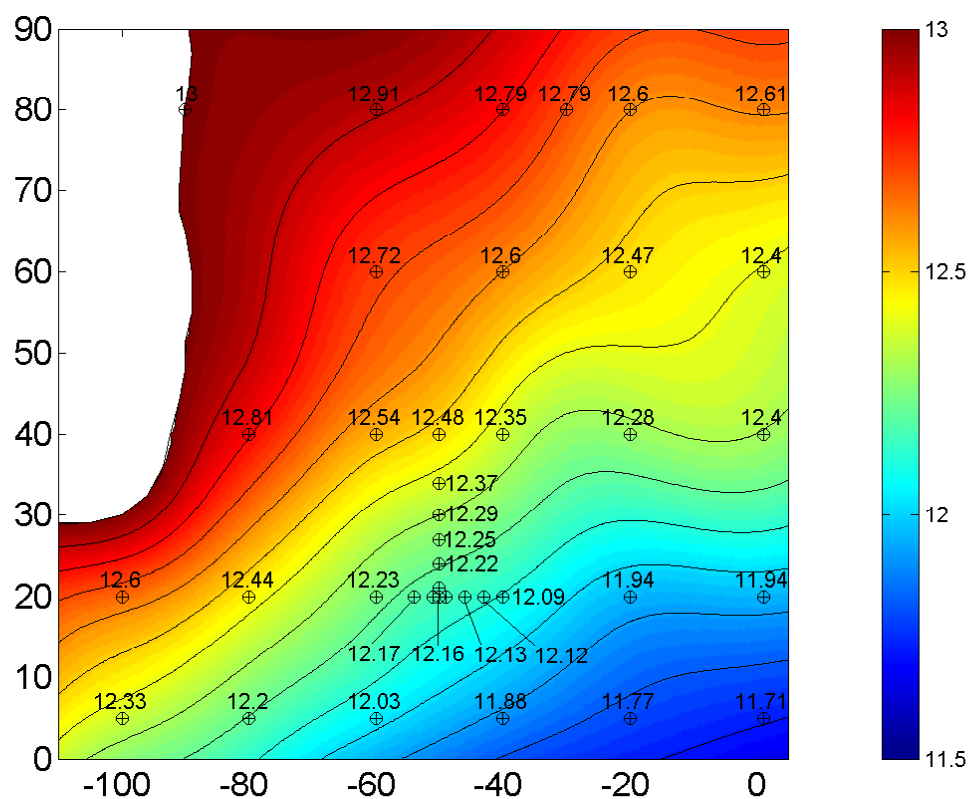


Figure 7.1: Localisation des piézomètres et carte de charges hydrauliques au site de Lachenaie à partir des mesures relevées par Gagnon (1998) le 23 novembre 1996 (m).

7.1.2 Élévation du substratum et épaisseur saturée

Les sondages effectués sur le site ont permis d'atteindre la couche d'argile à 24 reprises. La profondeur à laquelle l'interface a été atteinte a été utilisée afin de calculer le variogramme omnidirectionnel de l'élévation de l'argile (voir figure 7.2(a)) et d'estimer l'élévation du substratum (z_{Sub}) présentée à la figure 7.3(a). La profondeur du substratum au piézomètre (-49,20) étant incompatible avec les relevés géoradar effectués par Gloaguen *et al.* (2001), cette mesure n'a pas été considérée lors du krigage de z_{Sub} . Dans l'ensemble, la variation totale de z_{Sub} est inférieure à 1 mètre mais on observe tout de même de brusques variations de la surface argileuse dans le secteur du piézomètre (-50,30).

L'épaisseur saturée de l'aquifère (b) a été obtenue en soustrayant aux charges de la figure 7.1 l'élévation de l'argile ($\hat{h} - z_{Sub}$). La carte de l'épaisseur saturée est présentée à la figure 7.3(b). L'épaisseur saturée de l'aquifère est comprise entre 0.6 et 2.6 mètres et diminue assez régulièrement vers le sud-est.

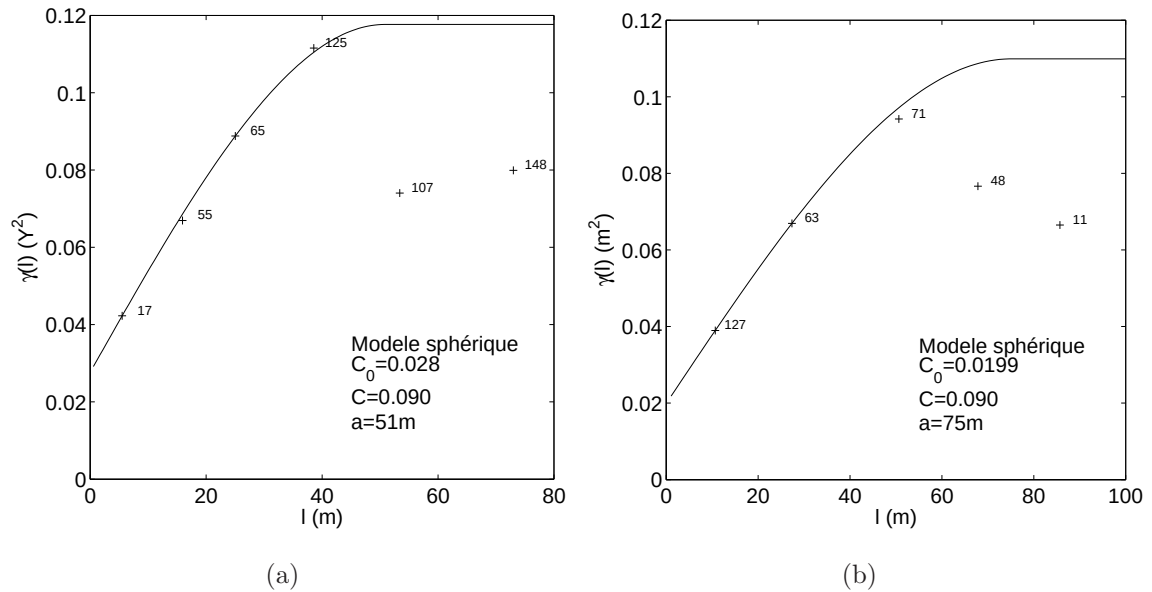


Figure 7.2: Variogramme omnidirectionnel de (a) l'élévation de l'argile (m^2) et (b) des transmissivités déduites des essais *in situ* ($\log_{10}(m^2/s))^2$

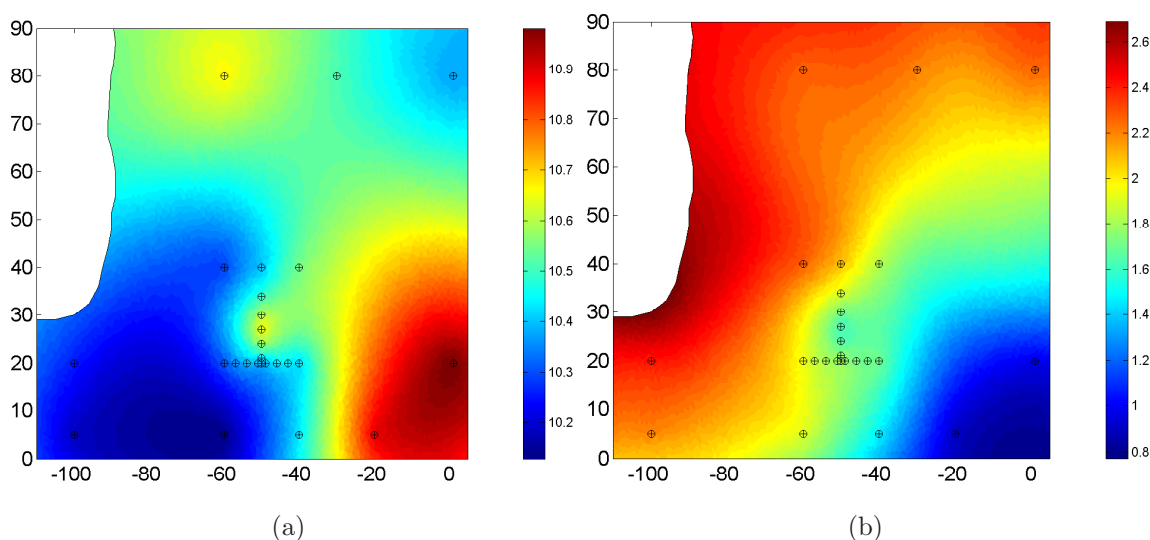


Figure 7.3: Sondages ayant atteint le substratum imperméable et cartes krigées de (a) l'élévation du substratum imperméable (m) et (b) de l'épaisseur saturée de l'aquifère de Lachenaie (m).

7.1.3 Champ initial de transmissivité

Dans le cadre de son projet de maîtrise, Gagnon (1998) a réalisé des essais de conductivité hydraulique à niveau descendant dans 36 des 48 piézomètres présents sur le site. L'interprétation des essais a été faite selon la méthode de Bouwer et Rice (1976) et indique que la conductivité hydraulique est comprise entre $10^{-4.00}$ et $10^{-2.82} m/s$ pour une moyenne de $10^{-3.36} m/s$. Ces résultats sont comparables aux conductivités moyennes obtenues ultérieurement par analyses granulométriques ($10^{-3.14} m/s$), par essais à niveau variable ($10^{-3.09} m/s$), par essais de pompage ($10^{-3.14} m/s$) (Chapuis *et al.*, 2005a) et à ceux obtenus par Géoradar ($10^{-3.13} m/s$) dans le secteur du puits (Gloaguen *et al.*, 2001).

Les mesures tirées de Gagnon (1998) ont été utilisées conjointement avec les épaisseurs saturées observées ou estimées par krigeage afin de calculer le variogramme expérimental de la transmissivité de l'aquifère (voir figure 7.2(b)). Le modèle de covariance ajusté et les 36 mesures expérimentales ont été utilisés afin de kriger un champ initial de transmissivités, celui-ci est présenté à la figure 7.4(a). Le champ de

conductivités hydrauliques (figure 7.4(b)) a été obtenu en divisant la transmissivité par l'épaisseur saturée ($K = T/(\hat{h} - z_{Sub})$) pour chacun des éléments de la grille d'éléments finis. La moyenne des conductivités pondérées par la surface relative de chaque élément est $10^{-3.43}m/s$.

7.1.4 Modèle numérique et paramètres de l'inversion

L'épaisseur saturée étant relativement faible par comparaison à l'extension de l'aquifère, un modèle numérique bidimensionnel a été jugé satisfaisant pour simuler l'écoulement de l'eau souterraine dans l'aquifère de Lachenaie. Le problème a été discrétisé en 10060 éléments finis triangulaires d'ordre 2. L'étang situé au nord-ouest du domaine a été modélisé à l'aide d'une condition frontière de type Dirichlet ayant une valeur de 13m. Pour toutes les autres frontières, les charges hydrauliques krigées ont été utilisées comme frontières à charges constantes. Les données disponibles ne permettant pas de statuer sur la présence d'un terme source, celui-ci a été supposé nul.

Le problème direct a été résolu avec la transmissivité plutôt qu'avec la relation $T = K(h - z_{Sub})$. De cette façon, le problème est demeuré linéaire ce qui a permis un gain appréciable en temps de calcul. Le champ de conductivités hydrauliques a été obtenu lors d'un post-traitement.

Le champ de T obtenu à la section précédente a été utilisé comme solution initiale pour l'inversion. Celle-ci a été réalisée avec un schéma d'amortissement exponentiel ayant un amortissement initial $\beta^0 = 0.025$ et une portée α de 15 itérations. Une contrainte relative ΔY de 4 et des contraintes absolues de 10^{-6} et 10^{-1} m/s ont été utilisées. Aucune contrainte sur les mesures de T n'a été imposée. Le processus itératif a été limité à 20 itérations. Le champ de charges utilisé pour l'inversion ($\hat{h}$) est le champ présenté à la figure 7.1.

7.2 Inversion de l'aquifère de Lachenaie

7.2.1 Champ calibré de transmissivités

Le champ de transmissivités obtenu suite à l'inversion est présenté à la figure 7.4(c). Bien que la plage des valeurs de T obtenues soit comparable aux valeurs initiales, la texture du champ est assez différente de l'image initialement soumise à l'algorithme d'inversion (figure 7.4(a)). En effet, des deux linéaments verticaux plus transmissifs qui étaient visibles dans le germe, seules quelques zones de plus forte transmissivité demeurent visibles après inversion ((-100,20), (-50,20) et (-60,85)). Par ailleurs, dans les secteurs (-70,60) et (-10,5), la transmissivité finale est augmentée alors que le phénomène inverse est observé près de la coordonnée (-20,90). Néanmoins, dans de nombreuses zones les modifications sont minimales.

Visuellement, la carte des conductivités hydrauliques optimisées montre moins de variations que le champ de transmissivités (7.4(d)). La moyenne du champ calibré est de $10^{-3.47} \text{ m/s}$ ce qui est comparable à la moyenne du champ initial, mais légèrement plus faible que la moyenne des mesures rapportées par Gagnon (1998) ($10^{-3.36} \text{ m/s}$). On note cependant que le regroupement de mesures situées près du puits biaise à la hausse cette moyenne. Toutes les valeurs sont situées à l'intérieur d'un intervalle compris entre $10^{-4.38}$ et $10^{-2.79} \text{ m/s}$ sans qu'aucune contrainte relative ou absolue n'ait été activée.

Quatre zones distinctes ((-100,10), (-20,10), (-20,90), (-10,55)) ressortent de l'image. Ces discontinuités pourraient être réelles. Mais, si on considère l'aquifère homogène, celles-ci pourraient trouver leur explication dans la présence d'erreurs de mesure sur h engendrant des erreurs d'estimation sur $\nabla \hat{h}$. C'est d'ailleurs ce que l'on suspecte près des coordonnées (-10,55). Le phénomène pourrait aussi être lié à la présence d'une recharge/décharge verticale sur le site. Les données disponibles ne permettant cependant pas de statuer sur une recharge, celle-ci a été supposée nulle lors de l'inversion.

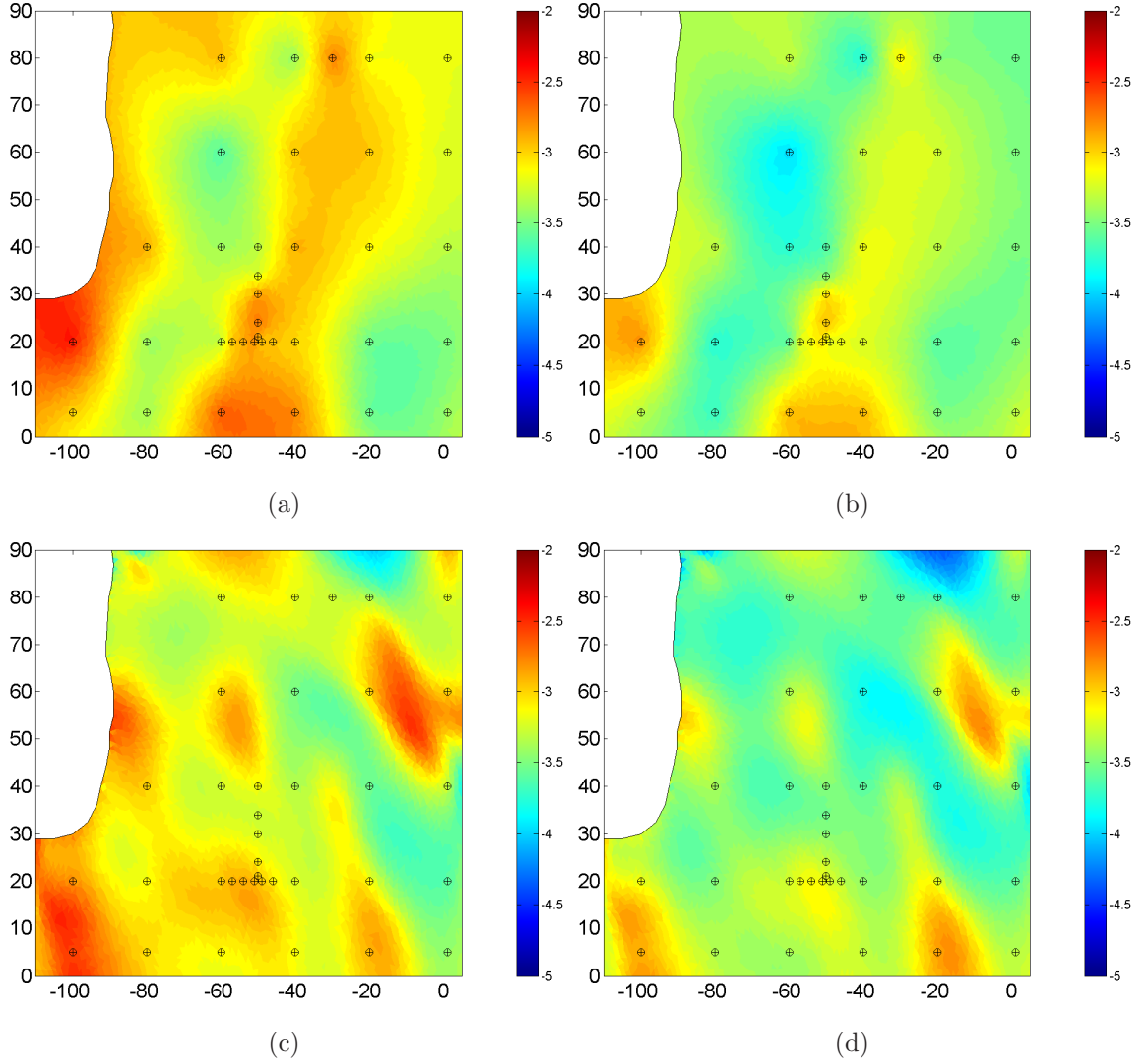


Figure 7.4: Localisation des essais de perméabilité *in situ* et résultats de l'inversion. (a) Transmissivités initiales ($\log_{10}(m^2/s)$), (b) conductivités hydrauliques initiales ($\log_{10}(m/s)$), (c) transmissivités optimisées ($\log_{10}(m^2/s)$) et (d) conductivités hydrauliques optimisées ($\log_{10}(m/s)$).

Puisque l'inversion n'a pas été contrainte par les mesures de K , celles-ci sont comparées aux conductivités hydrauliques optimisées sur la figure 7.5. Bien que la corrélation ne soit pas élevée (0.166), l'erreur moyenne de reproduction des mesures est $10^{0.0505} m/s$. Les mesures expérimentales de T et les valeurs numériques obtenues

après l'inversion sont présentées au tableau 7.2. Sept mesures expérimentales de T présentent une erreur $\|\epsilon_K\| > 0.45$. Trois d'entre elles sont situées au sud du site $((-100,5), (-60,5)$ et $(-20,5))$ alors que les quatre autres sont regroupées aux coordonnées $((-60,60), (-40,40), (-40,60)$ et $(-30,80))$. Compte tenu des sources d'erreurs possibles (incertitude sur le coefficient de forme, colmatage de la crépine, estimation de l'épaisseur saturée, développement, mesure des charges, arpentage des piézomètres), il semble que la méthode reproduise adéquatement les mesures de K . On ne peut attribuer la différence observée à un quelconque effet de support, Chapuis *et al.* (2005b) ayant observé que l'effet d'échelle sur le site était négligeable.

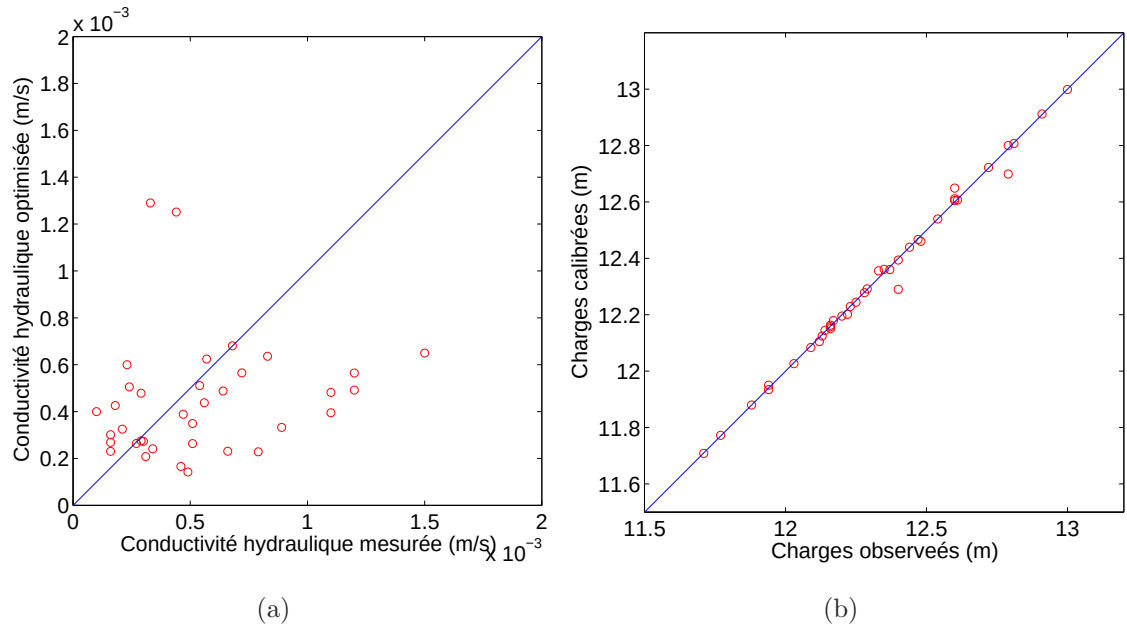


Figure 7.5: Comparaison des mesures et des résultats de l'inversion au site de Lachenaie. (a) Conductivité hydraulique (m/s) et (b) charge hydraulique (m).

7.2.2 Ajustement des mesures piézométriques

L'ajustement des charges était, préalablement à l'inversion, inférieur à 5cm . L'homogénéité de l'aquifère et de la solution initiale ainsi que l'absence de frontières de type Neumann ont favorisé cette faible erreur d'ajustement initiale. Néanmoins, l'inversion a permis une diminution du $MAE(h_{obs}^i, h_{obs}^R)$ d'un facteur de 3.7 et une diminution de l'erreur d'ajustement de $\hat{h}$ ($MAE(h^i, \hat{h})$) d'un facteur de 120 (voir le tableau 7.1). L'erreur d'ajustement des mesures piézométriques est, après inversion, de 1.21 cm. La différence moyenne entre le champ de charges final et le champ $\hat{h}$ de la figure 7.1 est de 3mm .

TAB. 7.1: Erreurs d'ajustement des charges piézométriques observées au site

Itération	de Lachenaie.	
	$MAE(h_{obs}^i, h_{obs}^R)$	$MAE(h^i, \hat{h})$
	(m)	(m)
0	0.0476	0.0387
20	0.0122	0.0030

Les charges observées et calculées sont comparées à la figure 7.5(b) alors que le tableau 7.2 montre la localisation des erreurs d'ajustement. À l'exception des mesures prises aux piézomètres (1,40), (-30,80) et (-100,20), les charges hydrauliques sont presque parfaitement ajustées après l'inversion. Ces piézomètres précédents contribuent pour un total de 52% à l'erreur finale d'ajustement. Il était possible d'obtenir une erreur d'ajustement plus faible en diminuant l'effet de pépité attribué à ces piézomètres. Cependant, les équipotentielles ainsi obtenues ne concordaient pas avec la piézométrie générale du site. Il a donc été jugé préférable de kriger avec un effet de pépité.

TAB. 7.2: Mesures expérimentales rapportées par Gagnon (1998) et valeurs obtenues après inversion aux points de mesures.

x	y	$\log_{10}K_{obs}$	$\log_{10}K_{obs}^{20}$	ϵ_K	h_{obs}	h_{obs}^{20}	ϵ_h
(m)	(m)	($\log_{10}(m/s)$)	($\log_{10}(m/s)$)	($\log_{10}(m/s)$)	(m)	(m)	(m)
-100	5	-3.357	-2.903	-0.454	12.330	12.355	0.025
-100	20	-2.824	-3.187	0.363	12.600	12.649	0.049
-90	80	-	-	-	13.000	12.999	-0.001
-80	5	-3.745	-3.371	-0.374	12.200	12.195	-0.005
-80	20	-3.796	-3.521	-0.275	12.440	12.439	-0.001
-80	40	-3.328	-3.411	0.083	12.810	12.807	-0.003
-60	20	-3.620	-3.296	-0.324	12.230	12.229	-0.001
-60	5	-2.959	-3.403	0.445	12.030	12.026	-0.004
-60	40	-3.796	-3.638	-0.158	12.540	12.539	-0.001
-60	60	-4.000	-3.398	-0.602	12.720	12.722	0.002
-60	80	-3.292	-3.579	0.287	12.910	12.912	0.002
-57	20	-3.244	-3.205	-0.040	-	-	-
-54	20	-3.167	-3.167	-0.000	12.170	12.179	0.009
-51	20	-3.081	-3.197	0.116	12.160	12.158	-0.002
-50	21	-3.143	-3.248	0.105	12.160	12.163	0.003
-50	30	-3.051	-3.478	0.427	12.290	12.292	0.002
-50	34	-3.538	-3.560	0.022	12.370	12.360	-0.010
-50	40	-3.678	-3.488	-0.189	12.480	12.460	-0.020
-50	24	-2.921	-3.308	0.388	12.220	12.201	-0.019
-50	20	-	-	-	12.160	12.151	-0.009
-50	27	-	-	-	12.250	12.244	-0.006
-49	20	-2.921	-3.249	0.328	12.140	12.144	0.004
-46	20	-3.194	-3.312	0.118	12.130	12.124	-0.006
-43	20	-	-	-	12.120	12.105	-0.015
-40	5	-2.959	-3.317	0.359	11.880	11.879	-0.001
-40	20	-3.292	-3.457	0.164	12.090	12.084	-0.006
-40	40	-3.180	-3.637	0.456	12.350	12.361	0.011

TAB. 7.2: Suite du tableau 7.2. Mesures expérimentales rapportées par Gagnon (1998) et valeurs obtenues après inversion aux points de mesures.

x	y	$\log_{10} K_{obs}$	$\log_{10} K_{obs}^{20}$	ϵ_K	h_{obs}	h_{obs}^{20}	ϵ_h
(m)	(m)	$(\log_{10}(m/s))$	$(\log_{10}(m/s))$	$(\log_{10}(m/s))$	(m)	(m)	(m)
-40	80	-3.796	-3.571	-0.225	12.790	12.800	0.010
-40	60	-3.310	-3.848	0.538	12.600	12.611	0.011
-30	80	-3.102	-3.641	0.539	12.790	12.699	-0.091
-20	5	-3.481	-2.889	-0.592	11.770	11.772	0.002
-20	20	-3.638	-3.222	-0.416	11.940	11.950	0.010
-20	80	-3.509	-3.682	0.174	12.600	12.605	0.005
-20	60	-3.268	-3.292	0.024	12.470	12.467	-0.003
-20	40	-3.337	-3.781	0.443	12.280	12.278	-0.002
1	5	-3.252	-3.359	0.107	11.710	11.708	-0.002
1	20	-3.469	-3.618	0.149	11.940	11.935	-0.005
1	80	-3.569	-3.578	0.010	12.610	12.607	-0.003
1	60	-3.538	-3.320	-0.217	12.400	12.394	-0.006
1	40	-3.523	-3.564	0.041	12.400	12.290	-0.110

7.3 Inversion contrainte par les mesures de conductivité

Afin d'évaluer l'apport des mesures de conductivité, une nouvelle inversion a été réalisée sous la contrainte d'une parfaite reproduction des mesures de K . Les champs de T et de K ainsi obtenus sont présentés à la figure 7.6. On remarque que l'intégration des mesures de K a peu apporté à l'inversion. L'allure générale des champs de paramètres est identique à ce qui a été obtenu à la section précédente. Plusieurs discontinuités dans les champs de paramètres sont néanmoins visibles. Celles-ci sont des manifestations du problème de Cauchy et apparaissent lorsque la différence entre la mesure et la valeur obtenue dans les éléments adjacents est importante. Le sillage de l'élément contraint est aussi parfois affecté.

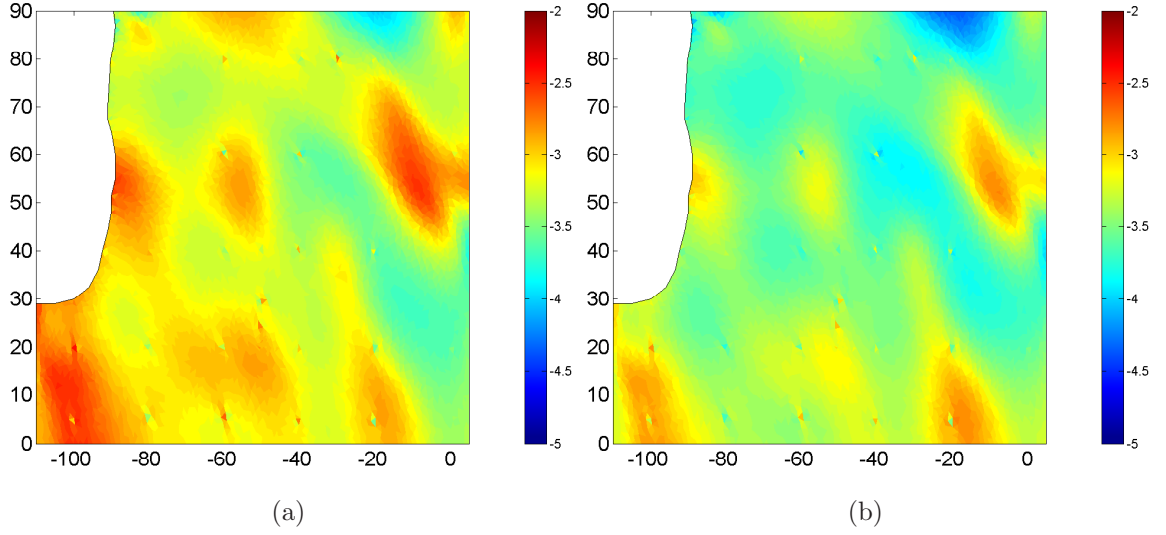


Figure 7.6: Résultat de l'inversion sous contrainte des mesures de T/K . (a) Champ de transmissivités ($\log_{10}(m^2/s)$) et (b) champ de conductivités hydrauliques ($\log_{10}(m/s)$).

Par ailleurs, l'impact sur les différentes erreurs d'ajustement des charges est négligeable. Les erreurs d'ajustement obtenues (voir le tableau 7.3) sont en effet presque identiques.

TAB. 7.3: Erreurs d'ajustement des charges piézométriques observées au site de Lachenaie.

Itération	$MAE(h_{Obs}^i, h_{Obs}^R)$	$MAE(h^i, \hat{h})$
	(m)	(m)
0	0.0476	0.0387
20	0.0125	0.0031

7.4 Discussion

La calibration d'un modèle numérique représentant un aquifère réel demeure un test important pour une méthode d'inversion. La présence d'erreurs de mesure sur la variable d'état et sur les paramètres mesurés, le respect des descriptions stratigraphiques et la reproduction d'essais de traceur ou de pompage sont difficilement intégrés lors de l'inversion.

L'objectif de ce chapitre n'était pas de faire une étude exhaustive du site de Lachenaie, mais plutôt d'évaluer si la méthode de l'estimation successive des flux était efficace dans un contexte réel d'application. Dans cette optique, nos résultats ont montré que la méthode pouvait à la fois caler presque parfaitement des mesures piézométriques tout en reproduisant relativement bien les mesures de conductivité faites sur le site.

L'écart observé entre les mesures de conductivité hydraulique et les valeurs obtenues par l'inversion est essentiellement attribué à l'imprécision des essais de conductivité hydraulique *in situ* et au fait que des erreurs piézométriques ont pu engendrer une mauvaise estimation du champ de gradients hydrauliques utilisé pour l'inversion. Par ailleurs, la présence d'une recharge, non considérée lors de l'inversion, peut également expliquer cet écart.

Nos résultats ont montré que l'apport des mesures de conductivité à l'inversion est faible et que même si le domaine ne contient pas de conditions frontières de type Neumann, le biais obtenu entre la moyenne des mesures expérimentales de K et la moyenne du champ de K est négligeable. Par ailleurs, le champ de conductivités hydrauliques obtenu possède une moyenne presque identique à celle des mesures rapportées par Gagnon (1998).

Conclusions

La résolution du problème inverse demeure un problème important en hydrogéologie. À ce jour, la plupart des méthodes d'inversion reposent sur des techniques d'optimisation non-linéaires qui sont coûteuses en temps de calcul. Cette thèse propose plutôt l'utilisation de la relation linéaire liant localement la conductivité et le gradient hydraulique pour l'obtention rapide d'une solution au problème inverse en hydrogéologie.

La méthode d'inversion proposée s'appuie sur une résolution itérative et discrète du problème de Cauchy s'apparentant à la méthode du modèle de comparaison. Parce qu'il n'y a pas d'optimisation en tant que tel, l'approche est de un à deux ordres de grandeur plus rapide que les méthodes d'inversion conventionnelles. De plus, le gain en rapidité n'entraîne pas de perte de calibration.

Nos résultats montrent qu'en présence d'erreurs d'estimation sur la charge hydraulique, l'ajout d'un amortissement apporte beaucoup de robustesse et de stabilité à l'inversion. Parmi les fonctions d'amortissement évaluées, le schéma d'amortissement exponentiel est celui qui a montré les meilleurs résultats. Pour le cas étudié, il est montré que les paramètres contrôlant la décroissance du coefficient d'amortissement n'exigent pas un ajustement délicat de la part de l'opérateur.

Nos expérimentations indiquent que la reconstruction du champ de transmissivités est adéquate même lorsqu'une estimation de la carte piézométrique est utilisée. De plus, la reconstruction du champ de paramètres et l'ajustement des charges s'améliore avec le nombre d'observations piézométriques à calibrer ce qui n'est pas nécessairement le cas pour les autres méthodes d'inversion.

La comparaison des inversions faites en régime permanent et transitoire indique que la reconstruction du champ de paramètres et la détermination des périmètres de protection bénéficient de l'information supplémentaire contenue dans la variation temporelle des charges hydrauliques.

La calibration d'un modèle numérique représentant l'aquifère expérimental de Lachenaie a montré que l'apport des mesures de conductivité à l'inversion demeure locale et contribue assez peu à la définition de l'ensemble des conductivités hydrauliques du site.

Éléments novateurs

L'approche proposée peut-être vue comme une extension de la méthode du modèle de comparaison (Ponzini et Lozej, 1982). Les points originaux développés dans cette thèse sont les suivants :

- développement théorique qui établit clairement le lien entre le modèle de comparaison et la résolution du problème de Cauchy ;
- inclusion d'une fonction d'amortissement qui assure des modifications graduelles du champ initial des paramètres et permet d'accroître la stabilité des résultats obtenus ;
- extension de la méthode du modèle de comparaison au cas transitoire ;
- extension au cas 3D ;
- utilisation de champs de charges krigées pour l'inversion.

Une autre contribution importante de cette thèse est le développement d'un programme d'inversion souple et flexible évoluant dans l'environnement Matlab et permettant la calibration de modèles numériques 2D et 3D en régime permanent ou transitoire. Ce programme est actuellement utilisé pour l'étude de l'aquifère régional de Châteauguay (Québec, Canada) dans le cadre de projet conjoint avec la Commission Géologique du Canada. Un transfert technologique vers des firmes de consultants est également en cours.

L'objectif général de cette thèse ainsi que les objectifs spécifiques ont été atteints. La méthode d'inversion qui en découle est rapide et peut être utilisée à partir d'un champ de charges krigées. Les évaluations réalisées ont démontré son applicabilité sur un cas réel et sur de multiples cas simulés.

Travaux ultérieurs

Les techniques actuelles d'interpolation des mesures piézométriques dans un espace tridimensionnel s'accrochent difficilement de la rareté des mesures, de l'influence des conditions frontières ou de la présence de termes source dans le champ de charges. Nous croyons que le développement de méthodes permettant la régionalisation adéquate des mesures piézométriques dans un espace tridimensionnel est une étape nécessaire et préalable à la réalisation d'inversions 3D en milieu professionnel par la méthode de l'estimation successive des flux. En ce sens, l'utilisation du krigeage avec une dérive externe obtenue numériquement pourrait permettre d'estimer correctement l'ensemble du champ piézométrique 3D.

Afin de limiter le développement de linéaments dans le champ de K , conséquence de l'indépendance du flux entre des tubes d'écoulement adjacents, diverses avenues pourraient être étudiées. Notamment, l'obtention de nouvelles valeurs de K par la méthode de l'estimation successive des flux sur une grille quelconque, l'utilisation de ces nouvelles valeurs à titre de valeur échantillon et leur régionalisation sur l'ensemble des partitions numériques par krigeage est une avenue à explorer. Celle-ci permettrait d'inclure plus aisément les mesures de K tout en générant un champ plus lisse.

Une étude stochastique complète devrait aussi permettre d'intégrer des champs de charges et des conditions frontières différents lors des inversions. En ce sens, une méthode de simulation de h assurant l'obtention de champs $\hat{h}$ réalistes physiquement est nécessaire.

Pour les écoulements non-saturés, la résolution du problème inverse consiste alors à la détermination d'un ensemble de fonctions différentes plutôt qu'à la détermination

de paramètres localement constants. D'un point de vue théorique, si un ou plusieurs champs pressiométriques sont connus, la méthode de l'estimation successive des flux permet de reconstruire ponctuellement les courbes de conductivité hydraulique en fonction de la succion. Cependant, le couplage du problème d'écoulement non-saturé à un problème non-linéaire comme le problème inverse risque d'engendrer une instabilité importante et une régularisation des paramètres à l'aide d'une formule empirique serait probablement nécessaire. Par ailleurs, l'approche repose sur une estimation du champ de succions ce qui, compte tenu de la rareté des mesures, est difficile à obtenir en pratique.

Références

- ACEVEDO, N. (1996). Étude hydrogéologique d'un aquifère à nappe libre, Lachenaie, Québec. Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal.
- ALCOLEA, A., MEDINA, A., CARRERA, J. et JODAR, J. (2002). Geostatistical inverse problem : A modified technique for characterizing heterogeneous fields. Dans *4th European Conference on Geostatistics for Environmental Applications*.
- ANDERSON, M. et WOESSNER, W. (1992). Applied Groundwater Modeling : Flow and advective simulation. Academic Press, New York.
- BEAR, J. et JACOBS, M. (1965). On the movement of water bodies injected into aquifer. *Journal of Hydrology*, 3, 37–57.
- BENOIT, N., PASQUIER, P., MARCOTTE, D. et NASTEV, M. (2005). Conditional Stochastic Inverse Modelling of the Châteauguay river Aquifers. ModelCare2005.
- BOUWER, H. et RICE, R. (1976). A slug test for determining hydraulic conductivity of unconfined aquifers with completely or partially penetrating wells. *Water Resources Research*, 12, 423–428.
- BROCHU, Y. (2002). Estimation directe des charges hydrauliques d'un aquifère par krigeage. Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal.
- BROCHU, Y. et MARCOTTE, D. (2003). A Simple Approach to Account for Radial Flow and Boundary Conditions When Kriging Hydraulic Head Fields for Confined Aquifers. *Mathematical Geology*, 35, 111–136.
- CAPILLA, J., GOMEZ-HERNANDEZ, J. et SAHUQUILLO, A. (1997). Stochastic simulation of transmissivity fields conditional to both transmissivity and piezo-

- metric data. 2. Demonstration on a synthetic aquifer. *Journal of Hydrology*, 203, 175–188.
- CARRERA, J., ALCOLEA, A., MEDINA, A., HIDALGO, J. et SLOOTEN, L. (2005). Inverse problem in hydrogeology. *Hydrogeology Journal*, 13, 206–222.
- CARRERA, J. et NEUMAN, S. (1986a). Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions : 1. Maximum likelihood method incorporating prior information. *Water Resources Research*, 22, 199–210.
- CARRERA, J. et NEUMAN, S. (1986b). Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions : 2. Uniqueness, stability, and solution algorithms. *Water Resources Research*, 22, 211–227.
- CHAPUIS, R., CHENAF, D., ACEVEDO, N., MARCOTTE, D., et CHOUTEAU, M. (2005a). Unusual drawdown curves for a pumping test in an unconfined aquifer at Lachenaie, Quebec : Field data and numerical modeling. *Canadian Geotechnical Journal*, *Sous presse*.
- CHAPUIS, R., DALLAIRE, V., MARCOTTE, D., CHOUTEAU, M., ACEVEDO, N. et GAGNON, F. (2005b). Evaluating the hydraulic conductivity at three different scales within an unconfined aquifer at Lachenaie, Quebec. *Canadian Geotechnical Journal*, *Sous presse*.
- CHAVENT, G., DUPUY, M. et LEMONIER, P. (1975). History matching by use of optimal theory. *Soc. Petroleum eng. Journal*, 15, 74–86.
- CHILES, J.-P. et DELFINER, P. (1999). Geostatistics : Modeling Spatial Uncertainty. Wiley-Interscience, New York, 1st edition.
- CHILES, J.-P. et GUILHEN, A. (1984). Variogrammes et krigeages pour la gravimétrie et le magnétisme. *Série Informatique Géologique*, 1, 455–468.
- CLIFTON, P. et NEUMAN, S. (1982). Effects of kriging and inverse modeling on conditional simulation of the Avra Valley aquifer in southern Arizona. *Water Resources Research*, 18, 1215–1234.

- COMSOL, A. (2004). Femlab 3.0 User and reference manual. Comsol AB, Stockholm, Sweden.
- COOLEY, R. L. (1977). A method of estimating parameters and assessing reliability for models of steady state groundwater flow ; 1, Theory and numerical properties. *Water Resources Research*, 13, 318–324.
- DAGAN, G. (1985). Stochastic modeling of groundwater flow by unconditional and conditional probabilities : the inverse problem. *Water Resources Research*, 21, 65–72.
- DAGAN, G. (1989). Flow and transport in porous formations. Springer-Verlag.
- DARCY, H. (1856). Les fontaines publiques de la ville de Dijon. V. Dalmont, Paris.
- DAVIS, A. (1986). Deterministic modeling of dispersion in heterogeneous permeable media. *Ground Water*, 24, 609–615.
- DAVIS, M. (1987). Production of conditional simulations via the LU triangular decomposition of the covariance matrix. *Mathematical Geology*, 176, 149–265.
- DAY, M. et HUNT, B. (1977). Groundwater transmissivities in North Canterbury. *Journal of Hydrology, N.Z.*, 16, 158–16.
- DE MARSILY, G. (1978). De l'identification des systèmes hydrologiques. Thèse de doctorat d'état, Université Paris VI.
- DE MARSILY, G. (1986). Quantitative Hydrogeology : Groundwater Hydrology for Engineers. Academic Press, Londres, Angleterre, 1st edition.
- DE MARSILY, G., DELHOMME, J. P., COUDRAIN-RIBSTEIN, A., et LAVENUE, A. M. (2000). Four decades of inverse problems in hydrogeology. *Geological Society of America*, 348, 1–17.
- 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, South Lake Tahoe, CA. Dans *in Geostatistics for Natural Resources Characterization 2nd NATO Advanced Study Institute*, Édité par G. V. et al., volume 2, D. Reidel, Noewell, Mass., 831–849.

- DELHOMME, J. (1976). Applications de la théorie des variables régionalisées dans les sciences de l'eau. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI.
- DELHOMME, J. (1978). Kriging in the hydrosiences. *Advances in Water Resources*, 1, 251–266.
- DELHOMME, J. (1979a). Kriging under boundary conditions. *American Geophysical Union Conference, San Francisco, États-Unis*.
- DELHOMME, J. (1979b). Spatial variability and uncertainty in groundwater flow parameters : A geostatistical approach. *Water Resources Research*, 1, 269–280.
- DOHERTY, J. (2002). Manual for PEST, 5th edition. *Brisbane, Australia : Watermark Numerical Computing*.
- DOHERTY, J. (2003). Groundwater model calibration using pilot points and regularisation. *Ground Water*, 41, 170–177.
- EMSELLEM, Y. et DE MARSILY, G. (1971). An automatic solution for the inverse problem. *Water Resources Research*, 7, 1264–1283.
- FREEZE, R. (1975). A stochastic-conceptual analysis of one-dimensional groundwater flow in nonuniform homogeneous media. *Water Resources Research*, 11, 725–741.
- FRIND, E. et PINDER, G. (1973). Galerkin solution of the inverse problem for aquifer transmissivity. *Water Resources Research*, 9, 1397–1410.
- GAGNON, F. (1998). Solution du problème inverse en hydrogéologie à l'aide de méthodes géostatistiques. Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal.
- GELHAR, L. (1993). Stochastic subsurface hydrology. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.
- GLOAGUEN, E., CHOUTEAU, M., MARCOTTE, D. et CHAPUIS, R. (2001). Estimation of hydraulic conductivity of an unconfined aquifer using cokriging of GPR and hydrostratigraphic data. *Journal of Applied Geophysics*, 47, 135–152.

- GOMEZ-HERNANDEZ, J., SAHUQUILLO, A. et CAPILLA, J. (1997). Stochastic simulation of transmissivity fields conditional to both transmissivity and piezometric data - I. Theory. *Journal of Hydrology*, 203, 162–174.
- GOMEZ-HERNANDEZ, J. J., HENDRICKS-FRANSSSEN, H. J. W. M., SAHUQUILLO, A. et CAPILLA, J. (2000). Calibration of 3-D transient groundwater flow models for fractured rock. Dans *ModelCARE'99 Conference*, number 265, IAHS Publication, 185–194.
- GUO, X. et ZHANG, C.-M. (2000). Hydraulic gradient comparison method to estimate aquifer hydraulic parameters under steady-state conditions. *Ground Water*, 38, 815–826.
- GUTJAHR, A. (1981). Kriging in stochastic hydrology : Assessing the worth of data. Dans *Conference on Spatial Variability in Hydrologic Modeling*, AGU, Fort Collins, Colorado.
- HADAMARD, J. (1932). Le Problème de Cauchy. Herman et Cie., Paris.
- HENDRICKS-FRANSSSEN, H. et GOMEZ-HERNANDEZ, J. (2003). Impact of measurement errors in stochastic inverse conditional modelling by the self-calibrating approach. *Advances in Water Resources*, 26, 501–511.
- HENDRICKS-FRANSSSEN, H., GOMEZ-HERNANDEZ, J., CAPILLA, J. et SAHUQUILLO, A. (1999). Joint simulation of transmissivity and storativity fields conditional to steady-state and transient hydraulic head data. *Advances in Water Resources*, 23, 1–13.
- HENDRICKS-FRANSSSEN, H., STAUFFER, F. et KINZELBACH, W. (2004). Joint estimation of transmissivities and recharges - application : stochastic characterization of well capture zones. *Journal of Hydrology*, 294, 87–102.
- HOEKSEMA, R. et KITANIDIS, P. (1984). Application of the geostatistical approach to the inverse problem in two-dimensional groundwater modeling. *Water Resources Research*, 20, 1003–1020.

- HOEKSEMA, R. et KITANIDIS, P. (1985). Analysis of the spatial structure of properties of selected aquifers. *Water Resources Research*, 21, 563–572.
- HU, L. (2000). Gradual Deformation and iterative calibration of Gaussian-related stochastic models. *Mathematical Geology*, 32, 87–108.
- HU, L. Y., BLANC, G. et NOETINGER, B. (2001). Gradual deformation and iterative calibration of sequential stochastic simulations. *Mathematical Geology*, 33, 475–489.
- HUGHSON, D. et GUTJAHR, A. (1998). Effect of conditioning randomly heterogeneous transmissivity on temporal hydraulic head measurements in transient two-dimensional aquifer flow. *Stochastic Hydrology and Hydraulics*, 12, 155–170.
- HUNT, B. et WILSON, D. (1974). Graphical calculation of aquifer transmissivities in Northern Canterbury, New Zealand. *Journal of Hydrology, N.Z.*, 13, 66–80.
- JOHNSON, R. (2000). Miller and Freund's Probability and statistics for engineers. Prentice-Hall inc.
- JOURNEL, A. et HUIJBREGTS, C. (1978). Mining Geostatistics. Acad. Press.
- KEIDSER, A. et ROSBJERG, D. (1991). A Comparison of Four Inverse Approaches to Groundwater Flow and Transport Parameters Identification. *Water Resources Research*, 27, 2219–2232.
- KITANIDIS, P. et VOMVORIS, E. (1983). Geostatistical approach to the inverse problem in groundwater modeling (steady-state) and one-dimensional simulations. *Water Resources Research*, 19, 677–690.
- KNOWLES, I., W. R. (1996). A variational solution of the aquifer transmissivity problem. *Inverse problem*, 12, 953–963.
- LAROCQUE, M., DELAY, F. et BANTON, O. (2003). A comparison of two stochastic inverse methods in a field-scale application. *Ground Water*, 41, 15–23.
- LAVENUE, A. (1998). Sur une nouvelle méthode de points pilotes en problèmes inverse en hydrogéologie engendrant un ensemble de simulations conditionnelles de

champs de transmissivité. Thèse de doctorat, École des mines de Paris, Fontainebleau.

LAVENUE, A. et DE MARSILY, G. (2001). Three dimensional interference test interpretation in a fractured aquifer using the pilot-point method. *Water Resources Research*, 32, 2659–2675.

LAVENUE, A. et PICKENS, J. (1992). Application of a coupled adjoint-sensitivity and kriging approach to calibrate a groundwater flow model. *Water Resources Research*, 28, 1543–1569.

LAVENUE, M., RAMA RAO, B., DE MARSILY, G. et MARIETTA, M. (1995). Pilot point methodology for automated calibration of an ensemble of conditionally simulated transmissivity fields : 2. Application. *Water Resources Research*, 31, 495–516.

LEVENBERG, K. (1944). A method for the solution of certain problems in least-squares. *Quarterly Applied Math*, 2, 164–168.

LUENBERGER, D. G. (1973). Introduction to linear and nonlinear programming. Addison-Wesley Publishing Company, Reading, Massachusetts.

MARCOTTE, D. (1996). Fast variogram computation with FFT. *Computer and Geoscience*, 22, 1175–1186.

MARCOTTE, D. et CHOUTEAU, M. (1993). Gravity data transformation by kriging. Dans *Geostatistics Tròia 1992*, Édité par A. Soares, volume 1, Kluwer Academic, Dordrecht, The Netherlands, 249–269.

MARQUARDT, D. (1963). An Algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters. *SIAM Journal Applied Math*, 11, 431–441.

MATHERON, G. (1965). Les variables régionalisées et leur estimation. Une application de la théorie des fonctions aléatoires aux sciences de la nature. Masson, Paris.

MCLAUGHLIN, D. et TOWNLEY, L. (1996). A reassessment of the groundwater inverse problem. *Water Resources Research*, 32, 1131–1161.

- MIZELL, S., GUTJAHR, A. et GELHAR, L. (1982). Stochastic analysis of spatial variability in two-dimensional steady groundwater flow assuming stationary and non-stationary heads. *Water Resources Research*, 18, 1053–1067.
- NELSON, R. (1960). In-Place measurement of permeability in heterogeneous media, 1. Theory of a proposed method. *Journal of Geophysical Research*, 65, 1753–1758.
- NELSON, R. (1961). In-Place measurement of permeability in heterogeneous media, 2. Experimental and computational considerations. *Journal of Geophysical Research*, 66, 2469–2478.
- NELSON, R. (1968). In-place determination of permeability distribution for heterogeneous porous media through analysis of energy dissipation. *Journal of Society Petroleum Engineers*, 8, 33–42.
- NELSON, R. et CEARLOCK, D. (1967). Analysis and predictive methods for ground water flow in large heterogeneous systems. Dans *National Symposium on Ground-Water Hydrology*, American Water Resources Association, 301–318.
- PASQUIER, P. et MARCOTTE, D. (2005). Solving the groundwater inverse problem by successive flux estimation. Dans *geoENV V, Geostatistics for environmental applications*, Quantitative Geology and Geostatistics, GeoENVia, Kluwer Academic Publishers.
- PINDER, F. et GRAY, W. (1977). Finite element simulation in surface and subsurface hydrology. Academic Press, 295 p.
- PONZINI, G. et LOZEJ, A. (1982). Identification of aquifer transmissivities : The comparison model method. *Water Resources Research*, 18, 597–622.
- RAMA RAO, B., LAVENUE, M., DE MARSILY, G. et MARIETTA, M. (1995). Pilot point methodology for automated calibration of an ensemble of conditionally simulated transmissivity fields : 1. Theory and computational experiments. *Water Resources Research*, 31, 475–493.
- RENARD, P. et DE MARSILY, G. (1997). Calculating equivalent permeability : a review. *Advances in Water Resources*, 20, 253–278.

- RICE, W. et GORELICK, S. (1985). Geological inference from low net transmissivity determination : three cases studies. *Water Resources Bulletin*, 21, 919–930.
- ROTH, C., CHILES, J.-P. et DE FOUQUET, C. (1998). Combining geostatistics and flow simulators to identify transmissivity. *Advances in Water Resources*, 21, 555–565.
- RUBIN, Y. et DAGAN, G. (1987). Stochastic identification of transmissivity and effective recharge in steady groundwater flow : 1 Theory. *Water Resources Research*, 23, 1185–1192.
- RUBIN, Y. et DAGAN, G. (1992). Conditional estimation of solute travel time in heterogeneous formations : Impact of transmissivity measurements. *Water Resources Research*, 28, 1033–1040.
- SAGAR, B., YAKOWITZ, S. et DUCKSTEIN, L. (1975). A direct method for the identification of the parameters of dynamic nonhomogeneous aquifers. *Water Resources Research*, 11, 563–570.
- SAHUQUILLO, A., CAPILLA, J., GOMEZ-HERNANDEZ, J. et ANDREU, J. (1992). Conditional Simulation of transmissivity fields honouring piezometric data. Dans *Hydraulic Engineering Software IV, Fluid Flow Modeling*, Édité par Blain et Cabrera, volume 2, Elsevier Science, New York, 201–214.
- SCOTT, D. (1992). Evaluation of flow net analysis for aquifer identification. *Ground Water*, 30, 755–764.
- STALLMAN, R. (1956). Numerical analysis of regional water levels to define aquifer hydrology. *EOS Trans. AGU*, 37, 451.
- SUN, N.-Z. (1994). Inverse Problem in Groundwater modeling. Kluwer Academic Publisher, Dordrecht.
- THE MATHWORKS, I. (2004). MATLAB User's Guide, version 7. The MathWorks Inc., South Natick, MA.

- THEIS, C. (1935). The relation between the lowering of the piezometric surface and the rate and duration of discharge of a well using groundwater storage. *Trans. Amer. Geophys. Union*, 16, 519–524.
- TODD, D. K. (1980). Groundwater hydrology, volume 535. Wiley, New-York, 2nd edition.
- TONKIN, M. et LARSON, S. (2002). Kriging water levels with a regional-linear and point logarithmic drift. *Ground Water*, 33, 185–193.
- WOODBURY, K. (2003). Inverse engineering handbook. CRC Press, New York.
- YAKOWITZ, S. et DUCKSTEIN, L. (1980). Instability in aquifer identification : Theory and case studies. *Water Resources Research*, 16, 1045–1064.
- YEH, T.-C., GUTJAHR, A. et JIN, M. (1995). Iterative cokriging-like technique for ground-water flow modeling. *Ground Water*, 33, 33–41.
- YEH, W.-G. (1986). Review of Parameter Identification Procedures in Groundwater Hydrology : The Inverse Problem. *Water Resources Research*, 22, 95–108.
- ZIMMERMAN, D., DE MARSILY, G., GOTWAY, C. A., MARIETTA, M., AXNESS, C., BEAUHEIM, R., BRAS, R., CARRERA, J., DAGAN, G., DAVIES, P. B., GALLEGOS, D. P., GALLI, A., GOMEZ-HERNANDEZ, J., GRINDROD, P., GUTJAHR, A. L., KITANIDIS, P., LAVENUE, A., MCLAUGHLIN, D., NEUMAN, S., RAMARAO, B., RAVENNE, C. et RUBIN, Y. (1998). A comparison of seven geostatistically based inverse approaches to estimate transmissivities for modeling advective transport by groundwater flow. *Water Resources Research*, 34, 1373–1413.

Annexe A

Exemples numériques simples

A.1 Solution analytique de Thiem

L'équation de Thiem est utilisée afin de résoudre analytiquement un problème d'écoulement dans une nappe captive en régime permanent (problème direct). Les données proviennent de Todd (1980) en page 127 ($Q = 2500m^3/d$, $s = 0.000206$, $r = 60m$, $T^R = 1110m^2/d$).

Afin de calculer les gradients hydrauliques ∇h^R et ∇h^i , les charges sont calculées à $r = 60m$ et $r = 60.05m$ ($\nabla h = (h(60.05) - h(60))/0.05$). Une seule itération est réalisée avec un amortissement $\beta = 0$ et une transmissivité initiale $T^0 = 2800m^2/d$. Le tableau suivant montre les principales étapes de calcul ayant permis de retrouver la transmissivité de référence à partir d'un germe initial à $2800m^2/d$.

t (d)	λ_k	$\ \nabla h_k^R\ _2$	$\ \nabla h_k^0\ _2$	$\delta_k = \frac{\ \nabla h_k^0\ _2 + \beta^i}{\ \nabla h_k^R\ _2 + \beta^i}$	$T_k^1 = T^0 \cdot \delta_k \cdot \lambda_k$ (m^2/d)
∞	1	0.00668841	0.00265148	0.39642857	1110.00000001

TAB. A.1: Exemple numérique simple en régime permanent utilisant l'équation de Thiem pour la solution du problème direct.

A.2 Solution analytique de Theis

L'équation de Theis est utilisée afin de résoudre analytiquement un problème d'écoulement en régime transitoire. Les données proviennent toujours de Todd (1980) en page 127. Néanmoins, contrairement à ce dernier, le temps t est en jours en non en secondes. Les tableaux suivant montrent les principales étapes de calcul ayant permis de retrouver la transmissivité de référence à partir d'un germe initial à $2800m^2/d$.

TAB. A.2: Exemple numérique simple en régime transitoire utilisant l'équation de Theis pour la solution du problème direct.

t (d)	λ_k $(t_k - t_{k-1})/t_f$	$\ \nabla \hat{h}_k\ _2$	$\ \nabla h_k^0\ _2$	$\delta_k = \frac{\ \nabla h_k^0\ _{2+\beta^i}}{\ \nabla h_k^R\ _{2+\beta^i}}$	$T_k^1 = T^0 \cdot \delta_k \cdot \lambda_k$ (m^2/d)
1.0	0.01250	0.00668729	0.00265130	0.39646857	13.87640001
1.5	0.00625	0.00668767	0.00265136	0.39645524	6.93796666
2.0	0.00625	0.00668785	0.00265139	0.39644857	6.93784999
2.5	0.00625	0.00668797	0.00265141	0.39644457	6.93777999
3.0	0.00625	0.00668804	0.00265142	0.39644190	6.93773333
4.0	0.01250	0.00668813	0.00265143	0.39643857	13.87534999
5.0	0.01250	0.00668819	0.00265144	0.39643657	13.87527999
6.0	0.01250	0.00668823	0.00265145	0.39643524	13.87523333
8.0	0.02500	0.00668827	0.00265146	0.39643357	27.75034999
10.0	0.02500	0.00668830	0.00265146	0.39643257	27.75027999
12.0	0.02500	0.00668832	0.00265146	0.39643190	27.75023332
14.0	0.02500	0.00668833	0.00265147	0.39643143	27.75019999
18.0	0.05000	0.00668835	0.00265147	0.39643079	55.50031110
24.0	0.07500	0.00668837	0.00265147	0.39643024	83.25034999
30.0	0.07500	0.00668838	0.00265147	0.39642990	83.25027999
40.0	0.12500	0.00668838	0.00265147	0.39642957	138.75034999
50.0	0.12500	0.00668839	0.00265147	0.39642937	138.75027999
60.0	0.12500	0.00668839	0.00265147	0.39642924	138.75023332
80.0	0.25000	0.00668840	0.00265148	0.39642907	277.50034999
$\sum \lambda_k = 1$				$\sum T^0 \cdot \delta_k \cdot \lambda_k$	1110.006810953955

Annexe B

Programme d'inversion développé

B.1 Programme *HydroGeo_Inv*

B.2 Exemples de fichiers de paramètres

Annexe C

Évaluation sommaire du logiciel d'éléments finis Femlab 3.0a

Une évaluation sommaire du logiciel d'éléments finis Femlab version 3.0a a été réalisée en comparant les résultats numériques aux solutions analytiques de Thiem et de Dupuit. Le problème considéré est un aquifère circulaire ayant un rayon extérieur (r_a) de 1000 m, une épaisseur de 10m (b) et une conductivité hydraulique homogène (K) de $1 \times 10^{-5} m/s$. Un puits de 1m de rayon (r_w) est situé au centre du domaine. Des conditions frontières de type Dirichlet valant $h_a = 100m$ et $h_w = 60m$ sont imposées respectivement sur la périphérie de l'aquifère et sur la périphérie du puits. Le domaine est discrétisé en 36582 éléments triangulaires d'ordre 2. Un solveur non-linéaire est utilisé pour résoudre numériquement le problème d'écoulement en nappe libre.

$$Q_{Thiem} = -2\pi K b (h_a - h_w) / \ln(r_a/r_w) \quad (C.1)$$

$$Q_{Dupuit} = -\pi K (h_a^2 - h_w^2) / \ln(r_a/r_w) \quad (C.2)$$

L'évaluation du logiciel d'éléments finis a été réalisée en comparant le débit analytique donné par les formules C.1 et C.2 à celui estimé numériquement. Par la suite, le débit analytique ainsi que la charge à $r = r_w$ ont été supposés connus ce qui a permis le calcul des charges entre le puits et la frontière. 500 points d'évaluation ont été utilisés pour le calcul de l'erreur de reproduction des charges. Les résultats sont présentés au tableau C.1. Ceux-ci indiquent que l'erreur relative entre les débits analy-

tiques et numériques est toujours inférieure à 0.2% alors que l'erreur de reproduction des charges est inférieure à 1 mm.

TAB. C.1: Comparaison des résultats numériques fournis par Femlab aux solutions analytiques de Thiem et de Dupuit.

Formule	Q_{Ana}	Q_{Num}	Erreur relative	$MAE(h_{Ana}, h_{Num})$
Analytique	(m^3/s)	(m^3/s)	(%)	(m)
Thiem	-0.00363834	-0.00363513	0.08805853	0.00030146
Dupuit	-0.02910670	-0.02905886	0.16434611	0.00044950

Annexe D

Évaluation de l'algorithme de trajectographie

Une évaluation de l'algorithme a été réalisée en comparant des résultats numériques avec les solutions analytiques développées par Bear et Jacobs (1965) pour un aquifère respectant les hypothèses de Dupuit (Todd, 1980). Pour un puits situé en (x_w, y_w) , pompant à un débit Q_w et affecté d'un flux régional $q_o = T i$, le temps de transfert entre une particule injectée en (x, y) et le puits est donnée par :

$$t = \frac{(x - x_w)n}{q_o} - \frac{Q_w n}{2\pi b q_o^2} \ln \frac{\sin(2\pi b q_o (y - y_w)/Q_w + \theta)}{\sin \theta} \quad y \neq y_w \quad (\text{D.1})$$

$$t = \frac{(x - x_w)n}{q_o} - \frac{Q_w n}{2\pi b q_o^2} \ln (1 + 2\pi b q_o (x - x_w)/Q_w) \quad y = y_w \quad (\text{D.2})$$

avec

$$\theta = \arctan \frac{(y - y_w)}{(x - x_w)} \quad (\text{D.3})$$

Afin de minimiser l'influence des conditions frontières et les erreurs de discrétisation, un modèle numérique de grande taille ($6000m \times 6000m$), constitué de 23 026 éléments quadratiques a été utilisé. Les conditions frontières ont été choisies de façon à engendrer un gradient hydraulique régional de 7.5×10^{-5} . Le débit du puits est de $Q_w = 0.001571m^3/sec$ et est situé en $(x_w = 2500, y_w = 3000)$ au sein d'un aquifère homogène de transmissivité $1 \times 10^{-3}m^2/s$. La porosité de l'aquifère est $n = 0.3$, l'épaisseur b de $10m$ et le flux hydraulique régional vaut $q_o = 7.5 \times 10^{-7}m^2/s$.

L'évaluation de l'algorithme a été réalisée pour deux particules non-réactives situées en amont du puits. Les résultats sont présentés au tableau D.1. La trajectoire de la particule initialement située en (4000,3075) est présentée à la figure D.1.

TAB. D.1: Comparaison des temps de transfert numériques et analytiques.

Position initiale de la particule	Solution analytique (Années)	Solution numérique (Années)	Erreur relative %
(4000,3075)	17.88280	17.93409	-0.28682
(4000,3000)	17.40714	17.43525	-0.16150

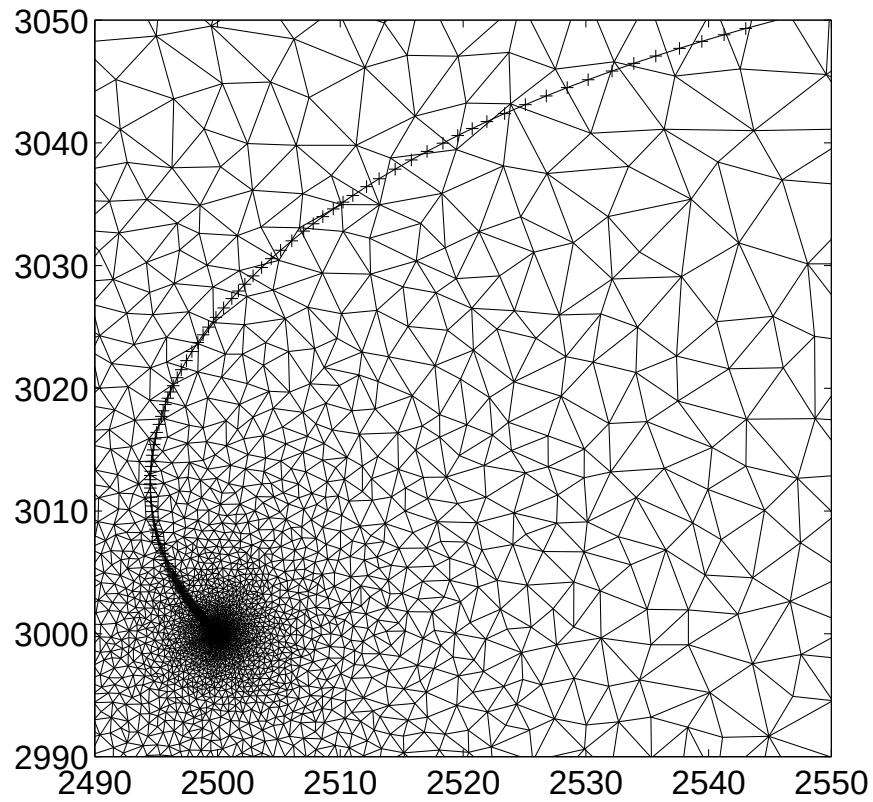


Figure D.1: Trajectoire d'une particule initialement située en (4000,3075).